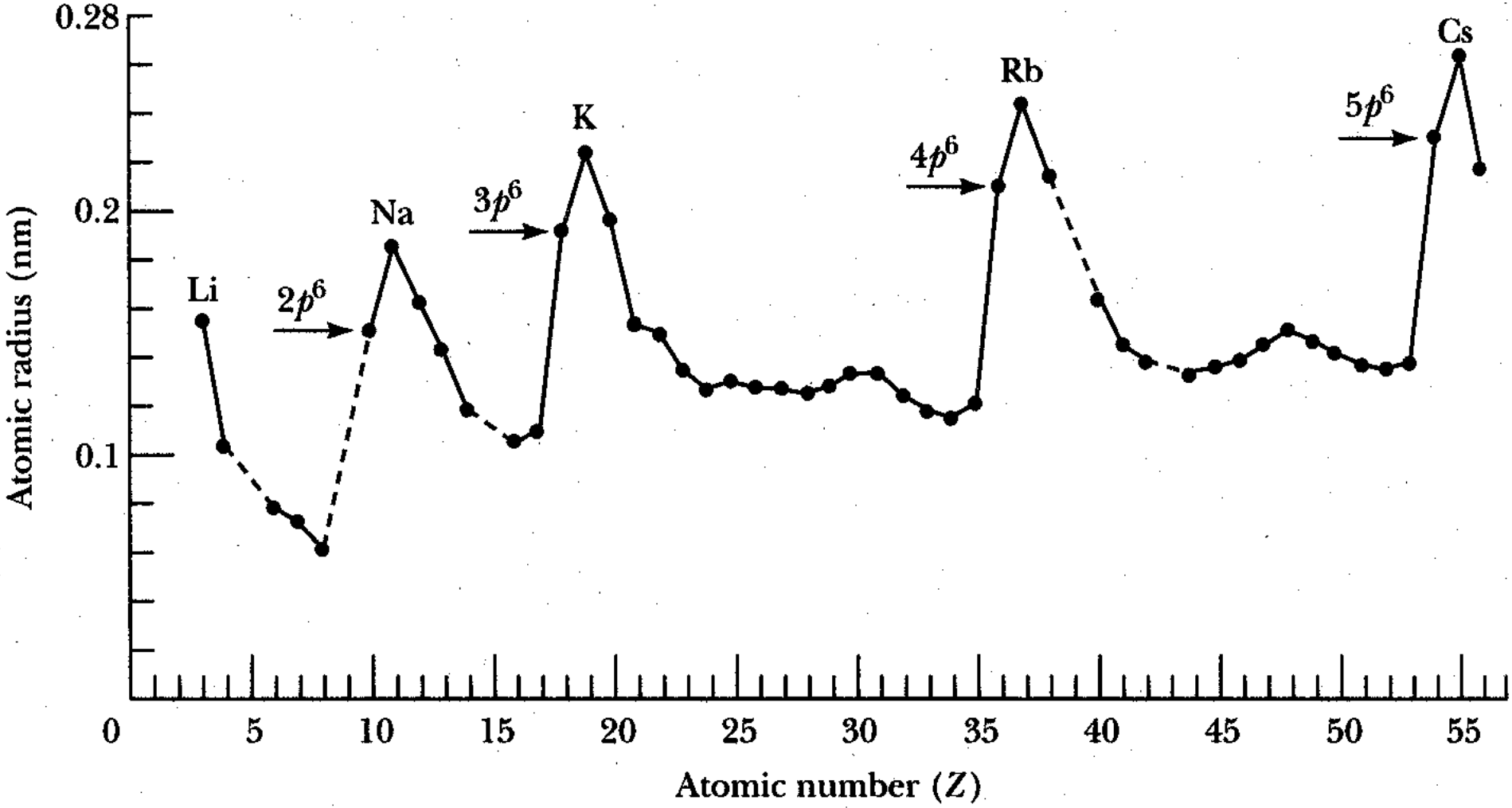
Raios atômicos



Closed shells | Alkalis | Alkaline earths | Rare Halogens gases

Groups:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
2	1 **H** $1s$																	2 **He** $1s^2$
8 ($1s^2$)	3 **Li** $2s^1$	4 **Be** $2s^2$											5 **B** $2s^2\,2p^1$	6 **C** $2s^2\,2p^2$	7 **N** $2s^2\,2p^3$	8 **O** $2s^2\,2p^4$	9 **F** $2s^2\,2p^5$	10 **Ne** $2s^2\,2p^6$
8 ($2s^2 2p^6$)	11 **Na** $3s^1$	12 **Mg** $3s^2$											13 **Al** $3s^2\,3p^1$	14 **Si** $3s^2\,3p^2$	15 **P** $3s^2\,3p^3$	16 **S** $3s^2\,3p^4$	17 **Cl** $3s^2\,3p^5$	18 **Ar** $3s^2\,3p^6$
18 ($3s^2 3p^6$)	19 **K** $4s^1$	20 **Ca** $4s^2$	21 **Sc** $3d^1\,4s^2$	22 **Ti** $3d^2\,4s^2$	23 **V** $3d^3\,4s^2$	24 **Cr** $3d^5\,4s^1$	25 **Mn** $3d^5\,4s^2$	26 **Fe** $3d^6\,4s^2$	27 **Co** $3d^7\,4s^2$	28 **Ni** $3d^8\,4s^2$	29 **Cu** $3d^{10}\,4s^1$	30 **Zn** $3d^{10}\,4s^2$	31 **Ga** $3d^{10}\,4s^2\,4p^1$	32 **Ge** $3d^{10}\,4s^2\,4p^2$	33 **As** $3d^{10}\,4s^2\,4p^3$	34 **Se** $3d^{10}\,4s^2\,4p^4$	35 **Br** $3d^{10}\,4s^2\,4p^5$	36 **Kr** $3d^{10}\,4s^2\,4p^6$
18 ($3d^{10}4s^2 4p^6$)	37 **Rb** $5s^1$	38 **Sr** $5s^2$	39 **Y** $4d^1\,5s^2$	40 **Zr** $4d^2\,5s^2$	41 **Nb** $4d^4\,5s^1$	42 **Mo** $4d^5\,5s^1$	43 **Tc** $4d^6\,5s^1$	44 **Ru** $4d^7\,5s^1$	45 **Rh** $4d^8\,5s^1$	46 **Pd** $4d^{10}$	47 **Ag** $4d^{10}\,5s^1$	48 **Cd** $4d^{10}\,5s^2$	49 **In** $4d^{10}\,5s^2\,5p^1$	50 **Sn** $4d^{10}\,5s^2\,5p^2$	51 **Sb** $4d^{10}\,5s^2\,5p^3$	52 **Te** $4d^{10}\,5s^2\,5p^4$	53 **I** $4d^{10}\,5s^2\,5p^5$	54 **Xe** $4d^{10}\,5s^2\,5p^6$
32 ($4d^{10}5s^2 5p^6$)	55 **Cs** $6s^1$	56 **Ba** $6s^2$	57 **La** $5d^1\,6s^2$	72 **Hf** $4f^{14}\,5d^2\,6s^2$	73 **Ta** $4f^{14}\,5d^3\,6s^2$	74 **W** $4f^{14}\,5d^4\,6s^2$	75 **Re** $4f^{14}\,5d^5\,6s^2$	76 **Os** $4f^{14}\,5d^6\,6s^2$	77 **Ir** $4f^{14}\,5d^9\,6s^1$	78 **Pt** $4f^{14}\,5d^9\,6s^1$	79 **Au** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^1$	80 **Hg** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^2$	81 **Tl** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^2\,6p^1$	82 **Pb** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^2\,6p^2$	83 **Bi** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^2\,6p^3$	84 **Po** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^2\,6p^4$	85 **At** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^2\,6p^5$	86 **Rn** $4f^{14}\,5d^{10}\,6s^2\,6p^6$
($4f^{14}5d^{10}6s^2 6p^6$)	87 **Fr** $7s^1$	88 **Ra** $7s^2$	89 **Ac** $6d^1\,7s^2$	104 **Rf** $5f^{14}\,6d^2\,7s^2$	105 **Db** $5f^{14}\,6d^3\,7s^2$	106 **Sg** $5f^{14}\,6d^4\,7s^2$	107 **Bh** $5f^{14}\,6d^5\,7s^2$	108 **Hs** $5f^{14}\,6d^6\,7s^2$	109 **Mt** $5f^{14}\,6d^7\,7s^2$	110 $5f^{14}\,6d^9\,7s^1$	111 $5f^{14}\,6d^{10}\,7s^1$	112 $5f^{14}\,6d^{10}\,7s^2$						

