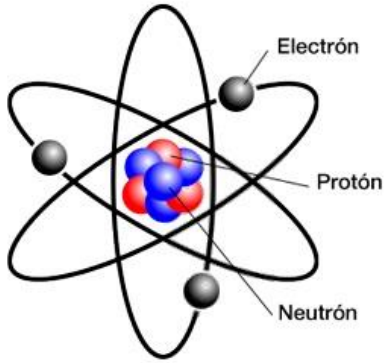
Elétrons em átomos

- **Rutherford** supôs que os elétrons orbitavam o núcleo da mesma forma que os planetas orbitam em torno do sol.

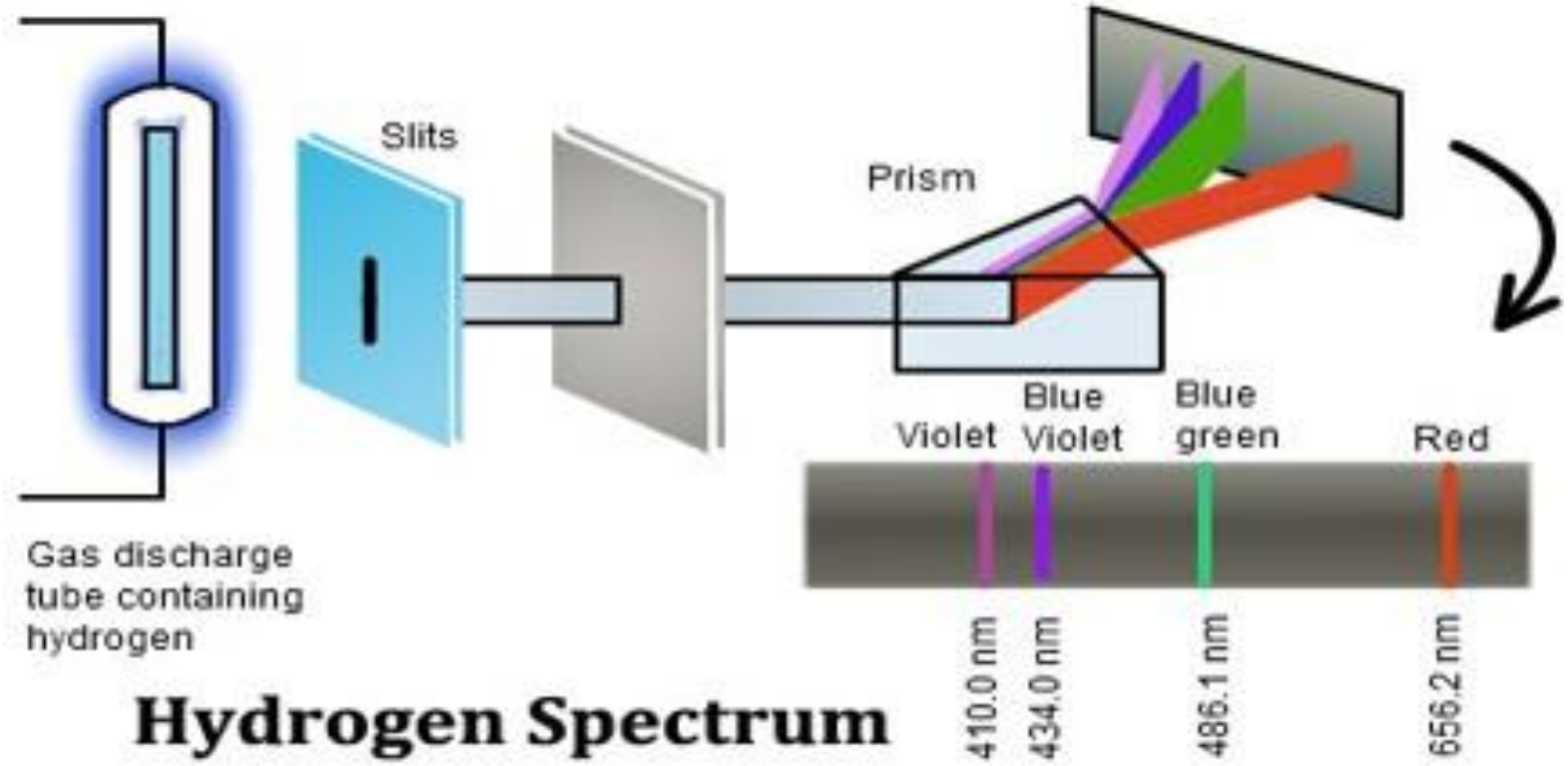
- Entretanto, uma partícula carregada movendo em uma trajetória circular deve perder energia.

- Isso significa que o átomo deve ser instável de acordo com a teoria de Rutherford.



Elétrons em átomos

- **Neils Bohr** observou o espectro de linhas de determinados elementos e admitiu que os elétrons estavam confinados em estados específicos de energia. Esses foram denominados <u>órbitas</u>.



Espectros de linhas e o modelo de Bohr

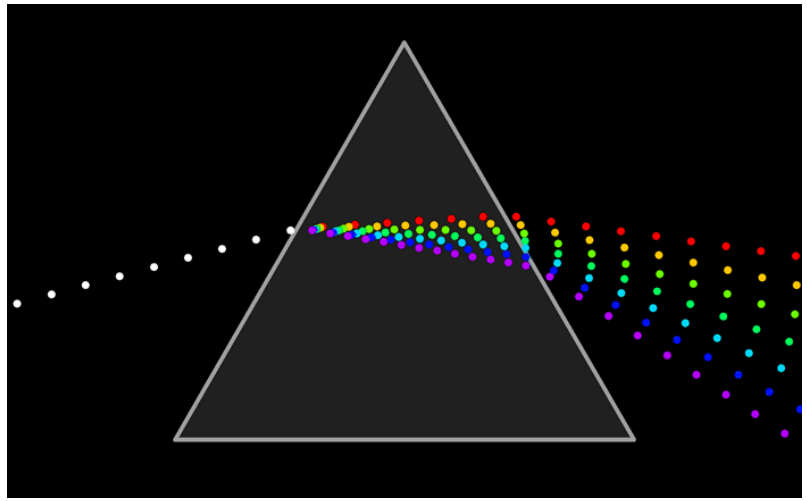
Espectros de linhas

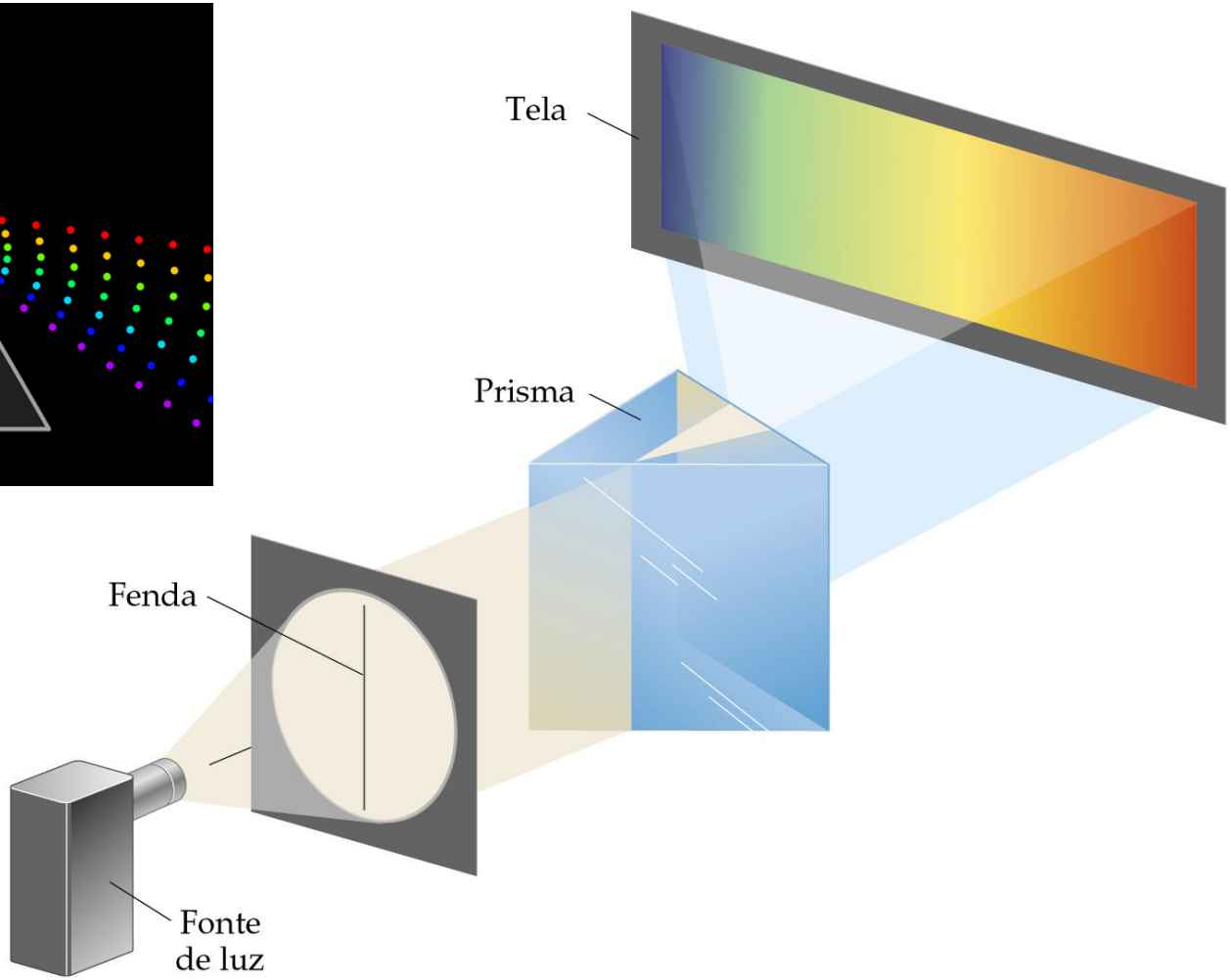
- A radiação composta por um único comprimento de onda é chamada de monocromática.

- A radiação que varre uma matriz completa de diferentes comprimentos de onda é chamada de contínua.

- A luz branca pode ser separada em um espectro contínuo de cores.

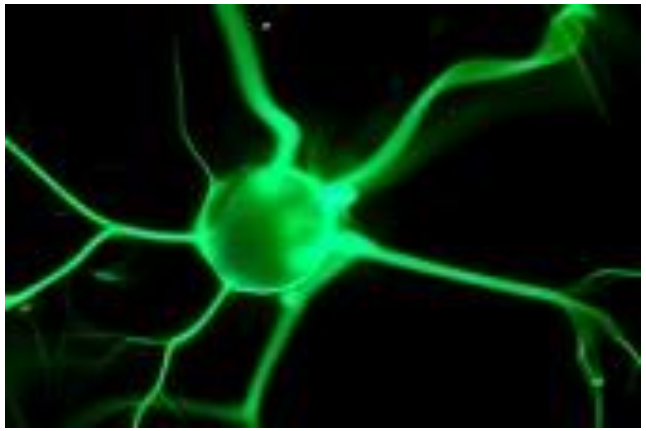
Espectros de linhas e o modelo de Bohr

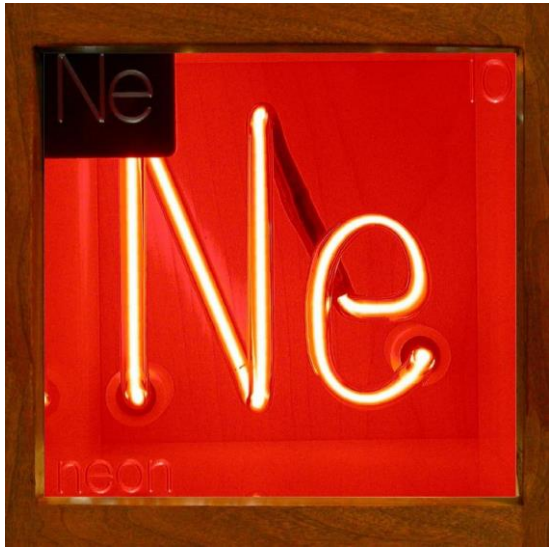




Observe que não há manchas escuras no espectro contínuo, que corresponderiam a linhas diferentes.

