

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

FÍSICA MODERNA I

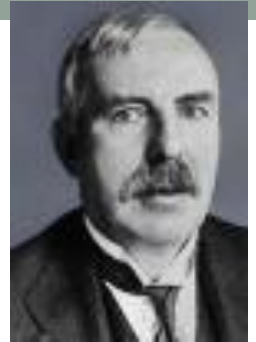
AULA 10

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br**

**2o. Semestre de 2018
Monitor: Felipe Prado**

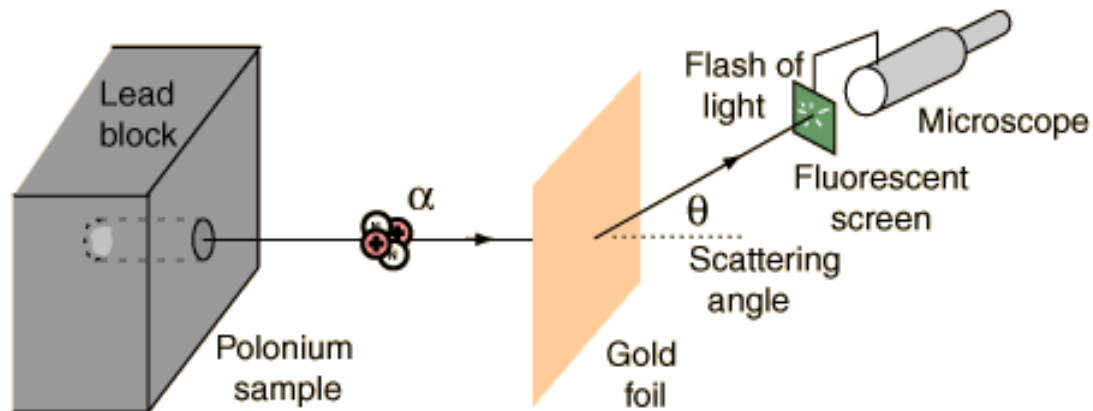
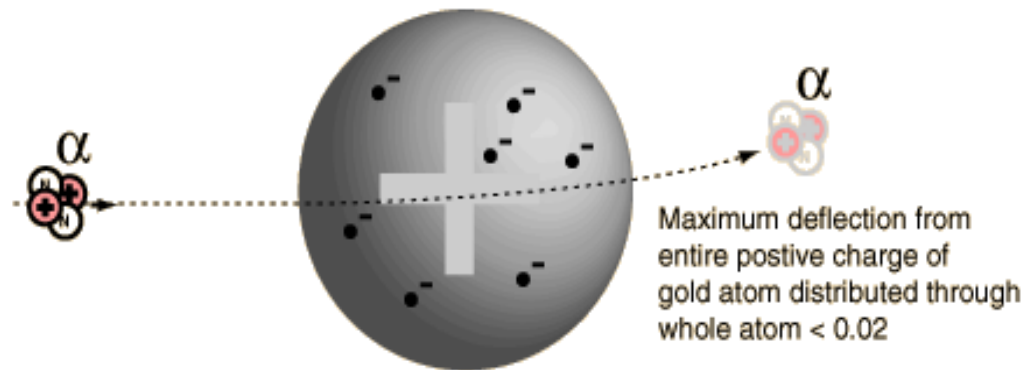
<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=64495>

Estrutura do átomo



- As primeiras experiências de espalhamento

Modelo de Thomson: previa deflexão pequena das partículas α



- O número de partículas α espalhadas em um ângulo sólido $d\Omega$ em torno de um ângulo de espalhamento θ

$$dN = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_\alpha} \right)^2 \frac{1}{4} \frac{Int}{\sin^4 \theta/2} d\Omega$$

Pontos importantes:

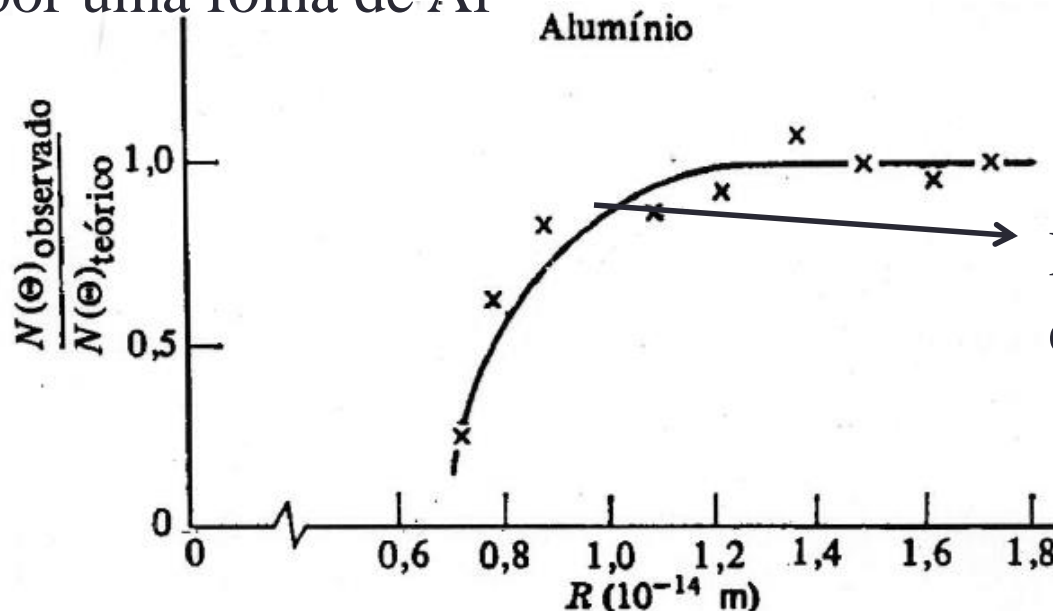
- O espalhamento é proporcional a Z_1^2 e Z_2^2
- O termo Mv^2 é a energia cinética da partícula incidente, e o espalhamento é inversamente proporcional a energia cinética desta partícula
- O espalhamento é inversamente proporcional a 4 potencia de $\sin(\theta/2)$
- O espalhamento é proporcional a espessura da folha de metal n

$$dN \sim \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot I \cdot n \cdot t \cdot d\Omega \quad \begin{array}{l} \text{Secção de choque de} \\ \text{Rutherford} \end{array}$$

Secção de choque diferencial de Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_\alpha} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta/2}$$

Fornece o número de partículas espalhadas em um dado elemento de ângulo sólido $d\Omega$. Dados obtidos pelo grupo de Rutherford para o espalhamento de partículas α de várias energias a um ângulo fixo grande por uma folha de Al



Raio do núcleo de Al
é aproximadamente
 $10^{-14}\text{m} = 10\text{F}$

Modelo de Rutherford

De acordo com o modelo de Rutherford o número de partículas espalhadas α por núcleo observadas na tela de um cintilômetro de área A será a uma distância r da folha espalhadora:

$$\Delta N = \text{Int} \left(\frac{A}{r^2} \right) \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_\alpha} \right)^2 \frac{1}{4} \frac{1}{\text{sen}^4 \theta / 2}$$

Intensidade do feixe α

é o número de núcleos por unidade de área (átomos/cm²)

partículas α

Partículas espalhadoras

Energia cinética das partículas

Fator devido a área do α antes do espalhamento
cintilômetro e a distância
deste da folha espalhadora

O Modelo de Bohr

- ❑ Em 1913, Niels Bohr propõe um modelo baseado nas ideias de Rutherford – artigo “On the constitution of atoms and molecules”:
 - ❑ Considerou que o elétron se move em torno do núcleo (muito + massivo) e com carga positiva

POSTULADOS:

- ❑ O elétron em um átomo se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob a influência da atração Coulombiana entre o elétron e o núcleo, obedecendo as leis da mecânica clássica.
- ❑ Em vez de infinitas orbitas que seriam possíveis segundo a mecânica clássica, o elétron só pode se mover em certas órbitas na qual seu momento angular orbital L é um múltiplo inteiro de \hbar ($h/2\pi$)

$$L=n\hbar \quad , \quad n=1,2,3....$$

O Modelo de Bohr

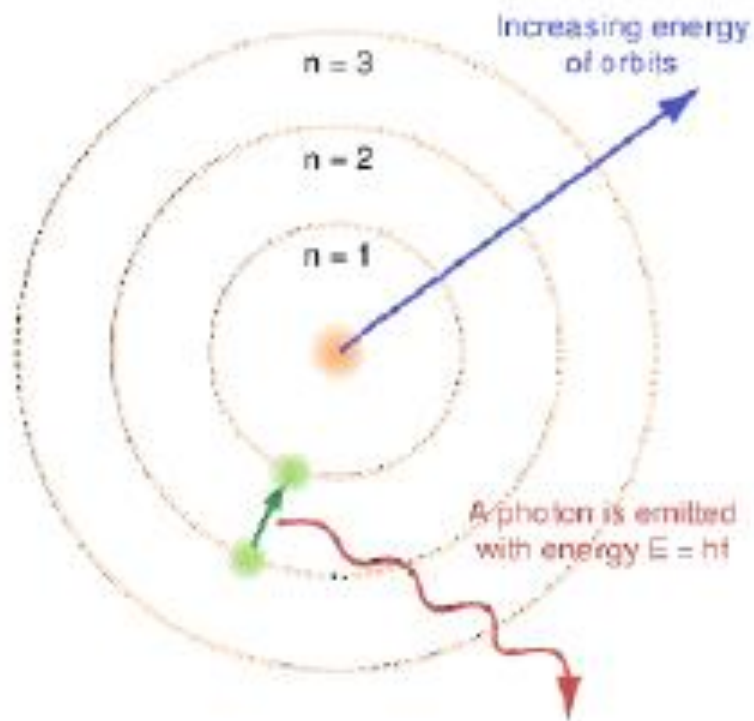
POSTULADOS:

- ❑ Apesar dos elétrons estarem acelerados, um elétron que se move em uma destas órbitas possíveis não emite radiação eletromagnética. Portanto a energia total E permanece constante. (não emissão contraria a eletromagnetismo clássico).
- ❑ É emitida radiação eletromagnética se um elétron se move inicialmente sobre uma órbita de energia E_i e depois muda seu movimento descontinuamente de forma a se mover em uma órbita E_f . A frequência da radiação emitida ν é igual a:

$$h\nu = E_i - E_f$$

o elétron pode transitar de uma órbita permitida para outra “num salto” emitindo um fóton e conservando energia do sistema

O Modelo de Bohr



- Orbita circular
- $L = n\hbar$
- Energia total constante

- $$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

O Modelo de Bohr – Energia

- A energia de um elétron atômico se movendo em uma das órbitas possíveis
- A energia cinética do sistema é devido ao elétron
- $K = \frac{1}{2} mv^2$
- O núcleo é massivo comparado com o elétron ($m_{\text{próton}} = 1836m_e$) e o núcleo pode ser considerado em repouso.
- A energia potencial V é

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- A energia mecânica total: $E = K + V = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

- Temos que $mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ $E = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Força centrípeta = Força Coulombiana

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

O Modelo de Bohr – Energia

$$E = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Para o H

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$r_n = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{e^4 m}{\hbar^2}$$

$$E_0 = -13,6\text{eV}$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 n^2 a_0}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2 n^2}$$

$$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

Energia
quantizada

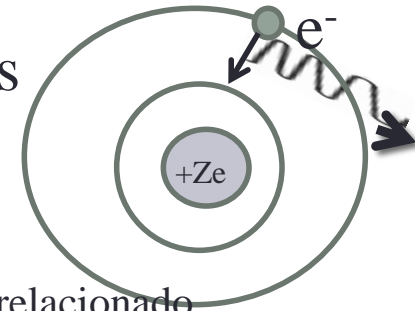
O estado de energia mais baixo:

$$n=1 \quad E_1 = E_0$$

menor raio

Modelo de Bohr

- A frequência da radiação emitida está relacionada às energias das órbitas:



$$h\nu = E_{n_i} - E_{n_f} \quad E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