Transition elements

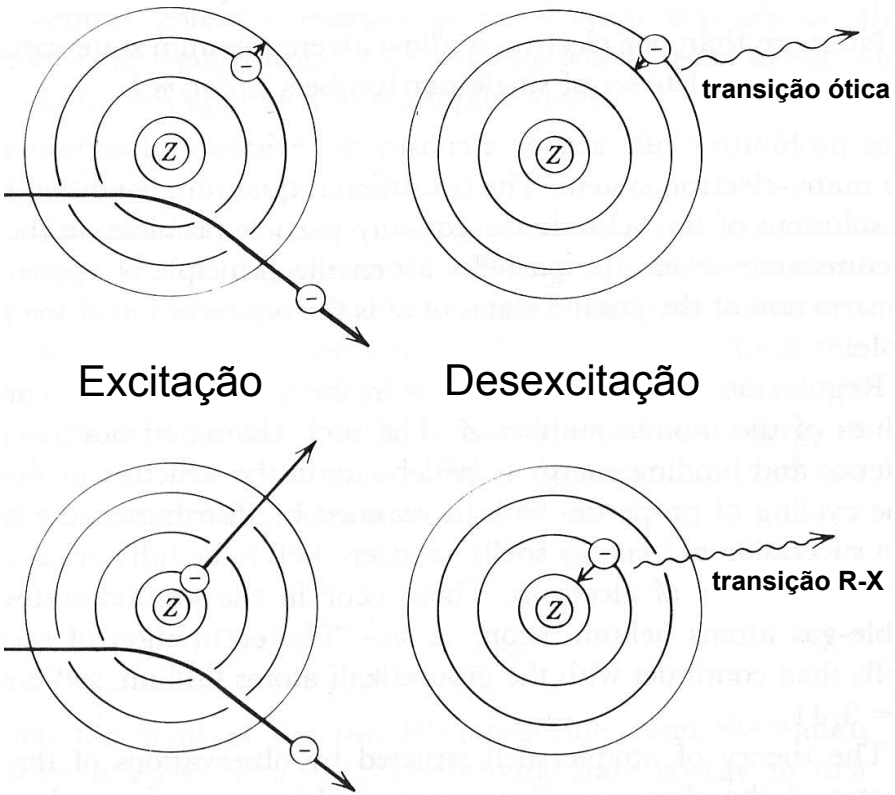
Lanthanides	58 **Ce** $4f^2\,6s^2$	59 **Pr** $4f^3\,6s^2$	60 **Nd** $4f^4\,6s^2$	61 **Pm** $4f^5\,6s^2$	62 **Sm** $4f^6\,6s^2$	63 **Eu** $4f^7\,6s^2$	64 **Gd** $4f^7\,6s^2\,5d^1$	65 **Tb** $4f^9\,6s^2$	66 **Dy** $4f^{10}\,6s^2$	67 **Ho** $4f^{11}\,6s^2$	68 **Er** $4f^{12}\,6s^2$	69 **Tm** $4f^{13}\,6s^2$	70 **Yb** $4f^{14}\,6s^2$	71 **Lu** $4f^{14}\,5d^1\,6s^2$
Actinides	90 **Th** $6d^2\,7s^2$	91 **Pa** $5f^2\,6d^1\,7s^2$	92 **U** $5f^3\,6d^1\,7s^2$	93 **Np** $5f^4\,6d^1\,7s^2$	94 **Pu** $5f^6\,7s^2$	95 **Am** $5f^7\,7s^2$	96 **Cm** $5f^7\,6d^1\,7s^2$	97 **Bk** $5f^8\,6d^1\,7s^2$	98 **Cf** $5f^{10}\,7s^2$	99 **Es** $5f^{11}\,7s^2$	100 **Fm** $5f^{12}\,7s^2$	101 **Md** $5f^{13}\,7s^2$	102 **No** $5f^{14}\,7s^2$	103 **Lr** $5f^{14}\,6d^1\,7s^2$