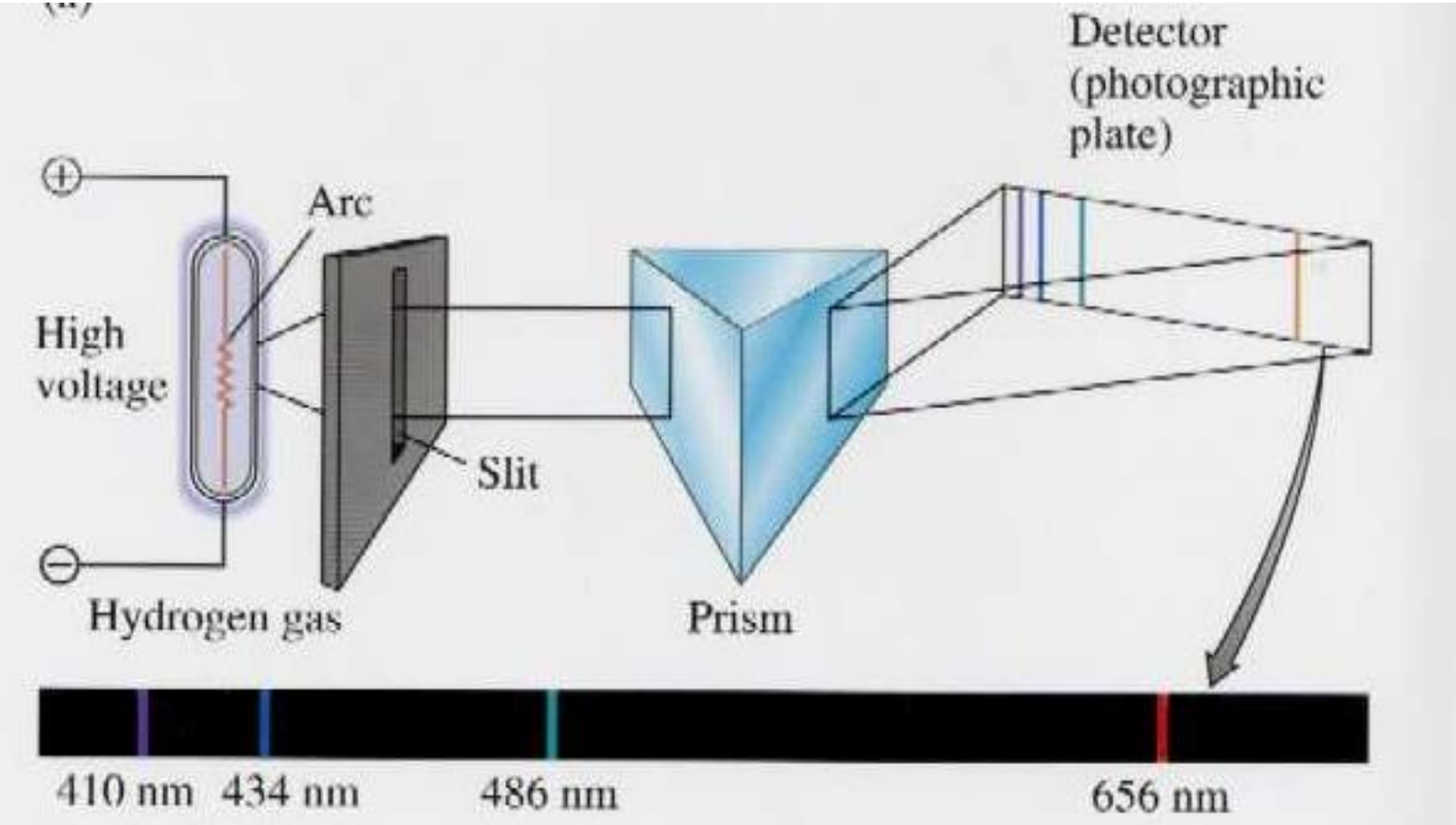
Espectros de linhas e o modelo de Bohr





Espectros de linhas e o modelo de Bohr

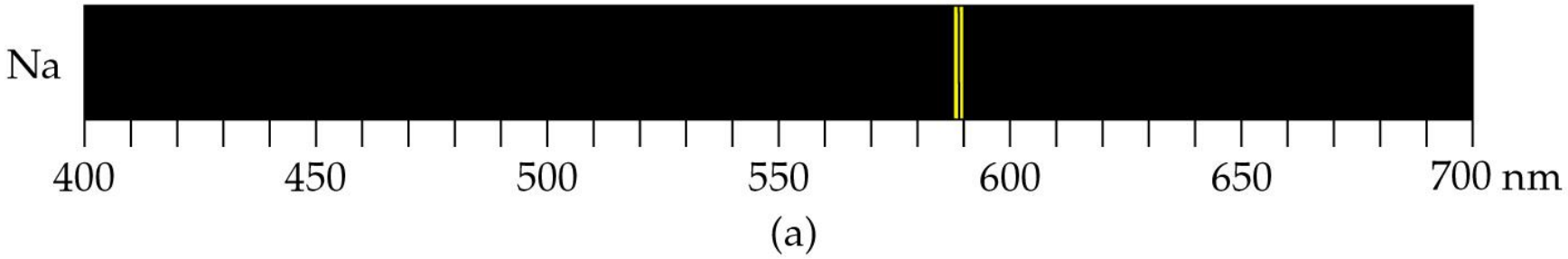
Espectros de linhas e o modelo de Bohr



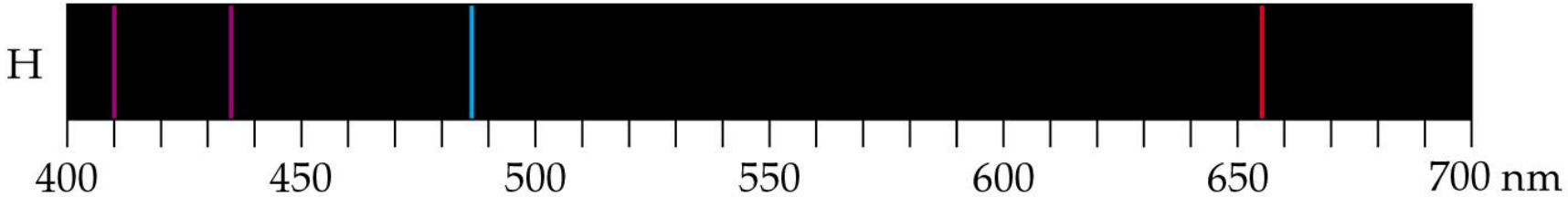
Espectros de linhas e o modelo de Bohr

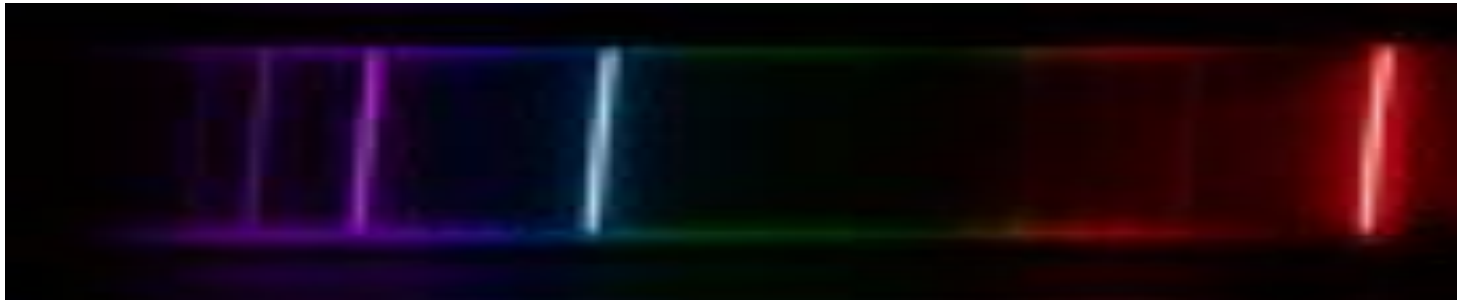
O modelo de Bohr

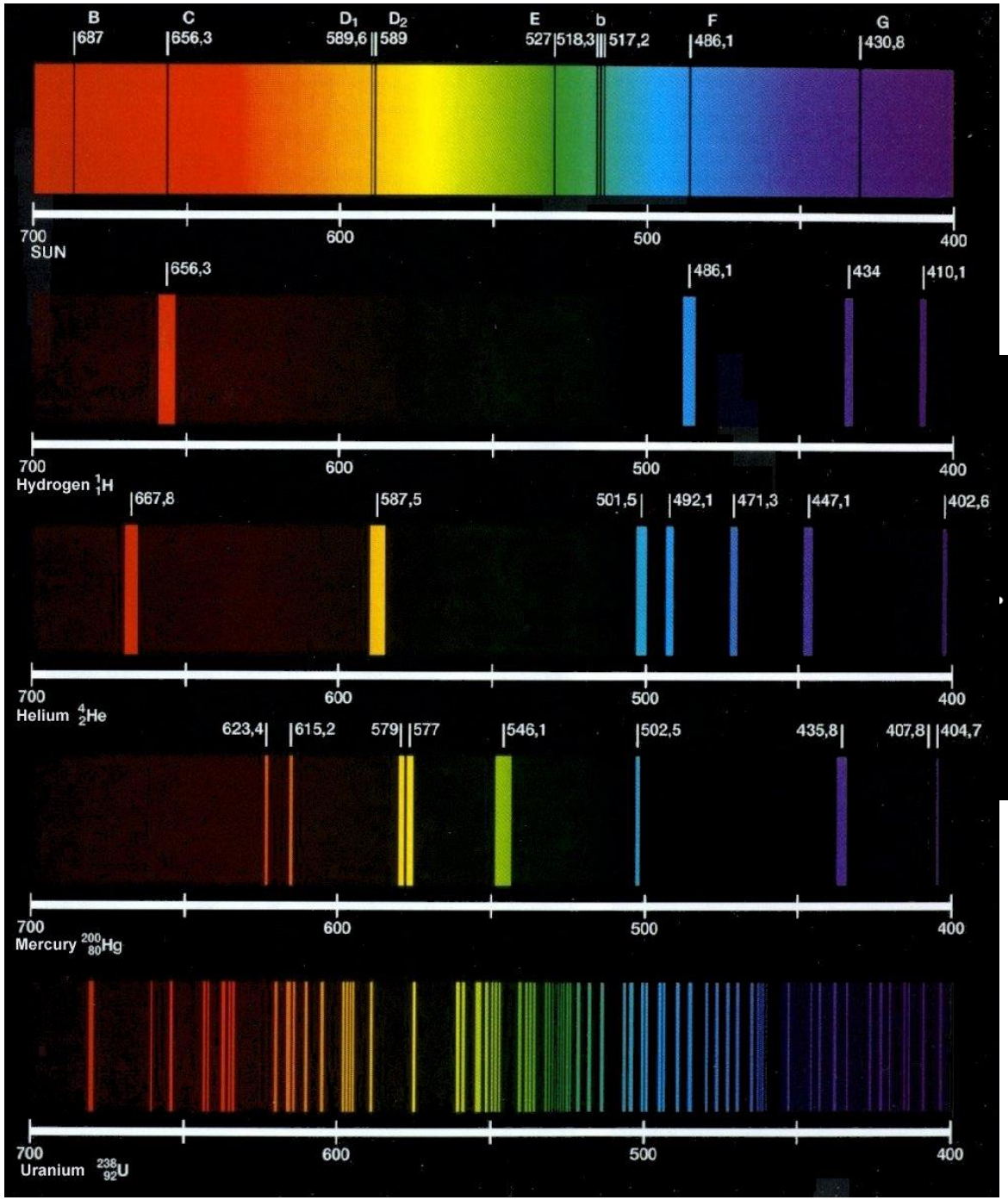
- As cores de gases excitados surgem devido ao movimento dos elétrons entre os estados de energia no átomo.