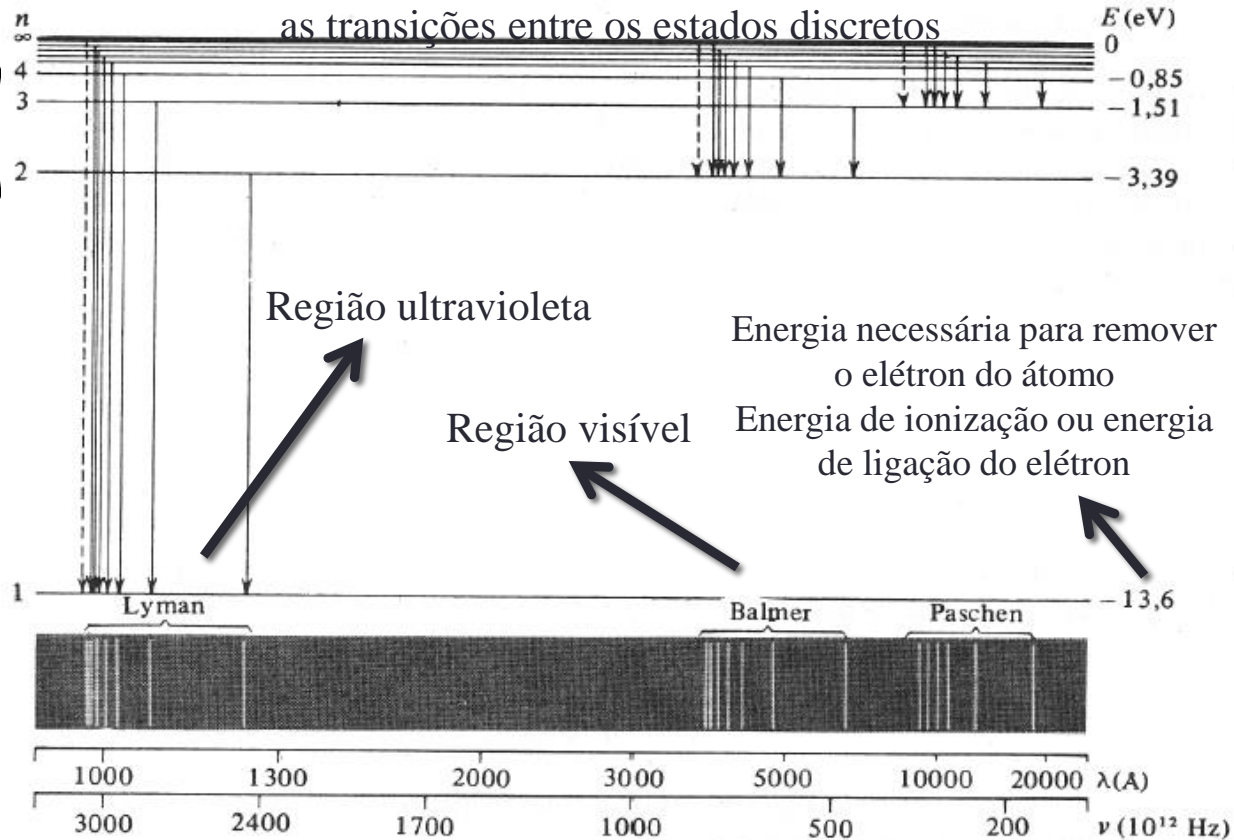
Para o átomo de H: espectro está relacionado