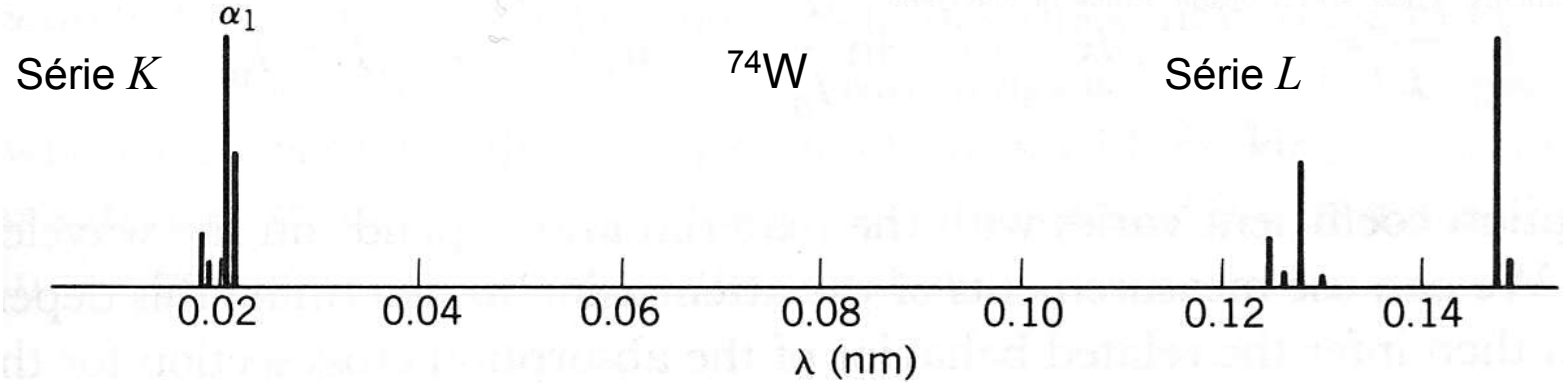
Energias de ionização

Z Atom	Element	Configuration	Ionization Energy (eV)
1 H	Hydrogen	$1s$	13.60
2 He	Helium	$1s^2$	24.59
3 Li	Lithium	[He]$2s$	5.39
4 Be	Beryllium	$\ldots 2s^2$	9.32
5 B	Boron	$\ldots 2s^2 2p$	8.30
6 C	Carbon	$\ldots 2s^2 2p^2$	11.26
7 N	Nitrogen	$\ldots 2s^2 2p^3$	14.53
8 O	Oxygen	$\ldots 2s^2 2p^4$	13.62
9 F	Fluorine	$\ldots 2s^2 2p^5$	17.42
10 Ne	Neon	$\ldots 2s^2 2p^6$	21.56
11 Na	Sodium	[Ne]$3s$	5.14
12 Mg	Magnesium	$\ldots 3s^2$	7.65
13 Al	Aluminum	$\ldots 3s^2 3p$	5.99
14 Si	Silicon	$\ldots 3s^2 3p^2$	8.15
15 P	Phosphorus	$\ldots 3s^2 3p^3$	10.49
16 S	Sulfur	$\ldots 3s^2 3p^4$	10.36
17 Cl	Chlorine	$\ldots 3s^2 3p^5$	12.97
18 Ar	Argon	$\ldots 3s^2 3p^6$	15.76
19 K	Potassium	[Ar]$4s$	4.34
20 Ca	Calcium	$\ldots 4s^2$	6.11
21 Sc	Scandium	$\ldots 4s^2 3d$	6.54
22 Ti	Titanium	$\ldots 4s^2 3d^2$	6.82
23 V	Vanadium	$\ldots 4s^2 3d^3$	6.74
24 Cr	Chromium	$\ldots 4s 3d^5$	6.77
25 Mn	Manganese	$\ldots 4s^2 3d^5$	7.44
26 Fe	Iron	$\ldots 4s^2 3d^6$	7.87
27 Co	Cobalt	$\ldots 4s^2 3d^7$	7.86
28 Ni	Nickel	$\ldots 4s^2 3d^8$	7.64
29 Cu	Copper	$\ldots 4s 3d^{10}$	7.73
30 Zn	Zinc	$\ldots 4s^2 3d^{10}$	9.39
31 Ga	Gallium	$\ldots 4s^2 3d^{10} 4p$	6.00
32 Ge	Germanium	$\ldots 4s^2 3d^{10} 4p^2$	7.90
33 As	Arsenic	$\ldots 4s^2 3d^{10} 4p^3$	9.81
34 Se	Selenium	$\ldots 4s^2 3d^{10} 4p^4$	9.75
35 Br	Bromine	$\ldots 4s^2 3d^{10} 4p^5$	11.81
36 Kr	Krypton	$\ldots 4s^2 3d^{10} 4p^6$	14.00
37 Rb	Rubidium	[Kr]$5s$	4.18
38 Sr	Strontium	$\ldots 5s^2$	5.70
39 Y	Yttrium	$\ldots 5s^2 4d$	6.38
40 Zr	Zirconium	$\ldots 5s^2 4d^2$	6.84
41 Nb	Niobium	$\ldots 5s 4d^4$	6.88
42 Mo	Molybdenum	$\ldots 5s 4d^5$	7.10
43 Tc	Technetium	$\ldots 5s^2 4d^5$	7.28
44 Ru	Ruthenium	$\ldots 5s 4d^7$	7.37
45 Rh	Rhodium	$\ldots 5s 4d^8$	7.46
46 Pd	Palladium	$\ldots 4d^{10}$	8.34
47 Ag	Silver	$\ldots 5s 4d^{10}$	7.58
48 Cd	Cadmium	$\ldots 5s^2 4d^{10}$	8.99
49 In	Indium	$\ldots 5s^2 4d^{10} 5p$	5.79
50 Sn	Tin	$\ldots 5s^2 4d^{10} 5p^2$	7.34
51 Sb	Antimony	$\ldots 5s^2 4d^{10} 5p^3$	8.64
52 Te	Tellurium	$\ldots 5s^2 4d^{10} 5p^4$	9.01
53 I	Iodine	$\ldots 5s^2 4d^{10} 5p^5$	10.45
54 Xe	Xenon	$\ldots 5s^2 4d^{10} 5p^6$	12.13
		$\ldots$	

Espectros de R-X

A organização da tabela periódica reflete a distribuição dos e^- nas camadas mais externas dos átomos. No entanto, é importante lembrar que a teoria de camadas também governa as camadas internas dos átomos, onde os e^- são muito mais ligados e as energias envolvidas mais intensas.
Essa organização interna pode ser examinada por meio dos espectros de R-X emitidos quando ocorrem transições nessas camadas.





Parênteses para Transições Radiativas

Estados estacionários não irradiam, pois têm energia bem definida e a dependência temporal desaparece na densidade de probabilidade.

Estamos interessados nas transições radiativas, que aparecem devido à interação da partícula com os campos eletromagnéticos.

Esse é um assunto complexo, mas que felizmente pode ser tratado de maneira aproximada. Aproximada no sentido de que vamos considerar essa interação como sendo uma perturbação ao sistema e, dessa forma, vamos poder continuar usando os resultados para os níveis de energia, etc., sem nos preocuparmos com a interação.

Parênteses para Transições Radiativas

Vamos então associar uma carga à partícula e tratar classicamente a radiação produzida quando ela é acelerada. Ou seja, esse tratamento semiclássico usa os níveis de energia e outras propriedades da partícula da teoria de Schrödinger e inclui a excitação e desexcitação dos níveis pela teoria eletromagnética clássica.

Vamos tratar inicialmente o caso unidimensional.

Podemos introduzir o momento de dipolo elétrico:

$$e\langle x\rangle = e\int_{-\infty}^{\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

Estamos particularmente interessados nas situações nas quais essa grandeza oscila no tempo, pois só assim pode emitir radiação. Essa dependência não vai aparecer se tratarmos com estados estacionários, pois:

$$e\langle x\rangle = e\int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x)|^2\,dx$$

nesse caso não depende do tempo. A hipótese de Bohr é satisfeita nessas condições.

Um sistema que irradia corresponde à situação em que Ψ é descrita como uma superposição de estados estacionários.

Podemos somar quaisquer 2 autofunções, desde que tenham energias diferentes.

Vamos escolher 2 números quânticos, n e n', tal que $E_n > E_{n'}$:

$$\Psi(x,t) = c\psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar} + c'\psi_{n'}(x)e^{-iE_{n'}t/\hbar}$$

Esse tipo de superposição é chamado de estado de transição, pois a função de onda fornece probabilidades simultâneas para o sistema estar em duas energias diferentes.

Mas a densidade de probabilidade apresenta partes que dependem do tempo e partes independentes do tempo, de tal forma que o momento de dipolo elétrico fica:

$$e\langle x\rangle = e\int_{-\infty}^{\infty} x\left\{|c\psi_n|^2 + c^*c'\psi_n^*\psi_{n'}e^{i(E_n-E_{n'})t/\hbar} + c'^*c\psi_{n'}^*\psi_n e^{-i(E_n-E_{n'})t/\hbar} + |c'\psi_{n'}|^2\right\}dx.$$

As integrais que contém os termos estacionários não se associam a processos radiativos (e dão 0 para autofunções com paridade bem definida).

As outras 2 contribuições têm comportamento oscilatório, com frequência:

$$\nu = \frac{E_n - E_{n'}}{h}$$

Essa oscilação da carga é análoga à de uma antena linear, que, quando excitada numa certa frequência, emite radiação nessa frequência.

A função de onda deve conter todas as informações sobre o sistema quântico que descreve. Nesse caso, os estados de transição têm as informações necessárias para descrever as intensidades de transição e outras propriedades relevantes.

Essas informações estão contidas nos coeficientes complexos (amplitudes) dos termos oscilatórios. Sabemos que a intensidade da radiação é proporcional ao quadrado da amplitude de oscilação do momento de dipolo elétrico, pois os campos elétrico e magnético são proporcionais a ele.