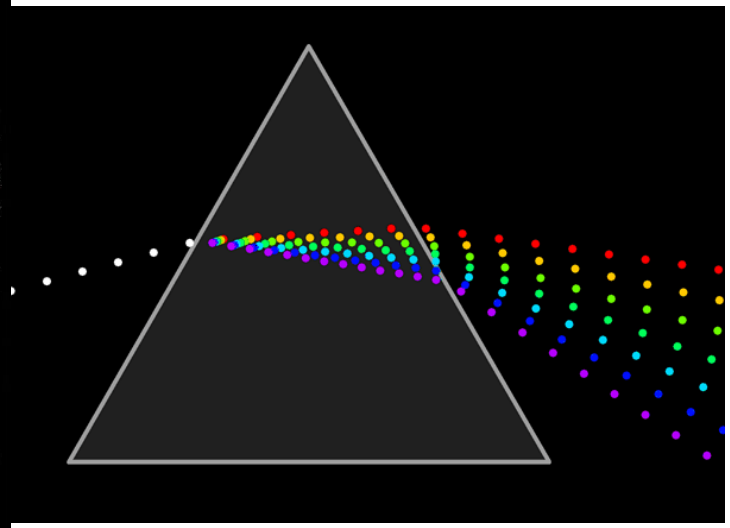


(a)






B
687
C
656,3
D1
589,6
D2
589
E
527
b
518,3
517,2
F
486,1
G
430,8
700
600
500
400
SUN
656,3
486,1
434
410,1
Hydrogen 1H
667,8
587,5
501,5
492,1
471,3
447,1
402,6
Helium 4He
623,4
615,2
579
577
546,1
502,5
435,8
407,8
404,7
Mercury 200Hg
Uranium 238U



Espectros de linhas e o modelo de Bohr

Espectros de linhas

- **Balmer:** descobriu que as linhas no espectro de linhas visíveis do hidrogênio se encaixam em uma equação simples.

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

onde R é a constante de Rydberg ($1{,}096776 \times 10^7$ m^{-1}),

e n é um número inteiro maior que 2: $\boldsymbol{n = 3, 4, 5}$...

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 3, 4, 5...}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) = 1{,}097\text{x}10^7\,\text{m}^{-1}\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9}\right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = 1{,}097\text{x}10^7\,\text{m}^{-1}(0{,}14) = 1{,}54\text{x}10^6\,\text{m}^{-1}$$

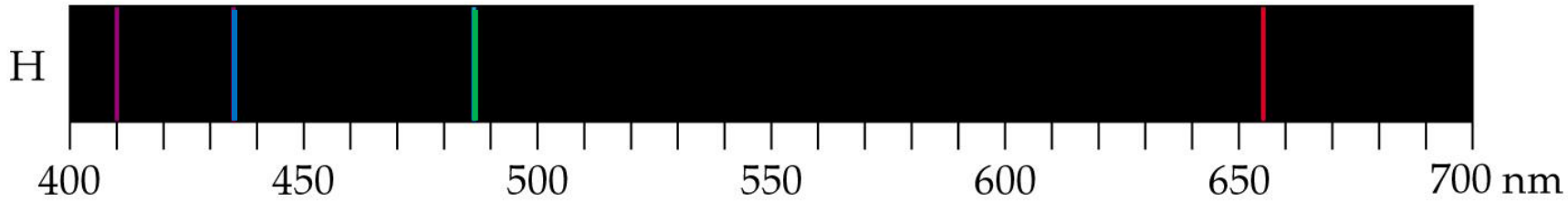
$$\lambda = \frac{1}{1{,}54\text{x}10^6\,\text{m}^{-1}} \approx 6{,}50\text{x}10^{-7}\,\text{m} \approx 650\text{nm}$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

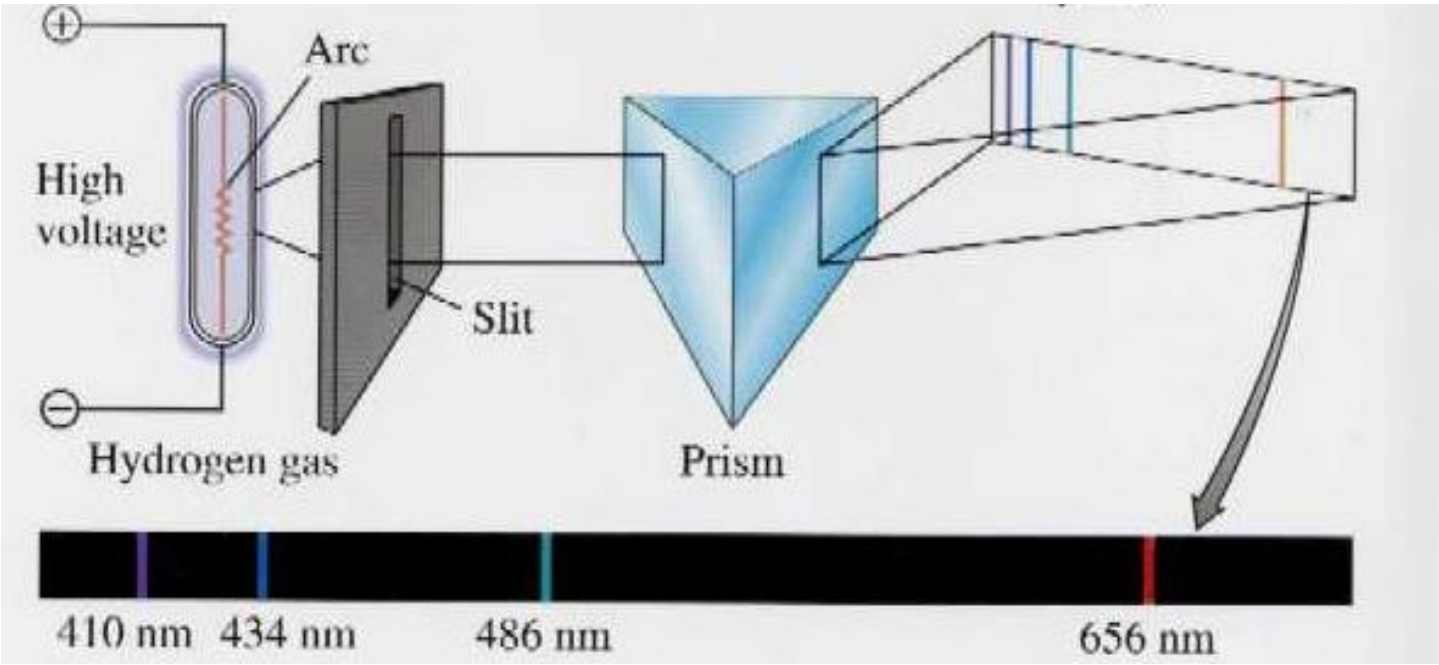
$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) \approx 650\ \text{nm}$$

$n = 6$ $n = 5$ $n = 4$ $n = 3$



410 nm 434 nm 486 nm 656 nm

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



$n = 6$ $n = 5$ $n = 4$ $n = 3$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Série de Balmer (visível)

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

Espectros de linhas

- Mais tarde, descobriu-se linhas também na região do IV e UV e Rydberg generalizou a equação de Balmer para:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

$R = 1{,}096776 \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$, $\boldsymbol{n_f}$ e $\boldsymbol{n_i}$ são números inteiros.

$$\Rightarrow \boldsymbol{n_f} < \boldsymbol{n_i}$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

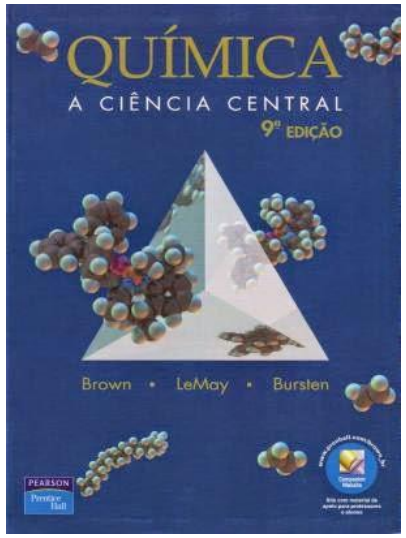
Espectros de linhas

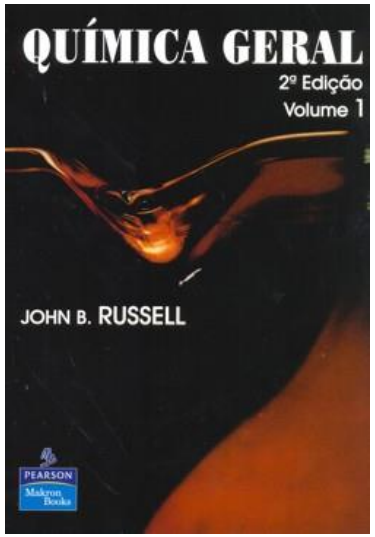
- **Equação de Rydberg:**

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Série de Lyman	$n_f = 1;$	$n_i = 2, 3, 4, 5, \ldots, \infty$	UV
Série de Balmer	$n_f = 2;$	$n_i = 3, 4, 5, 6, \ldots, \infty$	Visível
Série de Pashen	$n_f = 3;$	$n_i = 4, 5, 6, 7, \ldots, \infty$	IV
Série de Brackett	$n_f = 4;$	$n_i = 5, 6, 7, 8, \ldots, \infty$	IV
Série de Pfund	$n_f = 5;$	$n_i = 6, 7, 8, 9, \ldots, \infty$	IV
Série de Humphreys	$n_f = 6;$	$n_i = 7, 8, 9, 10\ldots, \infty$	IV