$$h\nu = -E_0 \frac{Z^2}{n_i^2} - \left(-E_0 \frac{Z^2}{n_f^2} \right)$$

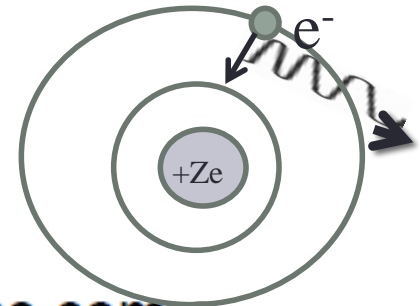
$$\nu = \frac{E_0 Z^2}{h} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_0 Z^2}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Valor teórico obtido por Bohr para a constante de Rydberg
Calculou $R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$



Modelo de Bohr



1. $n = 1 \Rightarrow$ estado fundamental (menor energia)
2. Excitação \Rightarrow transições para n maior ($n > 1$)
3. Volta para o estado fundamental: emissão de fótons com a diferença de energia entre os estados. Caso particular do H:
 $Z = 1$ e $n_f = 2$ ($n_i > n_f \Rightarrow$ desexcitação)

$$\kappa = R_\infty \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = R_\infty \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$R_n = \frac{E_0}{hc} = \frac{mk^2e^4}{4\pi\hbar^3}$$

Espectro de Balmer, se $R_H = R_\infty$. Bohr obteve valor bastante próximo.

Correção para massa nuclear finita \Rightarrow massa reduzida no lugar da massa do e^- .

$$m = m_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

e

$$M = m_p = 1,673 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\mu = \frac{mM}{m + M}$$

Na suposição de Bohr o núcleo estava imóvel (significa que sua massa era considerada infinita)

O espectro de linhas

A análise espectroscópica da luz emitida pela descarga em gases e vapores nos revelou uma intrincada estrutura de linhas, cada uma possuindo um determinado comprimento de onda específico.