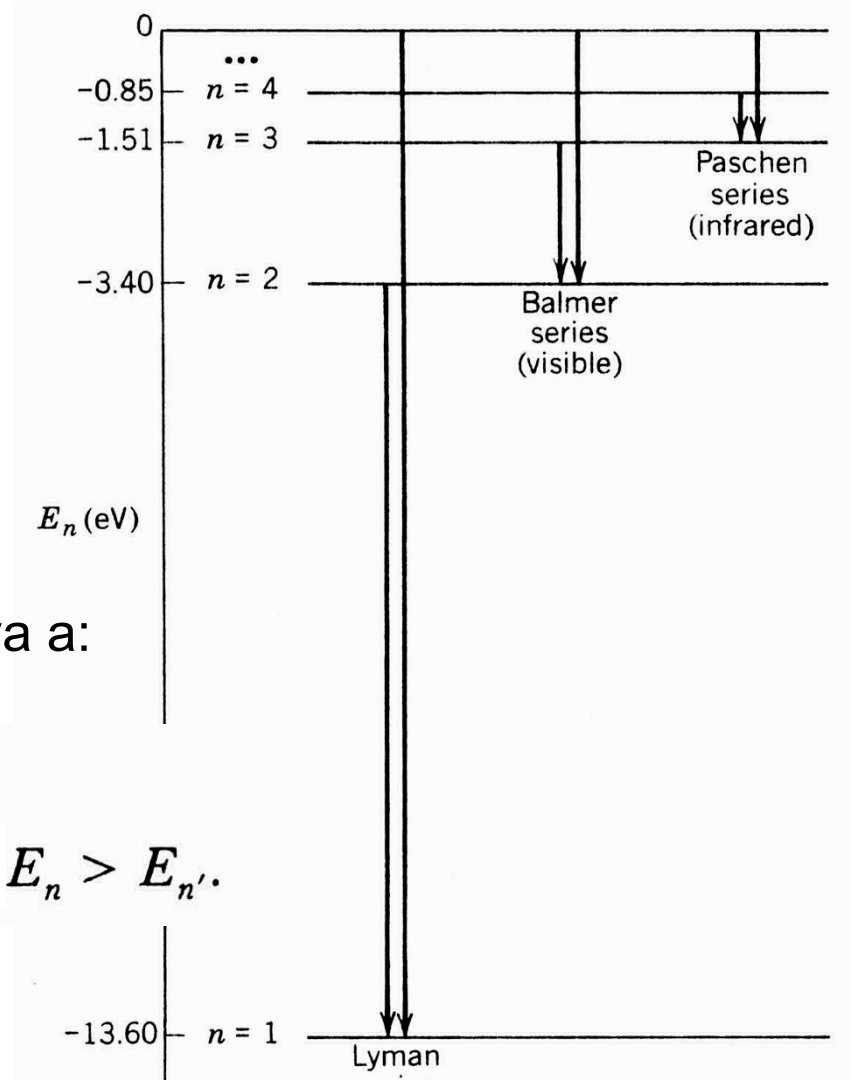
As amplitudes complexas acima são chamadas amplitudes de transição quânticas, uma vez que o quadrado de seus respectivos módulos determina a probabilidade para as transições $n' \rightarrow n$ ou $n \rightarrow n'$. A amplitude de transição de dipolo, para a transição $n \rightarrow n'$ é dada por:

$$x_{n'n} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n'}^{*}(x)\, x\, \psi_n(x)\, dx$$

Sendo que a intensidade da transição é dada pelo quadrado do seu módulo. A troca de n por n' leva a um resultado que não é independente do primeiro, pois:

$$x^*_{nn'} = x_{n'n}$$

$$\left(x_{n'n} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{n'}(x)\, x\, \psi_n(x)\, dx \right)$$



Voltando ao H

Nesse caso, a superposição de estados leva a:

$$\Psi = c\Psi_{n\ell m} + c'\Psi_{n'\ell' m'}$$
$$= c\psi_{n\ell m} e^{-iE_n t/\hbar} + c'\psi_{n'\ell' m'} e^{-iE_{n'} t/\hbar}$$ com $E_n > E_{n'}$.

Essa função de onda representa um átomo em transição entre os estados com energias E_n e $E_{n'}$. A transição é causada pela interação do átomo com o campo eletromagnético. O efeito da perturbação depende do tempo e, assim, as probabilidades $|c|^2$ e $|c'|^2$ também variam no tempo.

A densidade de probabilidade oscila no tempo com frequência:

$$\nu = \frac{E_n - E_{n'}}{h}$$

O momento de dipolo elétrico do átomo é dado por $-e\langle \mathbf{r} \rangle$ onde $\mathbf{r}$ representa o vetor posição do elétron com relação ao núcleo. Então podemos escrever:

$$-e\langle \mathbf{r} \rangle = -e\int \Psi^* \mathbf{r} \Psi \, d\tau$$

$$= -e\int \mathbf{r}\Big\{ |c\psi_{n\ell m}|^2 + c^* c' \psi^*_{n\ell m}\psi_{n'\ell' m'} e^{i\omega t}$$

$$+ c'^* c \psi^*_{n'\ell' m'}\psi_{n\ell m} e^{-i\omega t} + |c'\psi_{n'\ell' m'}|^2 \Big\} \, d\tau$$

O coeficiente do termo $e^{-i\omega t}$ representa a amplitude do dipolo oscilante. O quadrado do seu módulo representa a probabilidade de transição entre os estados inicial e final, representados respectivamente por $(n\,\ell\,m)$ e $(n'\,\ell'\,m')$.

Essa amplitude contém o fator: $\int \psi^*_{n'\ell' m'} \mathbf{r} \psi_{n\ell m} \, d\tau$

que é chamado de amplitude de transição de dipolo, para a transição $(n\,\ell\,m) \rightarrow (n'\,\ell'\,m')$.

Esse termo é importante, pois carrega a informação quântica essencial sobre os 2 estados envolvidos na transição.

É interessante lembrar que o vetor $\mathbf{r}$ tem componentes cartesianas das por: $r \sin\theta \cos\phi, \quad r \sin\theta \sin\phi, \quad$ e $\quad r\cos\theta$

Lembrando da forma das autofunções:

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

podemos escrever as componentes da amplitude de transição como:

$$\int_0^\infty R_{n'\ell'} r R_{n\ell} r^2\, dr \cdot \begin{cases} \int Y^*_{\ell' m'} \sin\theta \cos\phi Y_{\ell m}\, d\Omega \\ \int Y^*_{\ell' m'} \sin\theta \sin\phi Y_{\ell m}\, d\Omega \\ \int Y^*_{\ell' m'} \cos\theta\, Y_{\ell m}\, d\Omega. \end{cases}$$

Apenas as partes angulares são diferentes entre as componentes.

Portanto as regras de transição para os processos radiativos vêm das propriedades dessas integrais, pois as integrais em θ e ϕ são diferentes de 0 apenas quando os números quânticos $(\ell\ m) \rightarrow (\ell'\ m')$ obedecem a certas relações.

A dependência em ϕ é mais fácil de perceber, pois:

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta) e^{im\phi}$$

Mudando cosϕ e senϕ para notação complexa, as componentes x, y e z da amplitude de transição contém as seguintes integrais:

$$\int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} e^{im\phi}\, d\phi, \quad \int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i} e^{im\phi}\, d\phi, \quad \text{e} \quad \int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} e^{im\phi}\, d\phi.$$

Que resultam em:

$$\int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} e^{\pm i\phi} e^{im\phi}\, d\phi = 0 \text{ a menos que } m - m' \pm 1 = 0$$

e $$\int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} e^{im\phi}\, d\phi = 0 \text{ a menos que } m - m' = 0.$$