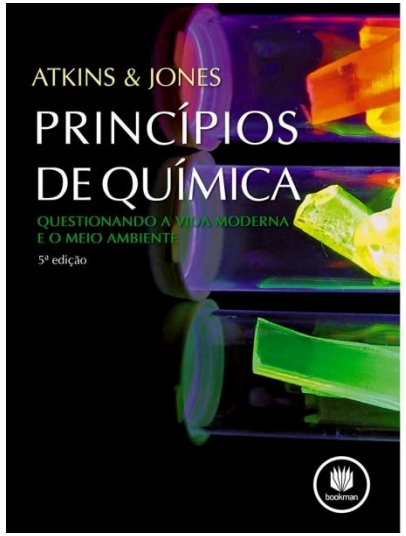
Espectros de linhas e o modelo de Bohr





$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

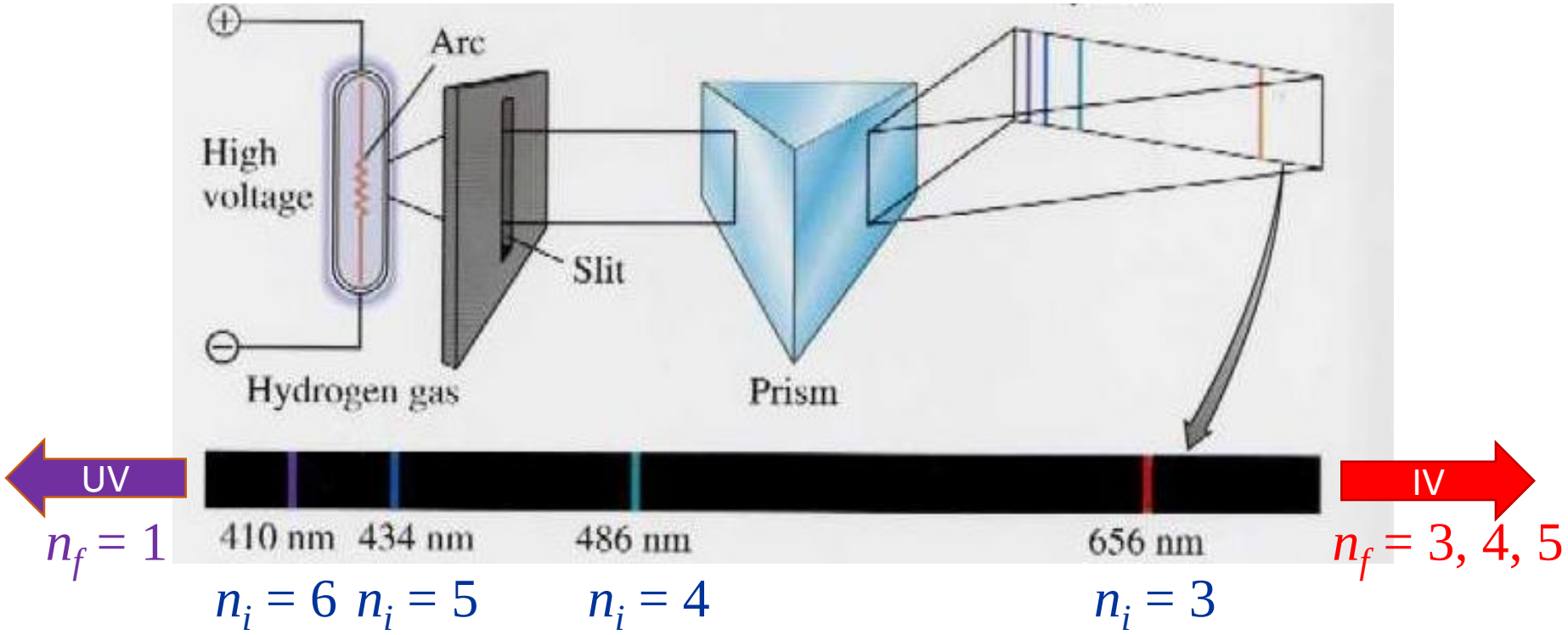
$$R = 1{,}097 \times 10^{7}\ \mathrm{m}^{-1}$$



$$\nu = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

$$R = 3{,}29 \text{ x } 10^{15}\ \mathrm{Hz}$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

$\boldsymbol{n_f < n_i}$

Série de Balmer (visível): $n_f = 2$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

O modelo de Bohr

Bohr baseou seu modelo em quatro postulados:

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

O modelo de Bohr

Somente órbitas de certos raios, correspondendo a certas energias definidas, são permitidas para os elétrons em um átomo

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

O modelo de Bohr

Um elétron em certa órbita permitida tem certa energia específica e está em um "estado de energia permitido"

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

O modelo de Bohr

A energia só é emitida ou absorvida por um elétron quando ele muda de um estado de energia permitido para outro. <u>A energia é quantizada</u>. Essa energia é emitida ou absorvida como um fóton (um elétron absorve ou emite um único fóton), cuja energia é $E = h\upsilon$.

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

O modelo de Bohr

Um elétron no menor estado de energia permitido não irradiará energia e, portanto, não se moverá em forma espiral em direção ao núcleo

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

O modelo de Bohr e o espectro de linhas

Já que os estados de energia são quantizados, a luz emitida por átomos excitados também é quantizada e aparece como espectro de linhas.

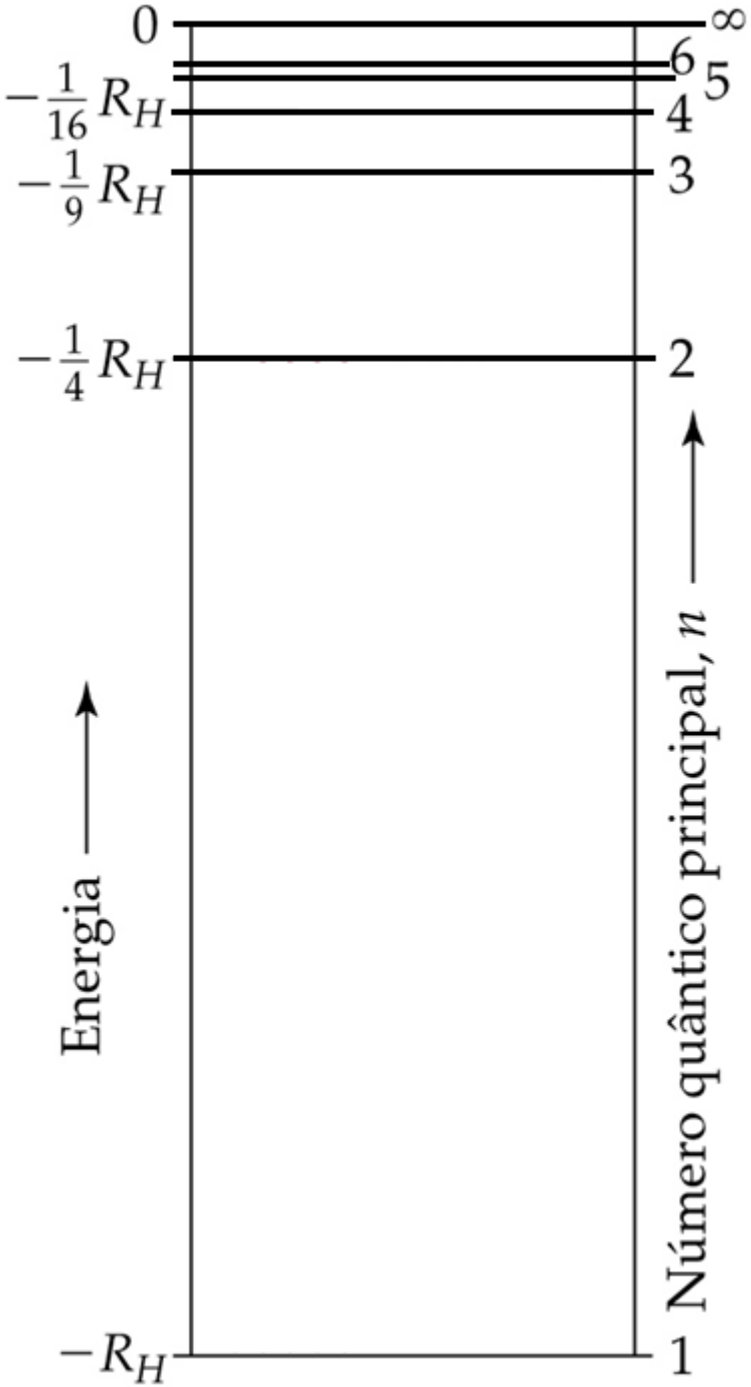
Espectros de linhas e o modelo de Bohr

O modelo de Bohr

- Após muita matemática, Bohr mostrou que o valor de energia *para cada estado* é dado por

$$E = \left(-2.18 \times 10^{-18}\ \mathrm{J}\right) \cdot \left(\frac{1}{n^2}\right)$$

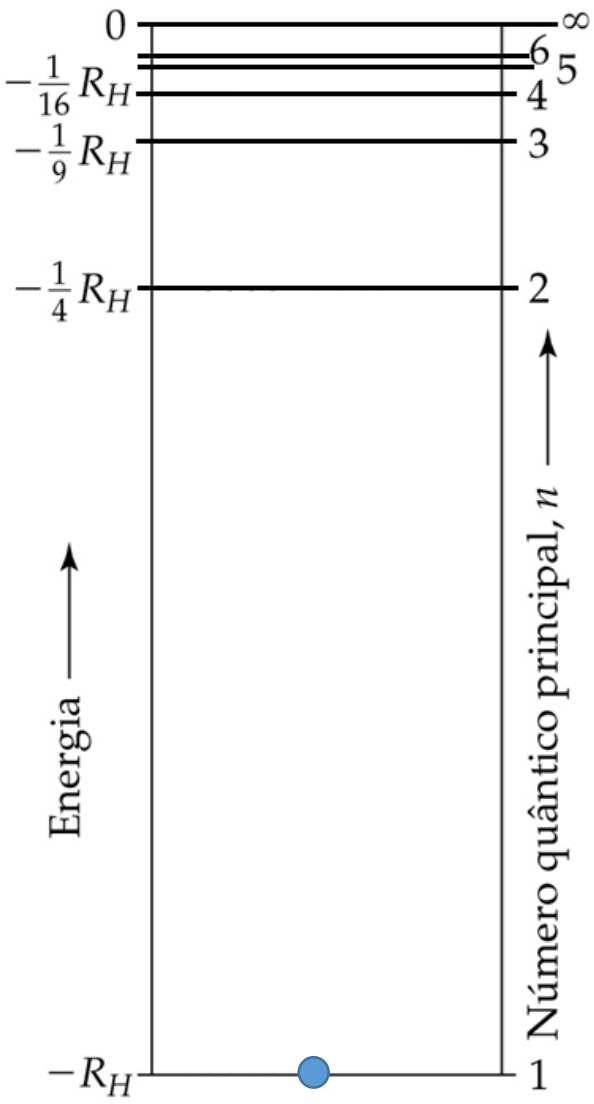
onde n é o *número quântico principal* ($n = 1, 2, 3\ldots$).



O modelo de Bohr

$$E = \underbrace{\left(-2.18\times10^{-18}\ \mathrm{J}\right)}_{\boldsymbol{R_H}}\cdot\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

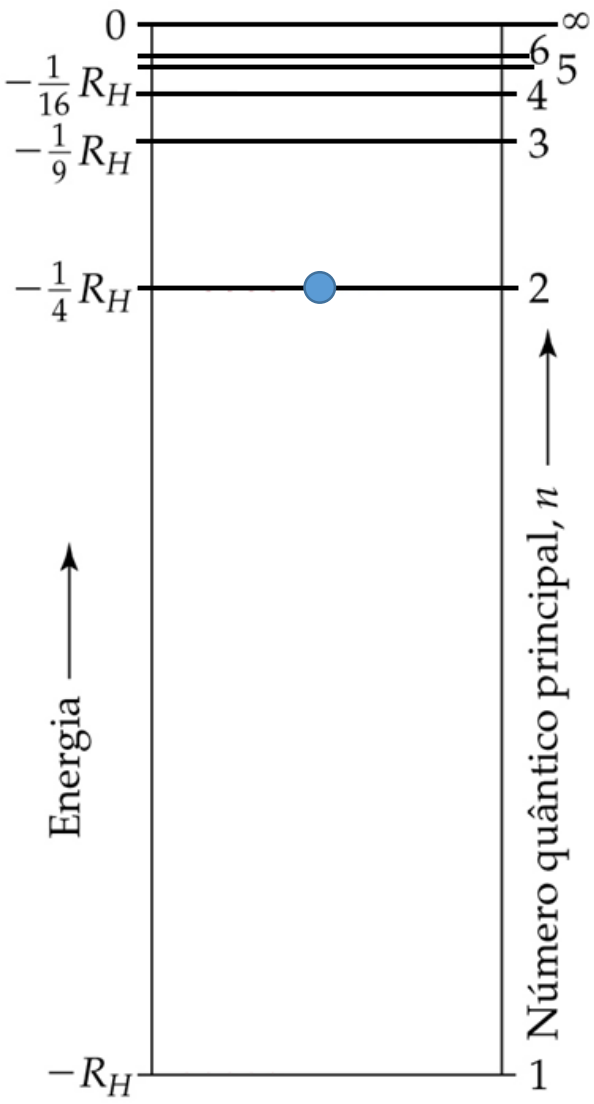


O modelo de Bohr

- A primeira órbita no modelo de Bohr tem n = 1, é a mais próxima do núcleo e convencionou-se que ela tem energia negativa. Este é o estado fundamental do hidrogênio.

$$E = \underbrace{\left(-2.18\times10^{-18}\ \mathrm{J}\right)}_{\boldsymbol{R_H}}\cdot\left(\frac{1}{1^2}\right)$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

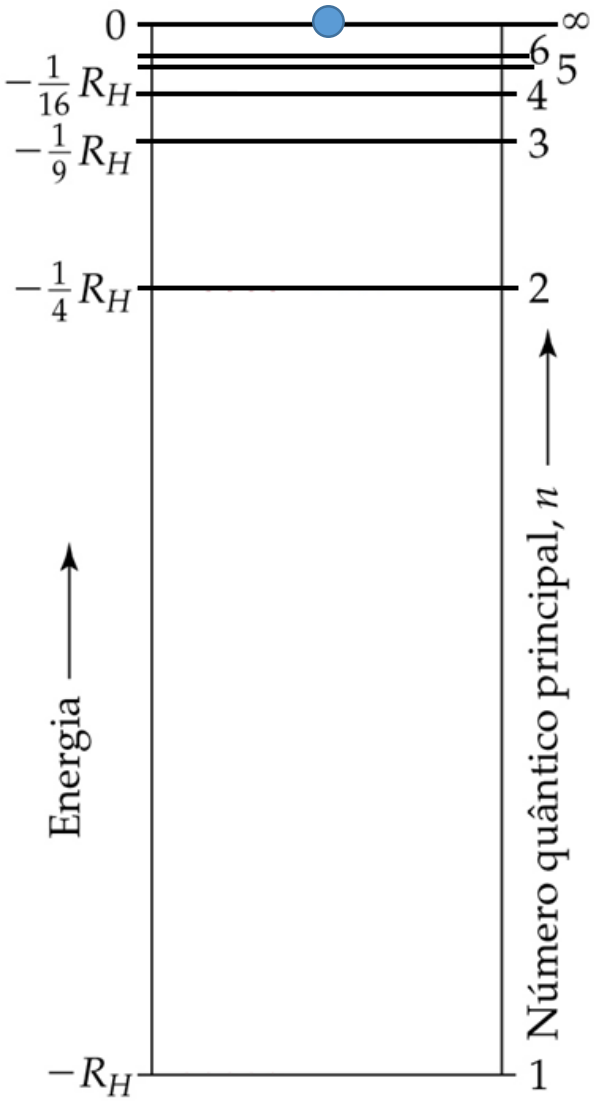


O modelo de Bohr

- A segunda órbita no modelo de Bohr tem $n = 2$, é o *primeiro estado excitado* do hidrogênio. O elétron encontra-se mais afastado do núcleo, com uma energia maior.

$$E = \underbrace{\left(-2.18\times10^{-18}\ \mathrm{J}\right)}_{\boldsymbol{R_H}}\cdot\left(\frac{1}{2^2}\right)$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



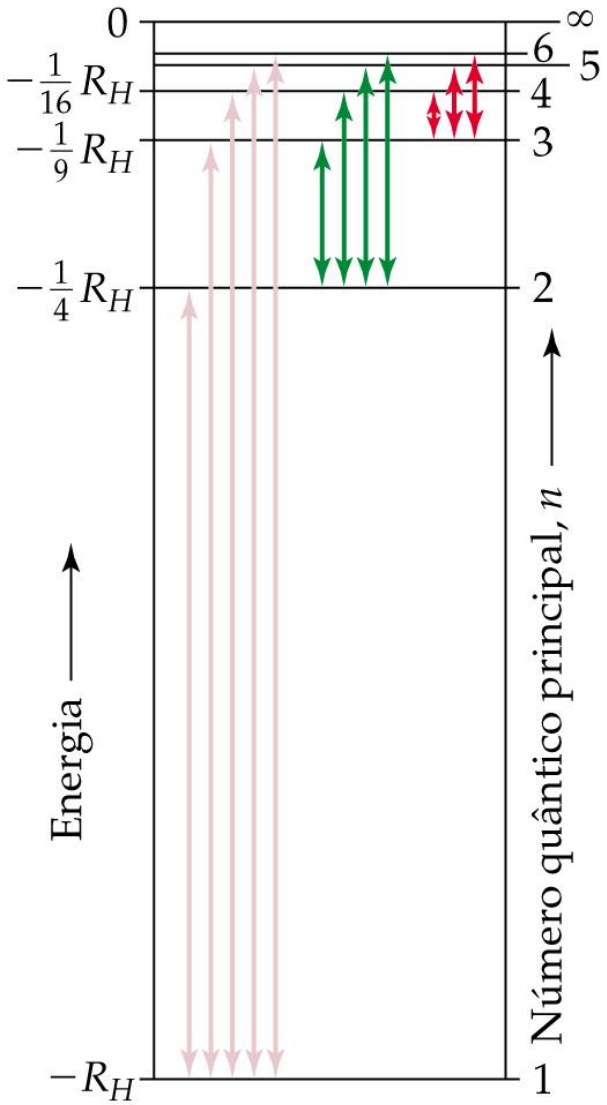
O modelo de Bohr

- A órbita mais distante no modelo de Bohr tem $n = \infty$ e corresponde à energia igual a zero (o elétron não sente mais a presença do núcleo – o elétron sai do átomo). Esta é a energia necessária para a ionização do átomo:

$$H \rightarrow H^+ + e^-$$

$$E = \left(-2.18\times10^{-18}\ \mathrm{J}\right)\cdot\left(\frac{1}{\infty^2}\right)$$

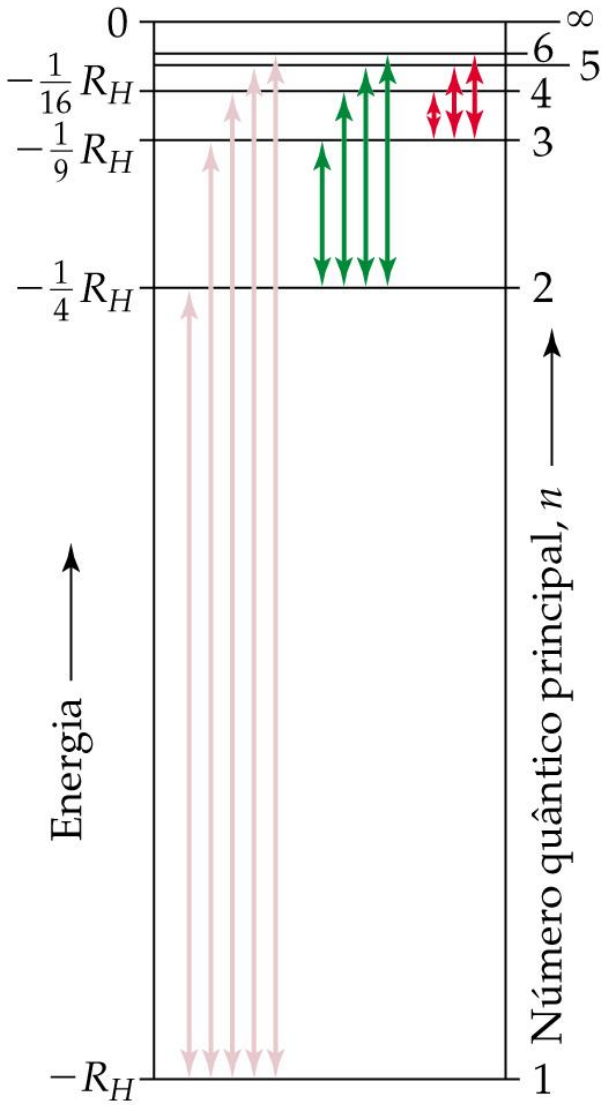
Espectros de linhas e o modelo de Bohr



O modelo de Bohr

- Os elétrons no modelo de Bohr podem se mover apenas entre órbitas através da absorção e da emissão de energia em quantum (*fóton*, E = $h\nu$).

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

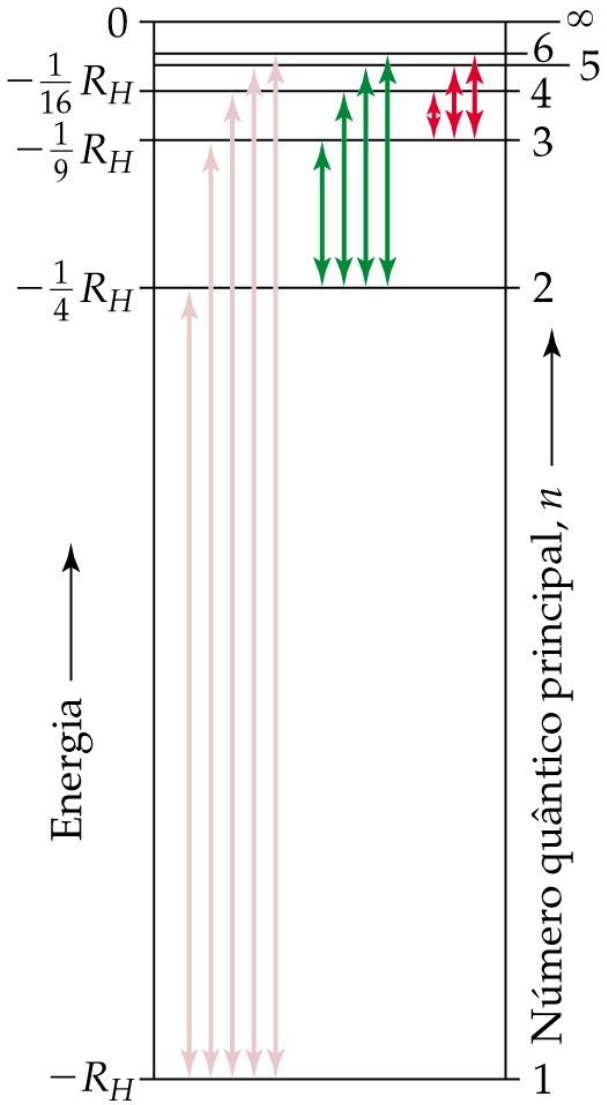


O modelo de Bohr

- A energia do fóton emitido é a diferença de energia entre os estados final e inicial do elétron:

$$\Delta E = E_f - E_i = E_{\text{fóton emitido}}$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