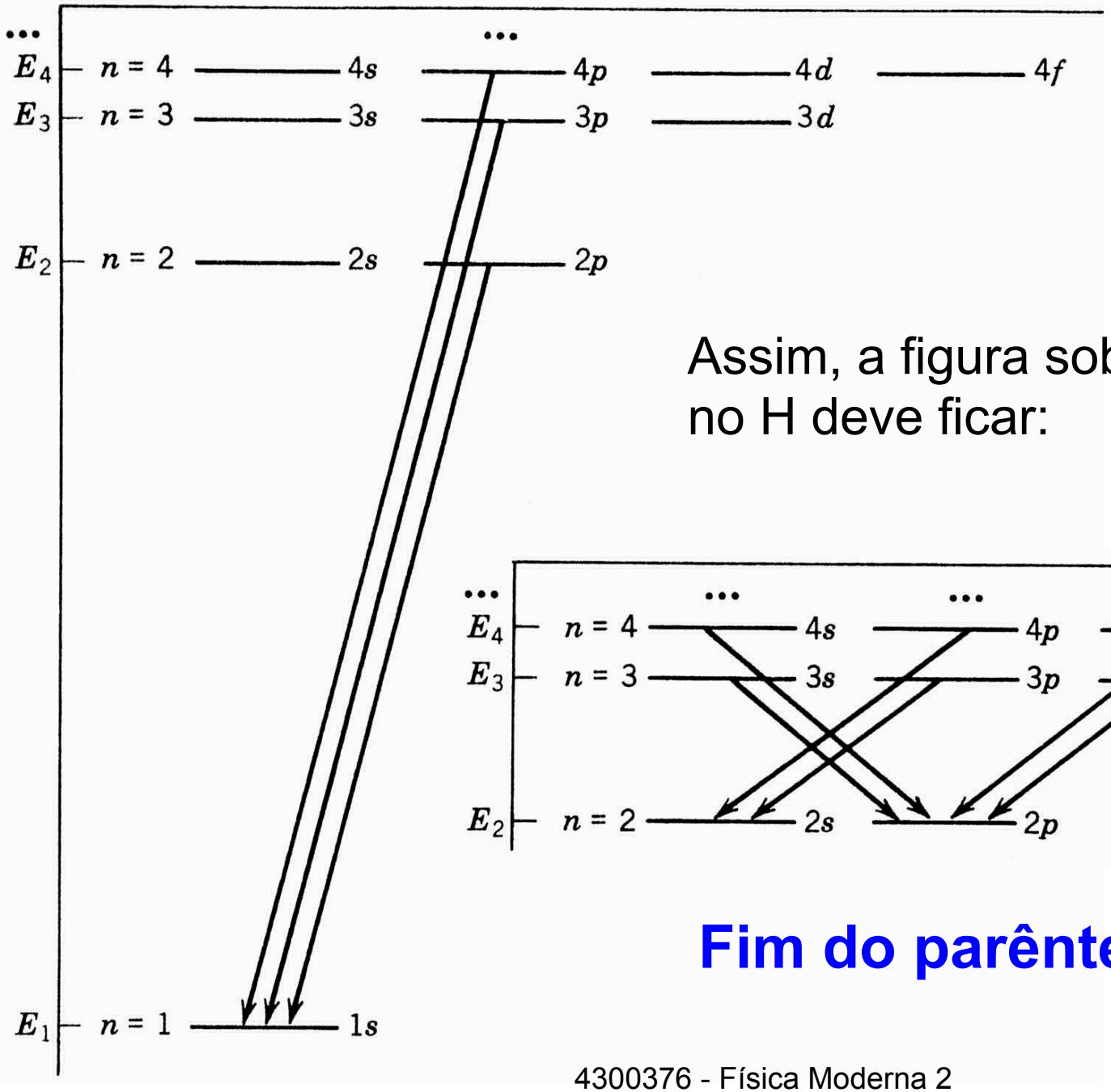
O primeiro resultado impõe restrições a m e m' para as componentes x e y da amplitude de dipolo, enquanto que a segunda diz respeito à componente z.

Essas restrições podem ser resumidas em: $\Delta m = 0$ ou ± 1

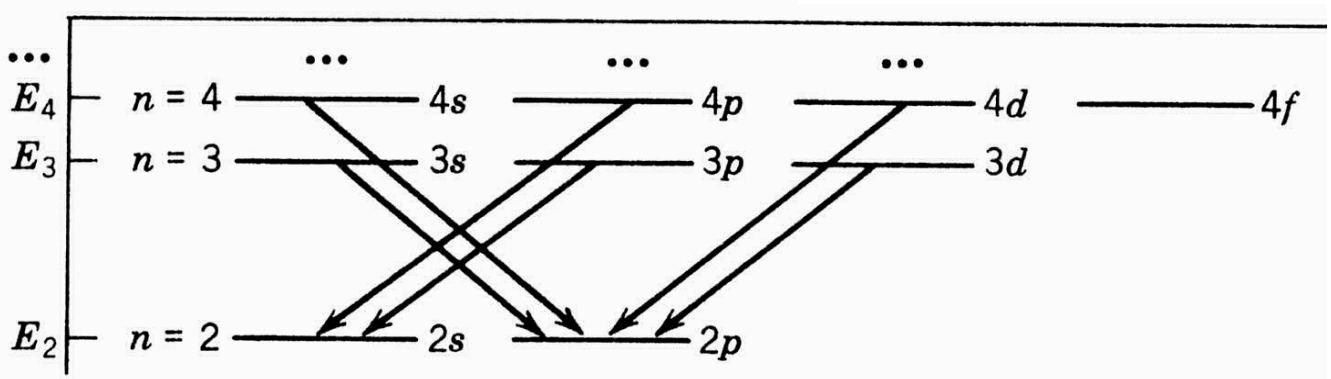
As integrais em θ não são tão simples e as 3 componentes da amplitude de transição contém as seguintes integrais:

$$\int_0^\pi \Theta_{\ell' m'} \sin\theta \, \Theta_{\ell m} \sin\theta \, d\theta \quad \text{e} \quad \int_0^\pi \Theta_{\ell' m'} \cos\theta \, \Theta_{\ell m} \sin\theta \, d\theta .$$

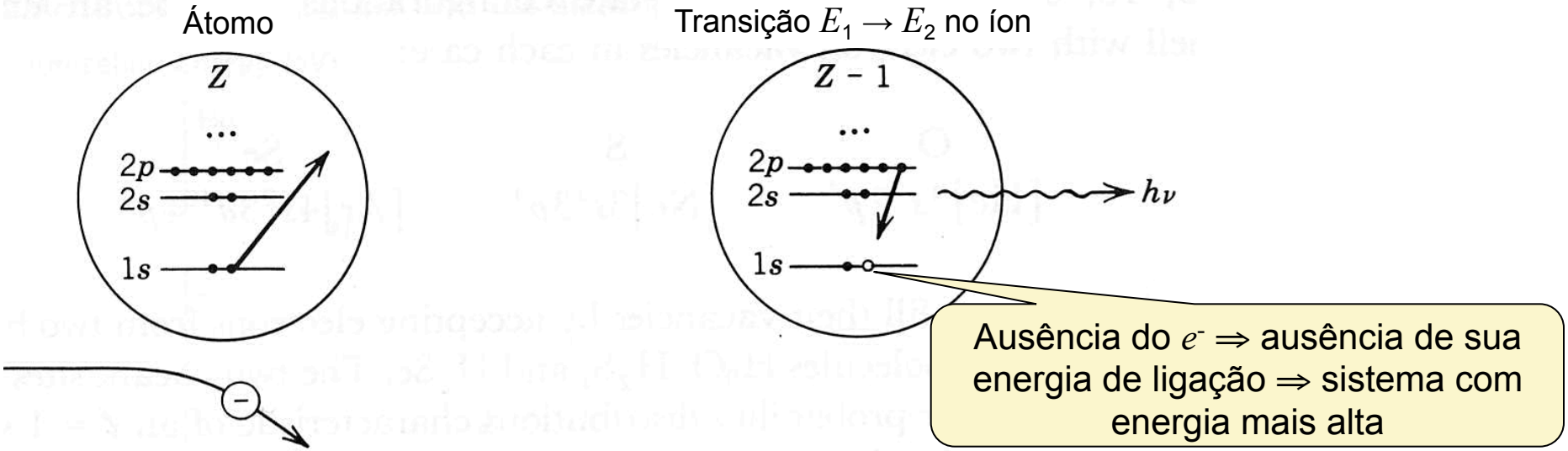
A solução, para quaisquer $(\ell\, m)$ e $(\ell'\, m')$ envolve as relações de recorrência e as propriedades de ortogonalidade dos polinômios de Legendre. O que nos interessa é que o resultado se anula a não ser que ℓ e ℓ' difiram de 1 unidade (valendo ainda as restrições para m e m'). Ou seja: $\Delta \ell = \pm 1$