- $\Delta E = E_f - E_i = E_{fóton} = h\upsilon$

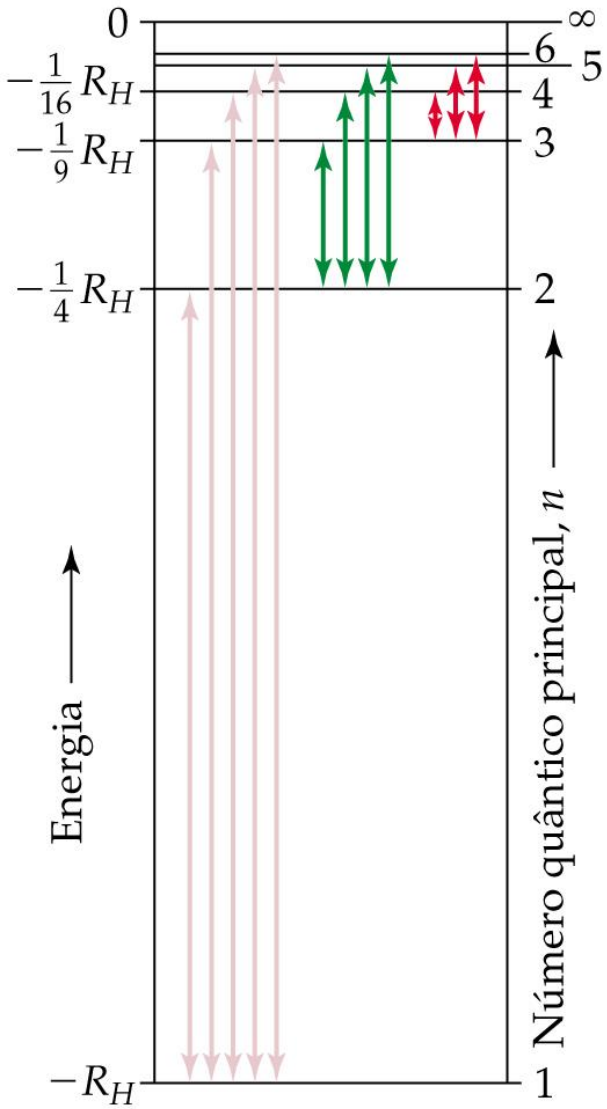
$$E = \left(-2.18\times10^{-18}\ \mathrm{J}\right)\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

- $\Delta E = h\upsilon = hc/\lambda = (-2{,}18\mathrm{x}10^{-18})(1/n_f^2 - 1/n_i^2)$

- $1/\lambda = \underbrace{(-2{,}18\mathrm{x}10^{-18}/hc)}_{\text{R = cte. de Rydberg}}(1/n_f^2 - 1/n_i^2)$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



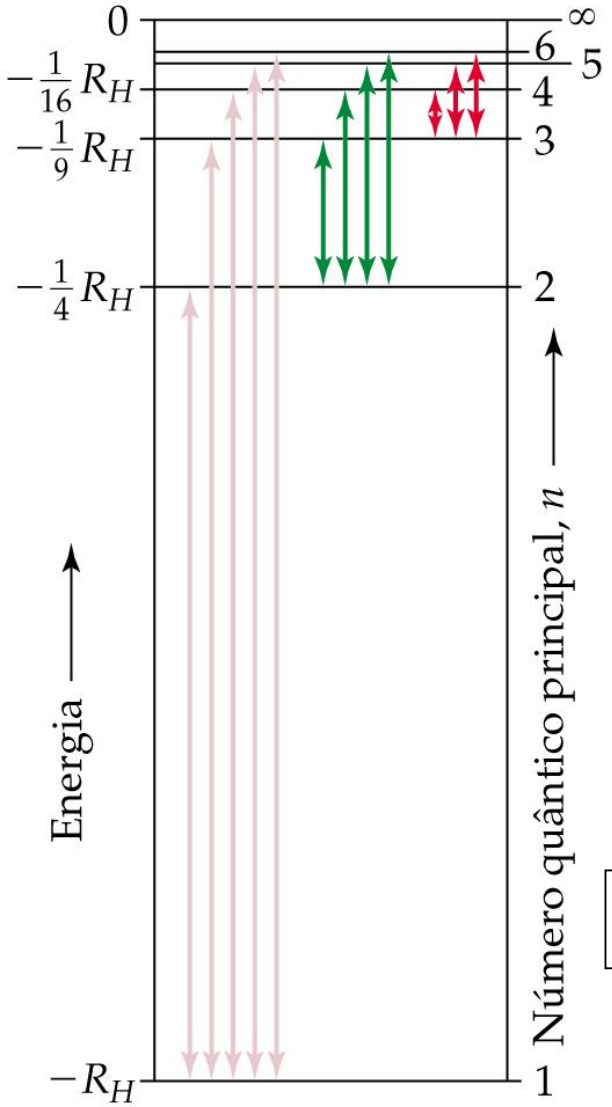
Qual das seguintes transições eletrônicas produz a linha espectral de comprimento de onda (λ) mais longo:

$n_i = 2$ para $n_f = 1$;

$n_i = 3$ para $n_f = 2$;

$n_i = 4$ para $n_f = 3$.

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



Qual das seguintes transições eletrônicas produz a linha espectral de comprimento de onda (λ) mais longo:

$n_i = 2$ para $n_f = 1$;

$n_i = 3$ para $n_f = 2$;

$n_i = 4$ para $n_f = 3$.

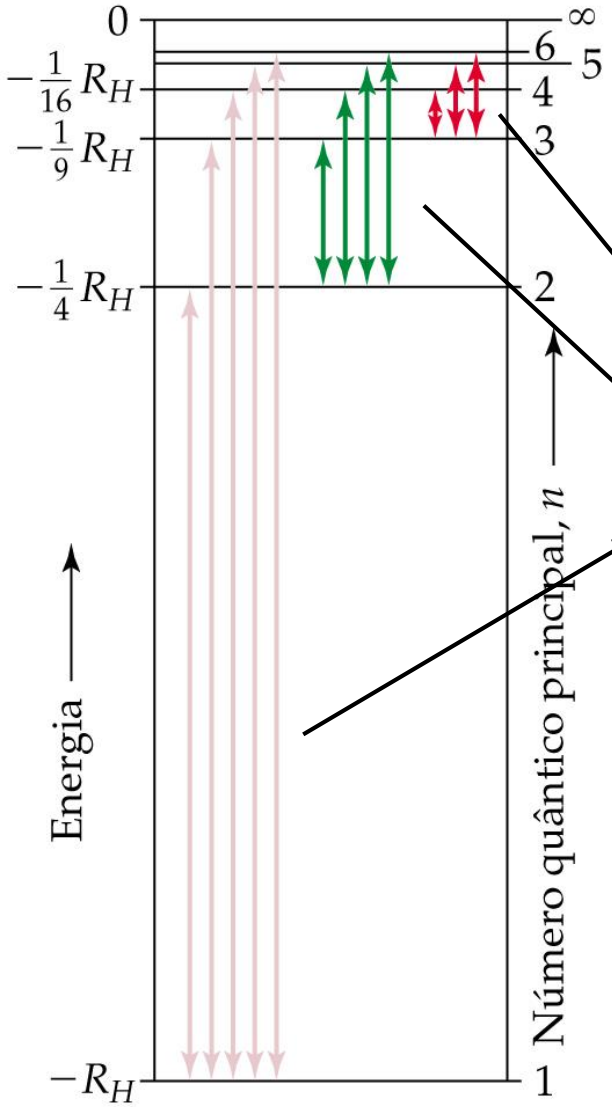
$E = h\nu$; $c = \lambda\nu \rightarrow E = hc/\lambda$

Comprimento de onda mais longo, menor energia

Menor espaço entre estados, menor energia.

$\therefore$ Maior comprimento de onda $n = 4$ para $n = 3$.

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

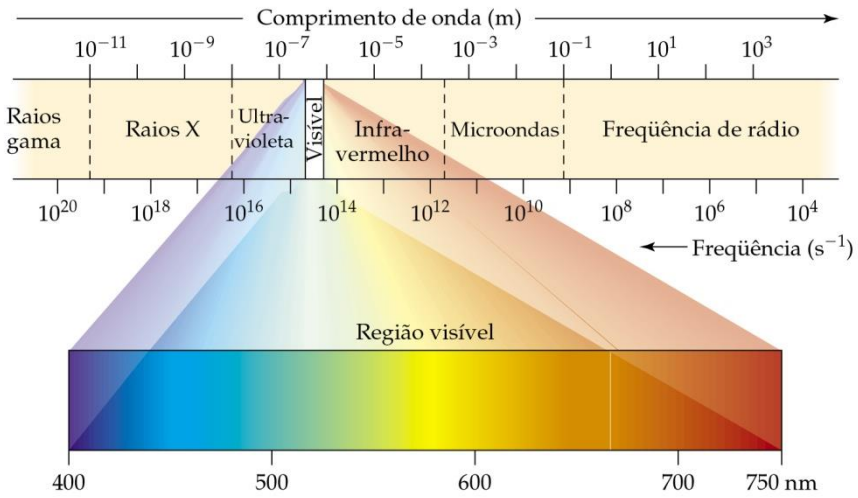


$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

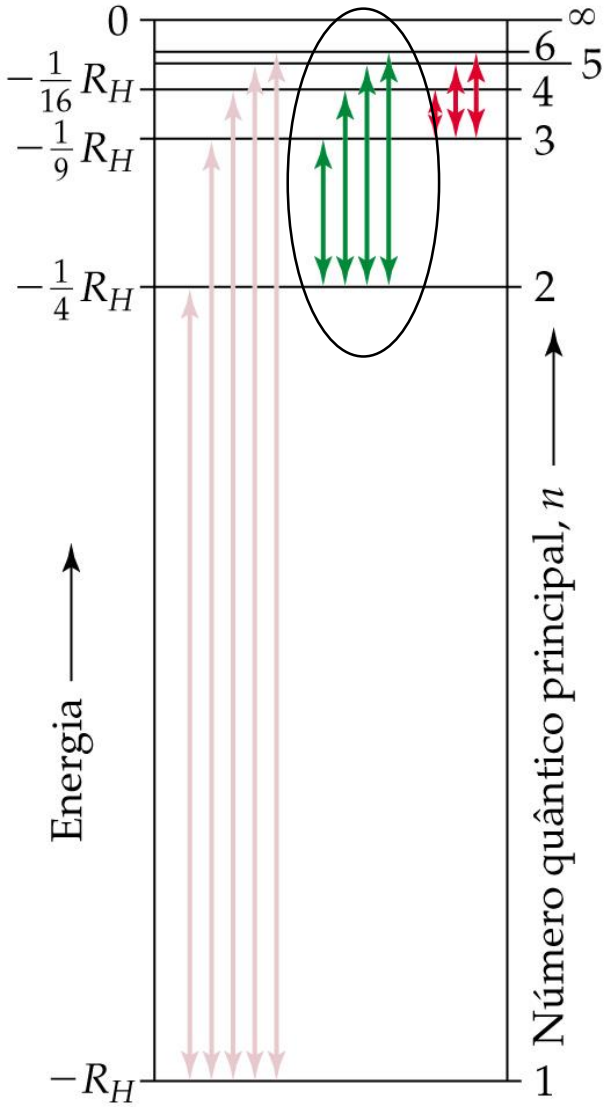
Séries Pashen $\boldsymbol{n_f = 3}$ $n_i = 4, 5, 6, 7, \ldots, \infty$ IV