Assim, a figura sobre as transições no H deve ficar:



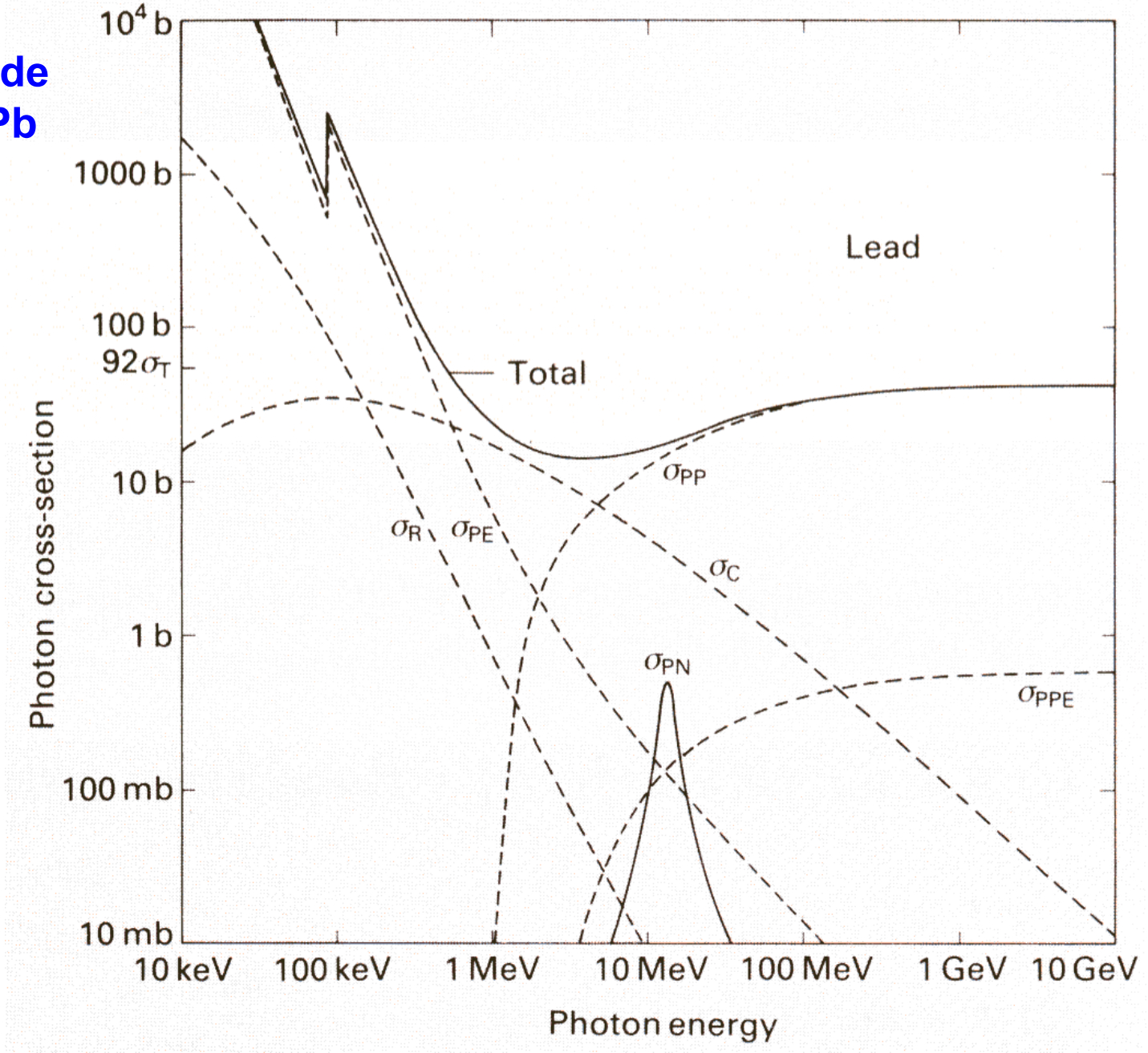
Fim do parênteses



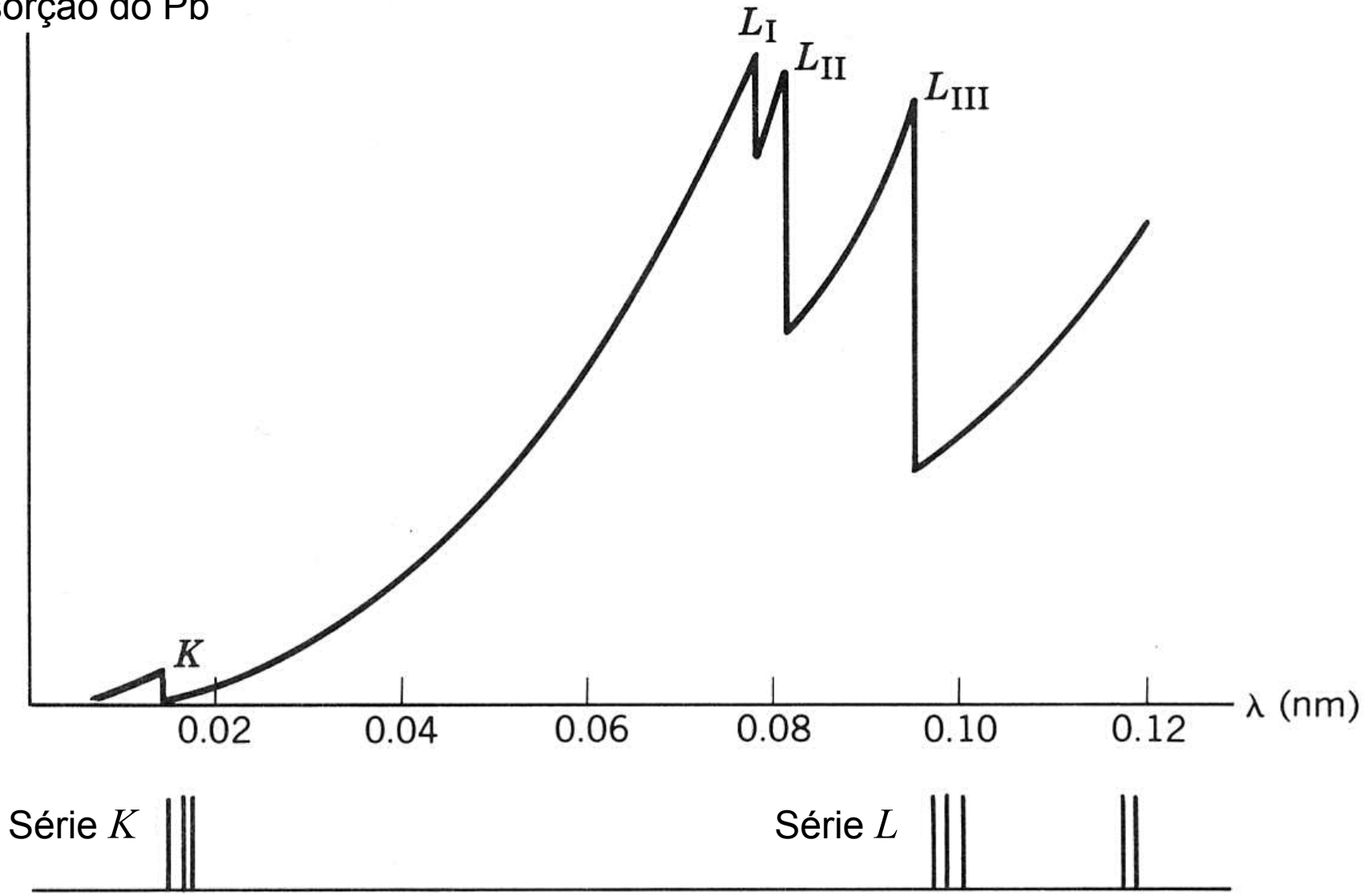
Um átomo pode ser excitado em um processo de colisão com partículas carregadas, como ilustrado na figura (falar em PIXE). O resultado da excitação é um estado iônico com energia E_1. Isso pode ser representado pela criação de uma vacância (ou buraco) em uma das camadas internas completas. Atenção: nesse caso, estamos assumindo que o e^- tenha sido expulso do átomo, mas ele poderia ir para um estado ligado desocupado, acima da última camada. O que não pode acontecer é dele ir para um estado já ocupado por outro e^- (Pauli).

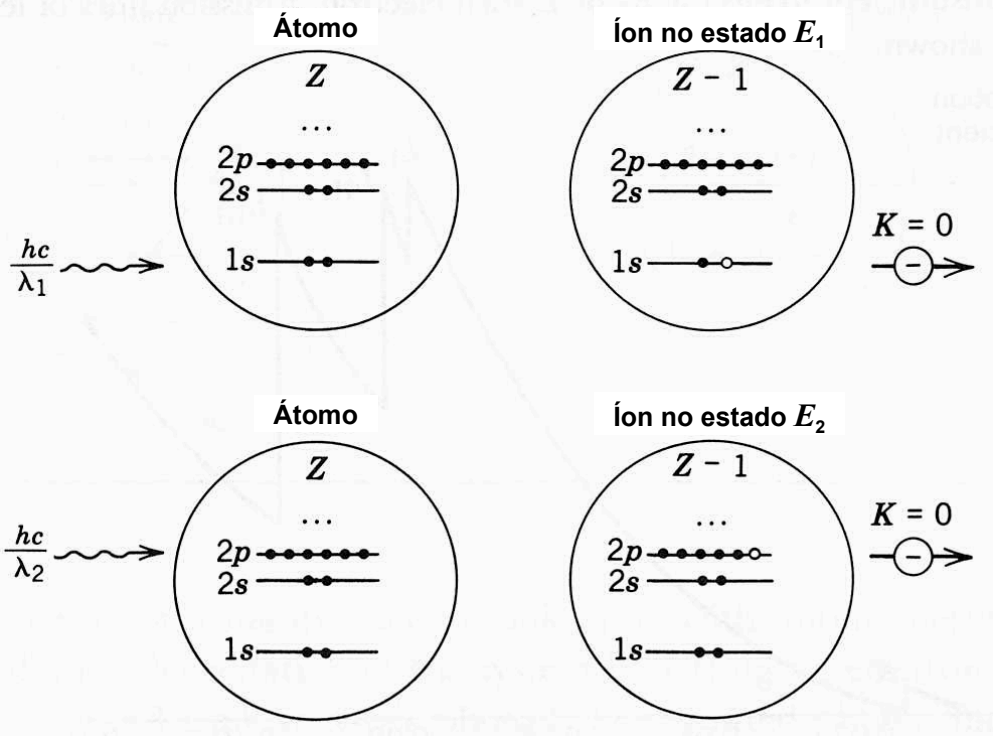
A desexcitação radiativa do sistema se dá quando um e^- de uma camada de energia mais elevada ocupa o buraco e emite um fóton de energia $h\nu = E_1 - E_2$, onde E_2 é a energia do estado final, com o buraco indo para a camada mais alta.

Seção de choque de fotoabsorção no Pb



Coeficiente de absorção do Pb





Representação dos processos de absorção de R-X para energias próximas de 2 bordas de absorção (note que o e^- sai com E = 0). Nesse caso, $E_1 > E_2$, ou $\lambda_1 < \lambda_2$. As energias e comprimentos de onda estão relacionados por:

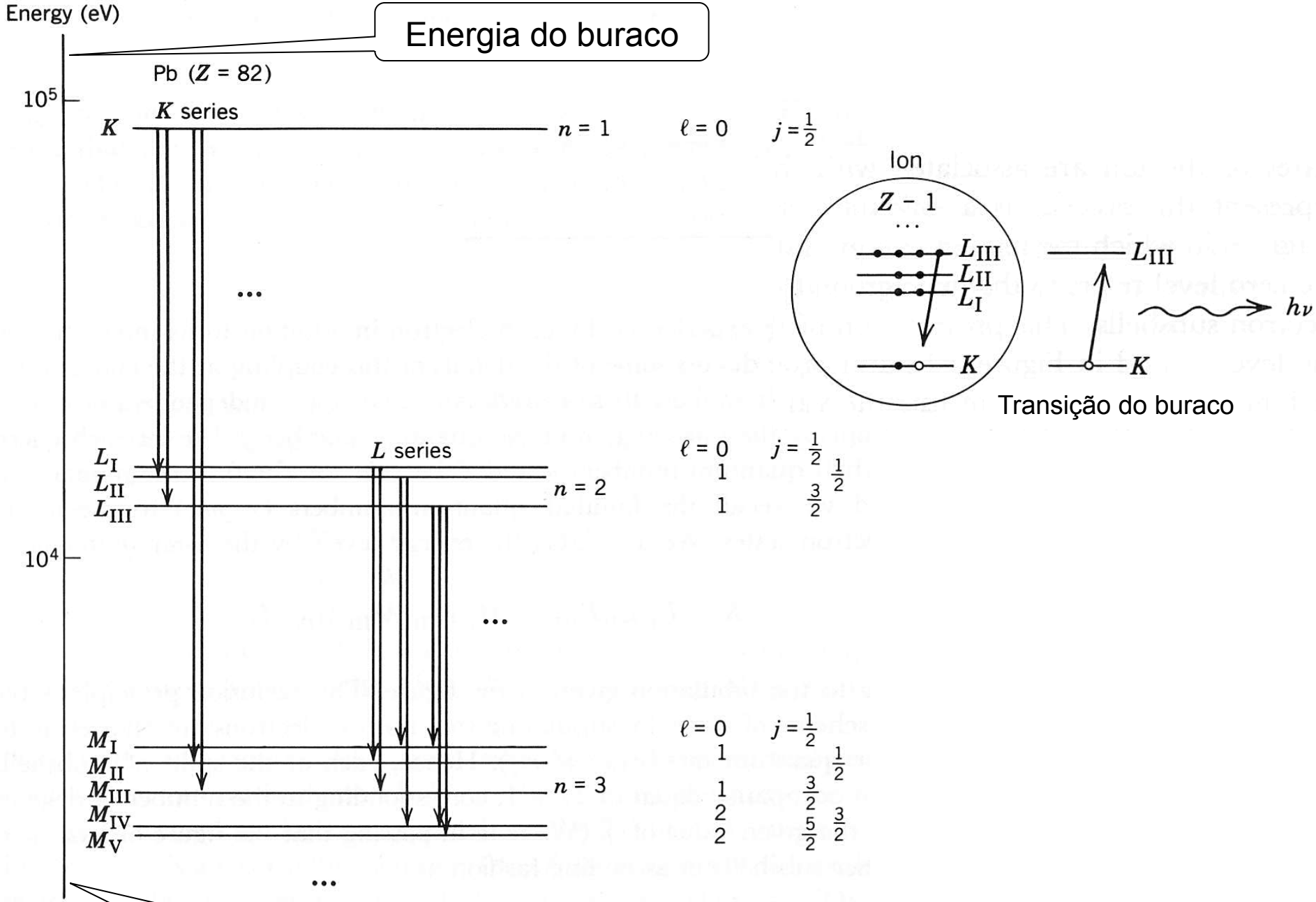
$$\frac{hc}{\lambda_1} = E_1 - E_{\text{átomo}} \quad \text{e} \quad \frac{hc}{\lambda_2} = E_2 - E_{\text{átomo}}$$

Onde $E_{\text{átomo}}$ representa a energia inicial do átomo, que não nos interessa. Podemos subtrair as 2 eq. e obter uma relação entre absorção e emissão de R-X: $h\nu = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2}$

Essa expressão relaciona os comprimentos de onda de 2 bordas de absorção com uma determinada linha de emissão do espectro. Lembrando que $h\nu = hc/\lambda$, vale a desigualdade: $\frac{hc}{\lambda} < \frac{hc}{\lambda_1}$, ou $\lambda > \lambda_1$.