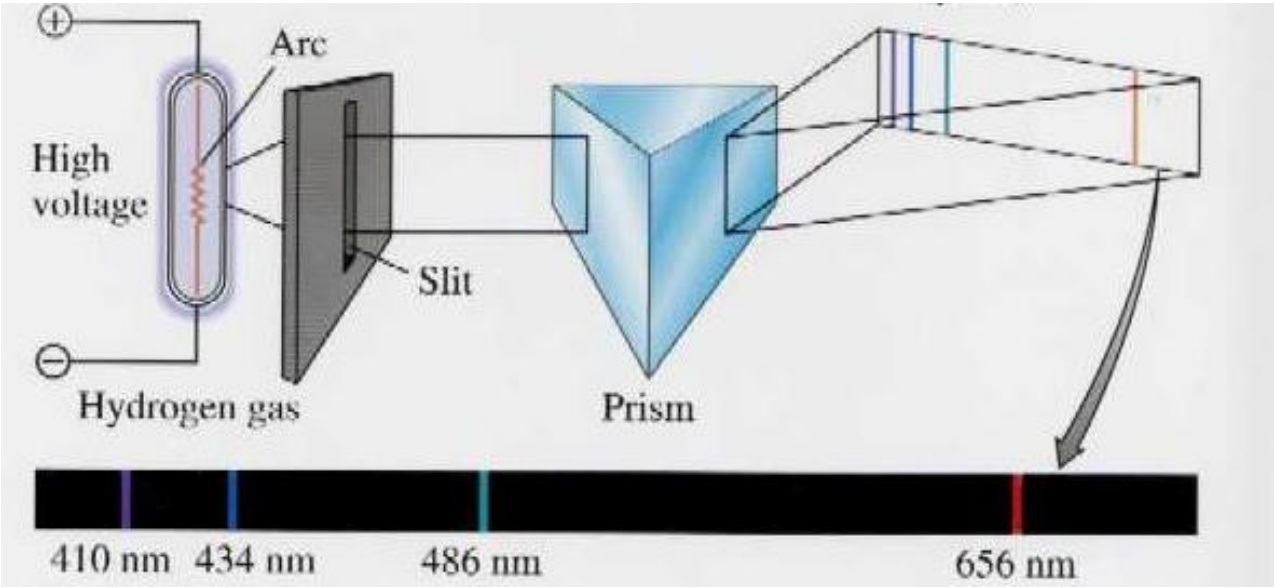
Séries Balmer $\boldsymbol{n_f = 2}$ $n_i = 3, 4, 5, 6, \ldots, \infty$ Vis

Séries Lyman $\boldsymbol{n_f = 1}$ $n_i = 2, 3, 4, 5, \ldots, \infty$ UV



Espectros de linhas e o modelo de Bohr



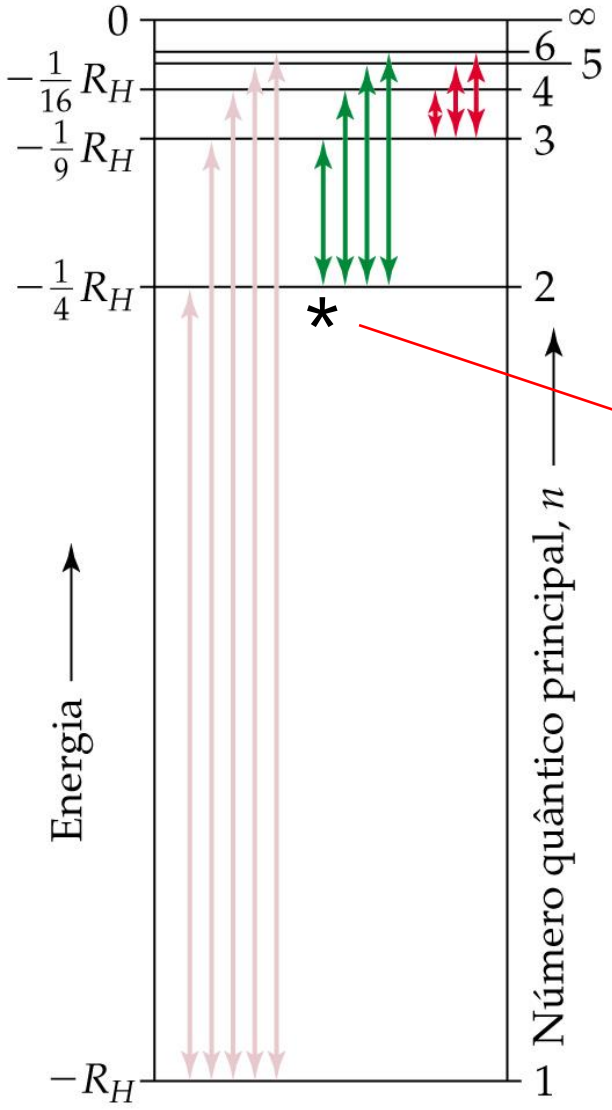


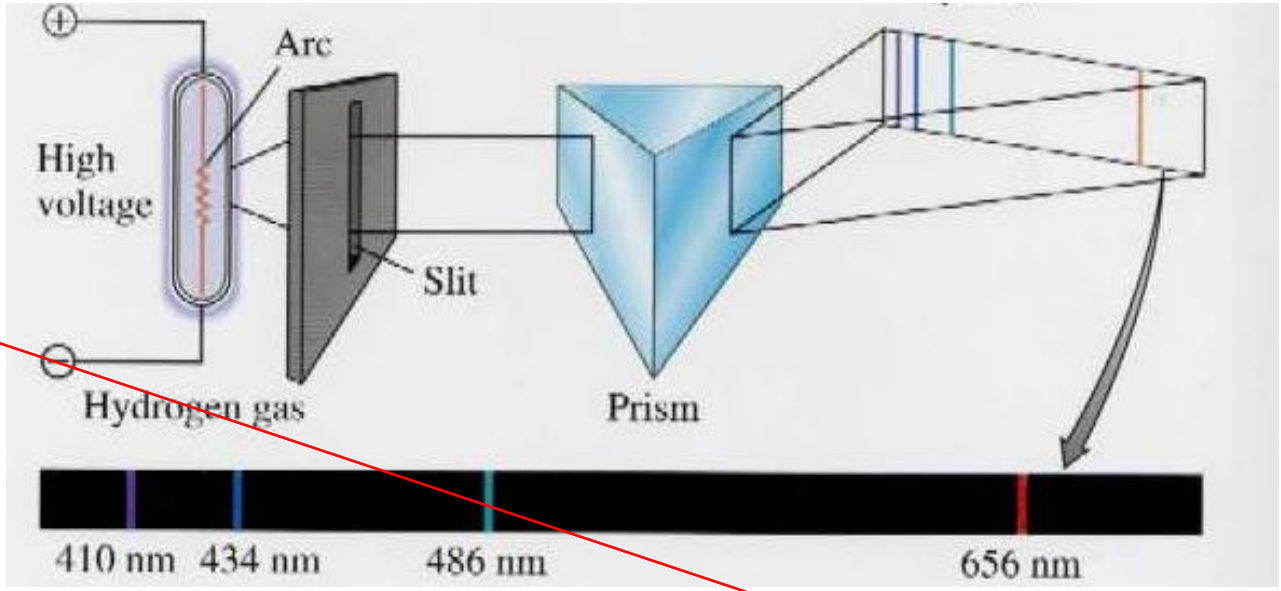
$n_f = 2$	$n_f = 2$	$n_f = 2$	$n_f = 2$
$n_i = 6$	$n_i = 5$	$n_i = 4$	$n_i = 3$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Série de Balmer (visível)

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



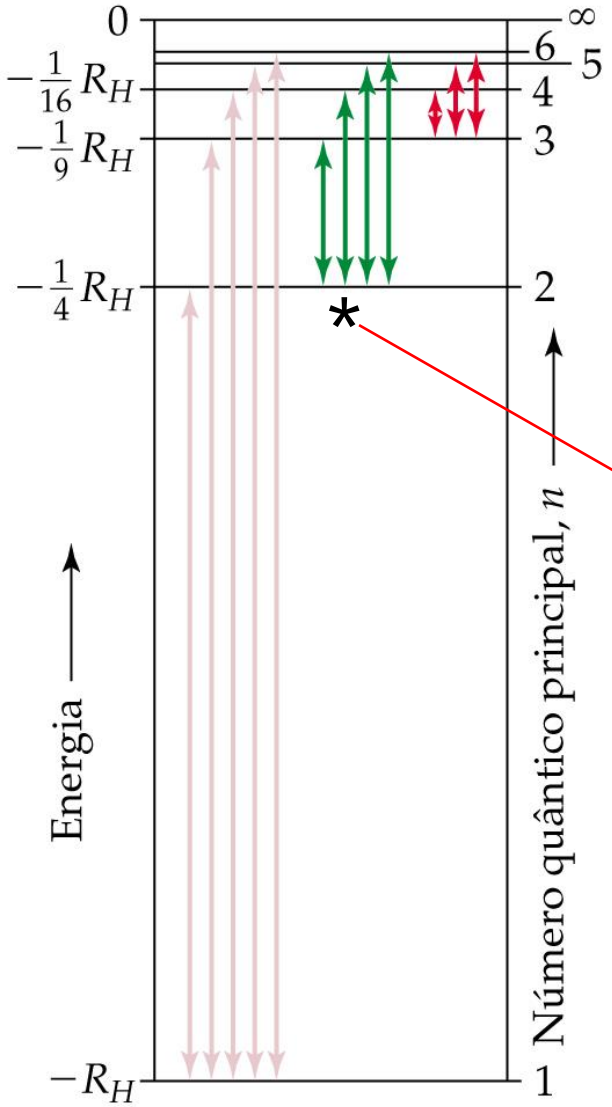


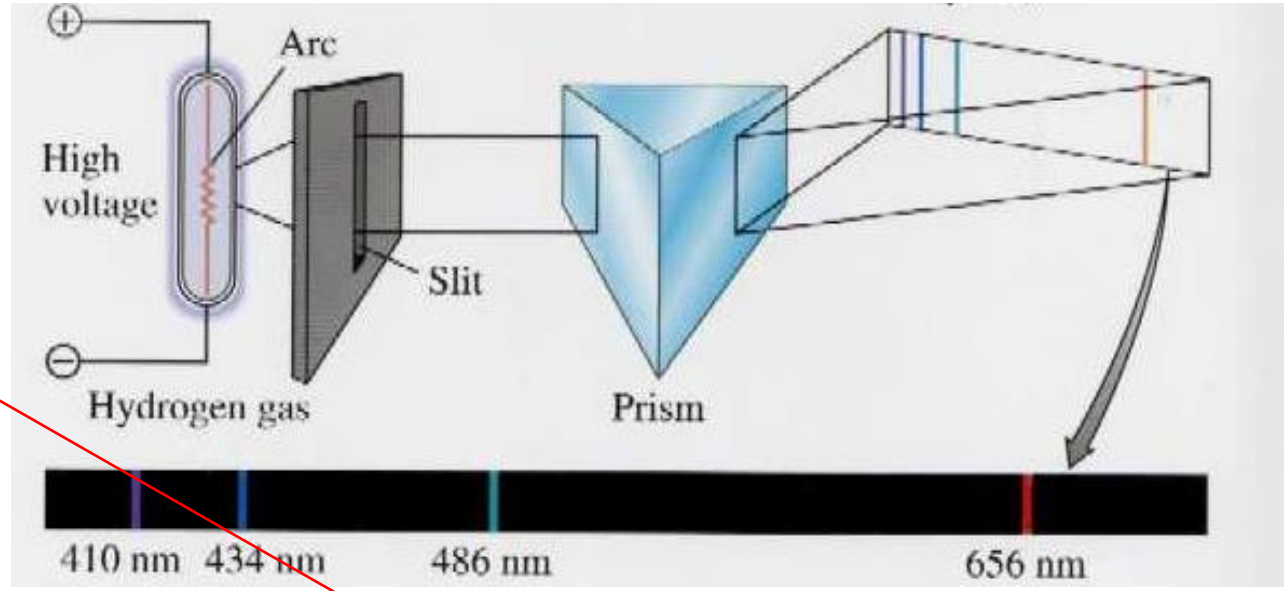
$n_f = 2$
$n_i = 3$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Série de Balmer (visível)