Isso explica porque as linhas de uma dada série têm λ acima da borda correspondente.

Energia do buraco



Transição do buraco

Escala logarítmica!

EXEMPLO 9-8

Determine a tensão de aceleração mínima necessária para um tubo de raio X com um anodo de ^{26}Fe emitir uma linha K_α do espectro. Determine também o comprimento de onda de um fóton K_α.

Podemos utilizar a descrição aproximada dos resultados da teoria de Hartree para estimar a energia de excitação do átomo de ^{26}Fe com um buraco em sua camada K. A equação (9-27) nos diz que essa energia é

$$E_K \simeq + \frac{\mu Z_n^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\, 2\hbar^2 n^2} \simeq 13{,}6 \frac{Z_n^2}{n^2}\,\text{eV}$$

$$\simeq 13{,}6\,(Z-2)^2\,\text{eV} = 13{,}6 \times (24)^2\ \text{eV}$$

$$\simeq +\,7{,}8 \times 10^3\ \text{eV}.$$

onde usamos $n = 1$ e $Z_n = Z_1 = Z - 2$. Um elétron do feixe bombardeando um átomo no anodo deverá ter essa energia para produzir um buraco. A tensão V necessária para acelerar o elétron do feixe a essa energia é simplesmente

$$V \simeq 7{,}8 \times 10^3\ \text{V}$$

Depois do átomo ter emitido um fóton K_α, o buraco se encontrará em sua camada L. Sua energia será então

$$E_L \simeq +\,13{,}6 \frac{Z_n^2}{n^2}\,\text{eV} \simeq 13{,}6\,\frac{(26-10)^2}{4}\,\text{eV} \simeq +\,8{,}7 \times 10^2\ \text{eV}$$

onde fizemos $n = 2$, segundo os resultados do exemplo 9-5, fizemos $Z_n = Z_2 = Z - 10$. O fóton leva uma energia

$$h\nu = E_K - E_L$$

Mas como o valor de E_L é somente cerca de 10% do valor de E_K e como a aproximação grosseira que utilizamos para obter E_K não tem normalmente uma precisão de 10% , poderíamos escrever igualmente

$$h\nu \simeq E_K$$

O comprimento de onda λ do fóton está relacionado com sua freqüência ν e velocidade c pela expressão

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{h\nu}{hc} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\lambda} \simeq \frac{E_K}{hc} \simeq \frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 4\pi c\hbar^3}(Z-2)^2$$

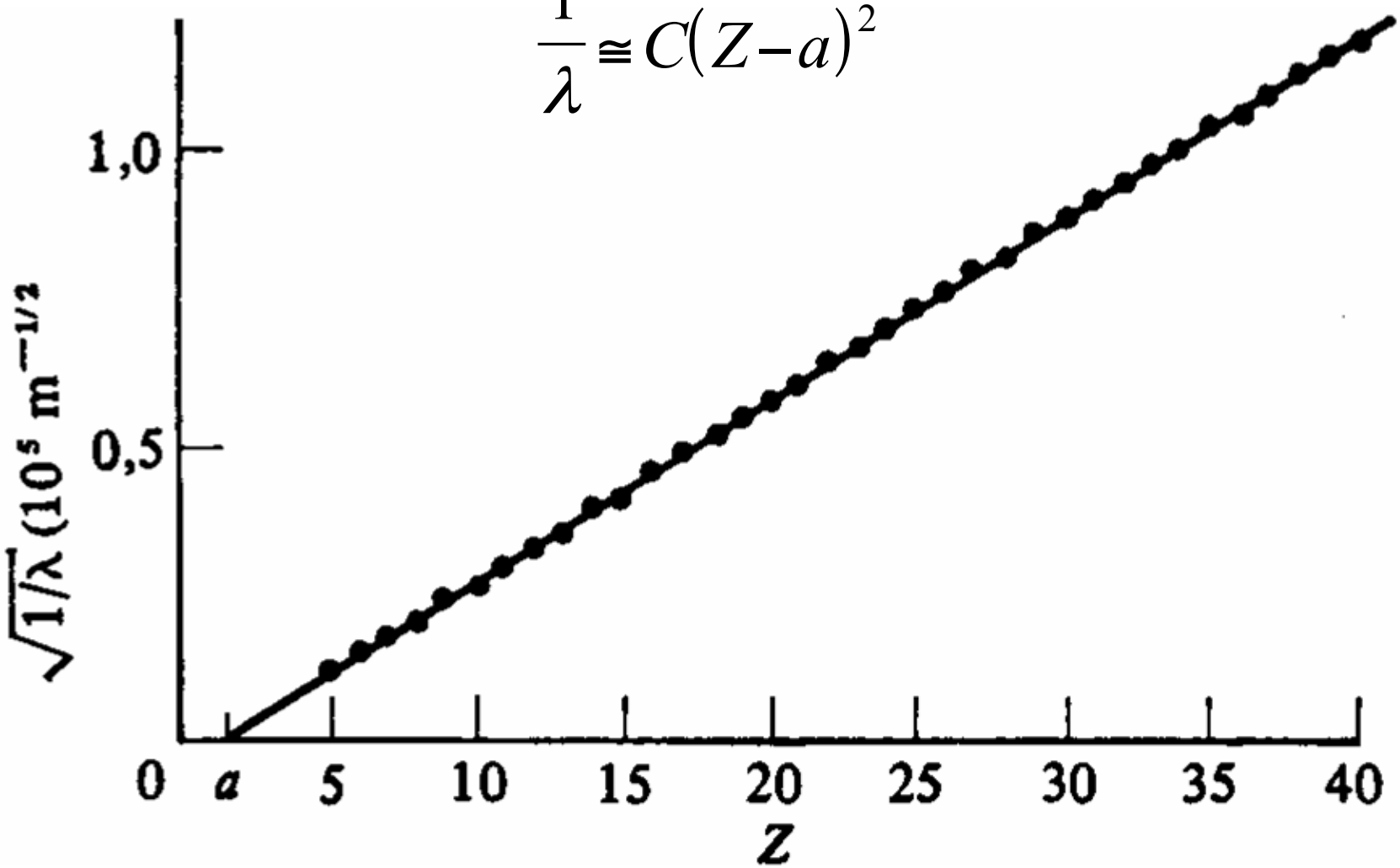
O termo que multiplica $(Z-2)^2$ é a constante de Rydberg, R_M, definida em (4-22). Assim

$$\frac{1}{\lambda} \simeq R_M(Z-2)^2 \simeq 1{,}1 \times 10^7 \times (24)^2 \text{ m}^{-1} = 6{,}3 \times 10^9 \text{ m}^{-1} \tag{9-30}$$

e

$$\lambda \simeq 1{,}6 \times 10^{-10} \text{ m} = 1{,}6 \text{ Å}$$

Este comprimento de onda é da ordem do tamanho de uma molécula típica, ou do espaçamento entre átomos ou moléculas num cristal. Conseqüentemente os raios X K_α, o ^{26}Fe podem ser usados em experiências de difração para estudar a estrutura de moléculas ou cristais. ▲

Moseley, 1913

$$\frac{1}{\lambda} \cong C(Z-a)^2$$