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



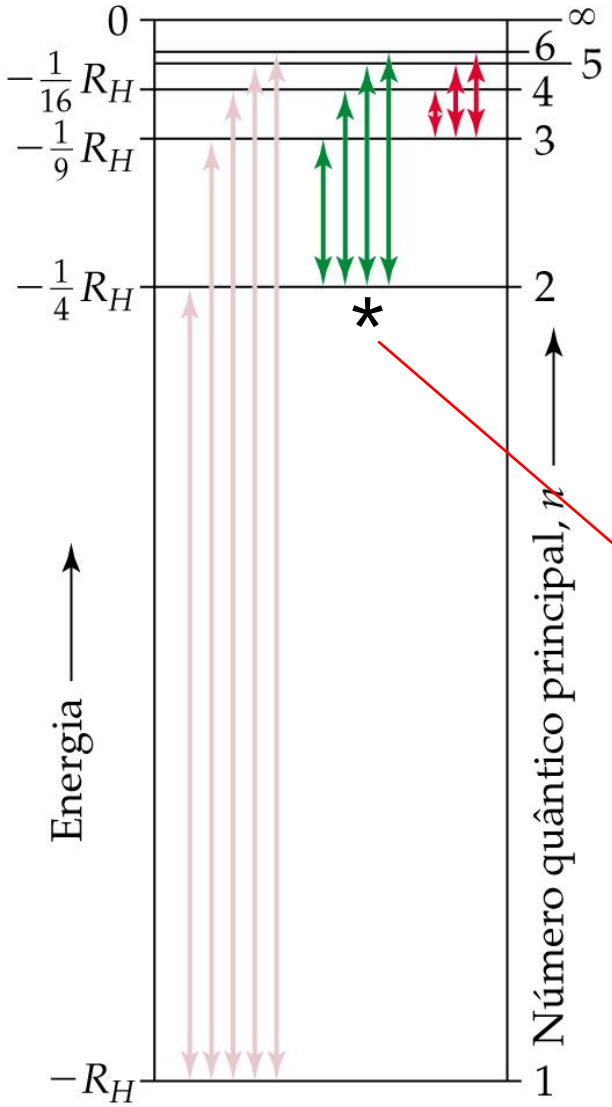


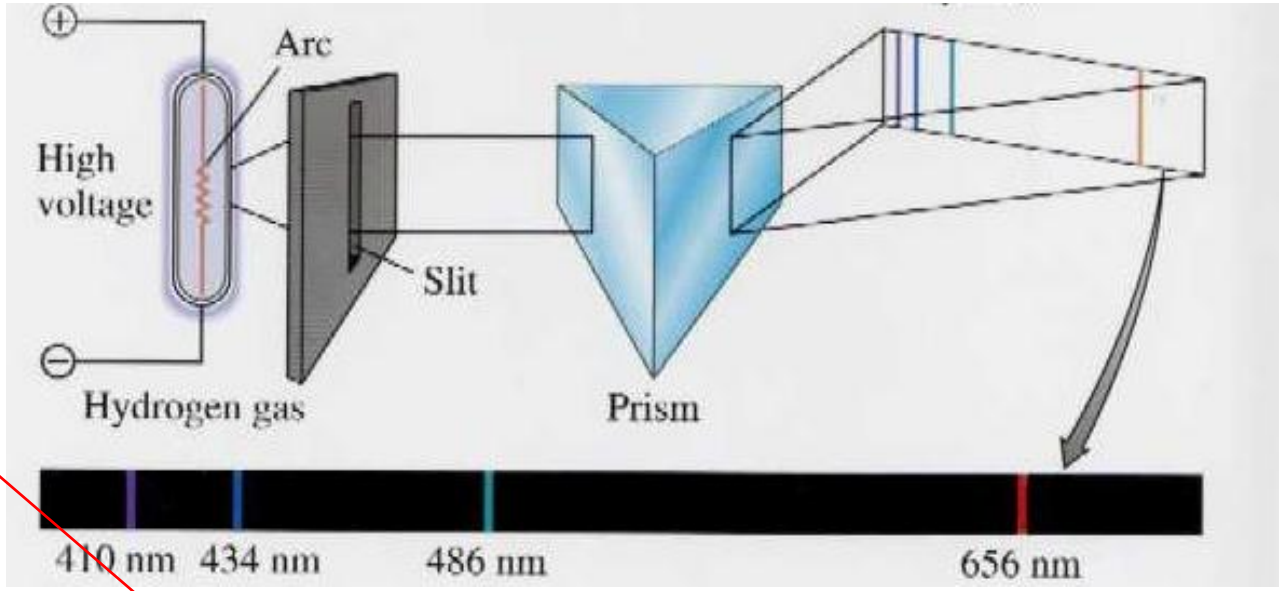
$n_f = 2$
$n_i = 4$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Série de Balmer (visível)

Espectros de linhas e o modelo de Bohr



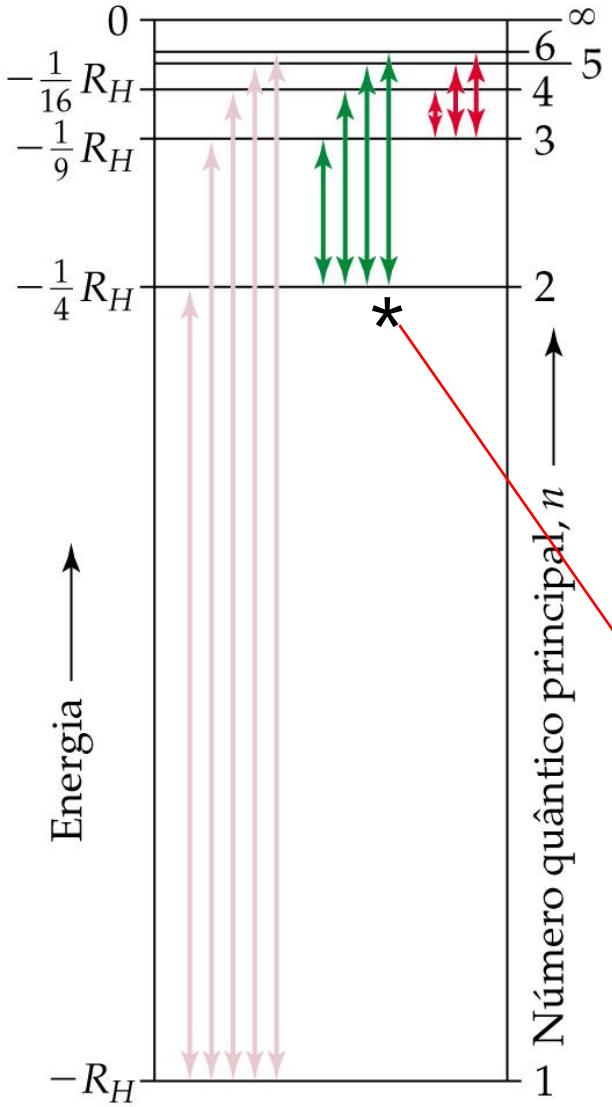


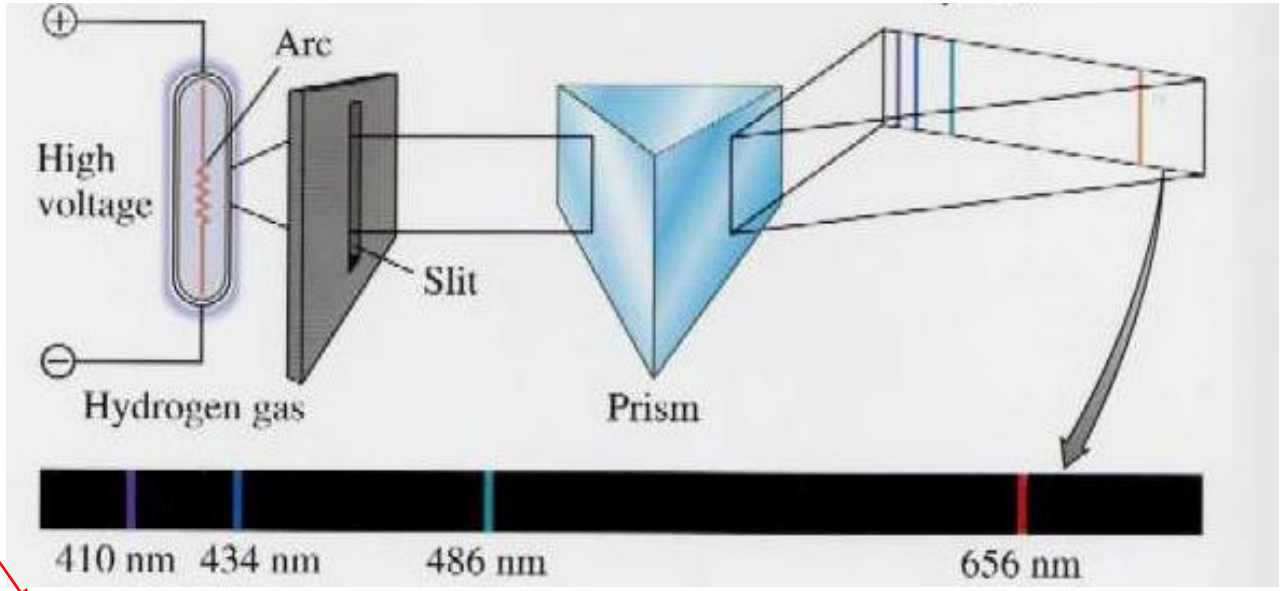
$n_f = 2$
$n_i = 5$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Série de Balmer (visível)

Espectros de linhas e o modelo de Bohr





$n_f = 2$
$n_i = 6$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Série de Balmer (visível)

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

Espectros de linhas

- **Equação de Rydberg:**

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Série de Lyman	$n_f = 1;$	$n_i = 2, 3, 4, 5, \ldots, \infty$	UV
Série de Balmer	$n_f = 2;$	$n_i = 3, 4, 5, 6, \ldots, \infty$	Visível
Série de Pashen	$n_f = 3;$	$n_i = 4, 5, 6, 7, \ldots, \infty$	IV
Série de Brackett	$n_f = 4;$	$n_i = 5, 6, 7, 8, \ldots, \infty$	IV
Série de Pfund	$n_f = 5;$	$n_i = 6, 7, 8, 9, \ldots, \infty$	IV
Série de Humphreys	$n_f = 6;$	$n_i = 7, 8, 9, 10\ldots, \infty$	IV

Espectros de linhas e o modelo de Bohr

Limitações do modelo de Bohr

- Pode explicar adequadamente apenas o espectro de linhas do átomo de hidrogênio.

- Ainda utiliza o conceito de "órbita". *Veremos que é mais adequado considerarmos os "níveis de energia" dos elétrons.*

- Ainda considera os elétrons como partículas. *Veremos que é mais adequado considerarmos as propriedades de onda dos elétrons – mecânica ondulatória ou mecânica quântica.*

- Conceito de "níveis de energia" utilizado até hoje.