Hélio

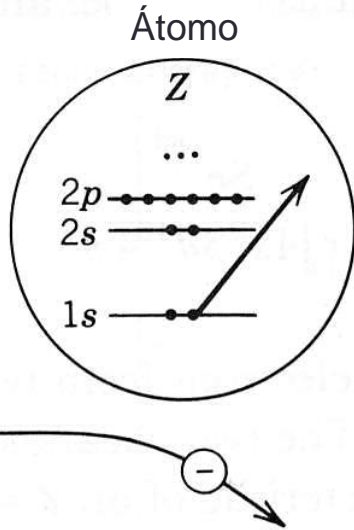
Xenônio

Oxigênio

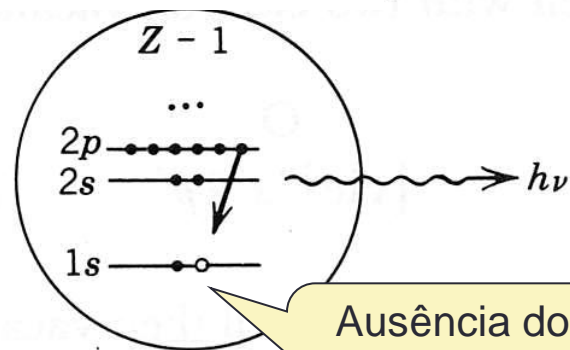
Hidrogênio

Sódio

Emissão de Raio-X



Transição $E_1 \rightarrow E_2$ no íon z

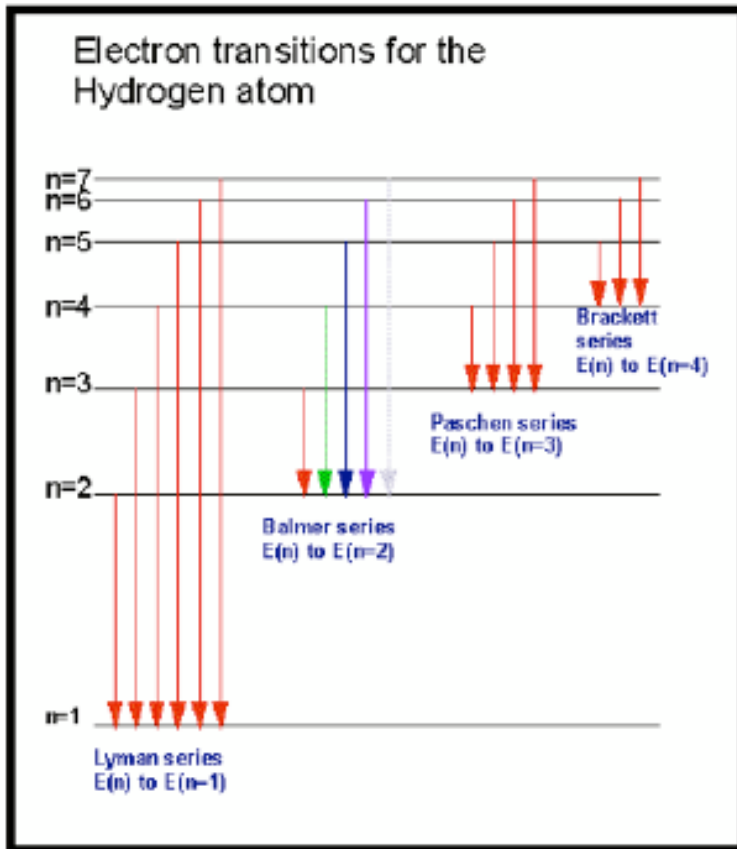


Ausência do $e^- \Rightarrow$ ausência de sua energia de ligação \Rightarrow sistema com energia mais alta

Como resultado temos a excitação de 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 radioativa 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.

Espectros Atômicos

- Podemos compreender as várias linhas do espectro do Hidrogênio como transições entre os estados de discretos de energia dos átomos deste elemento:

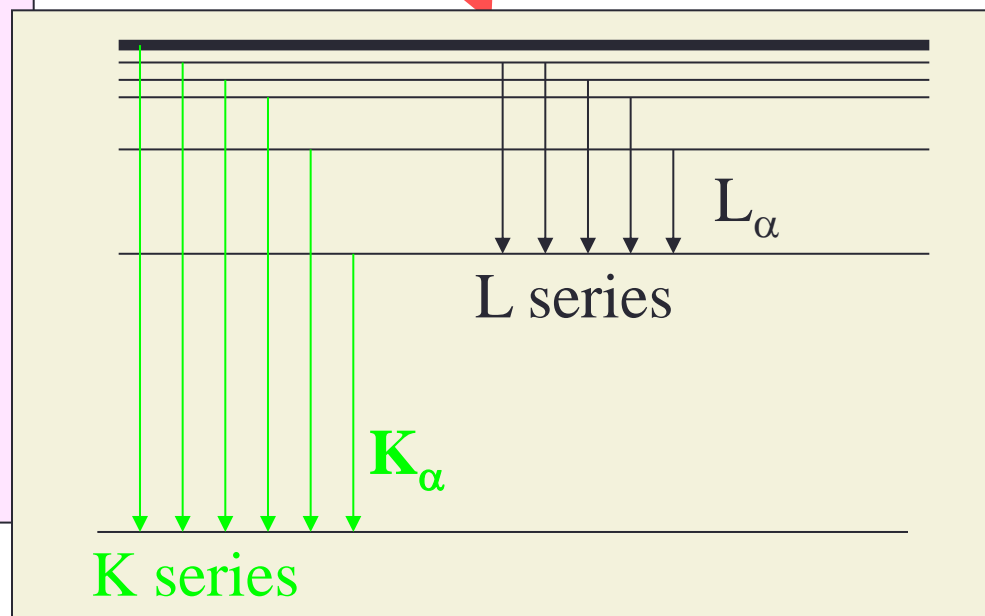
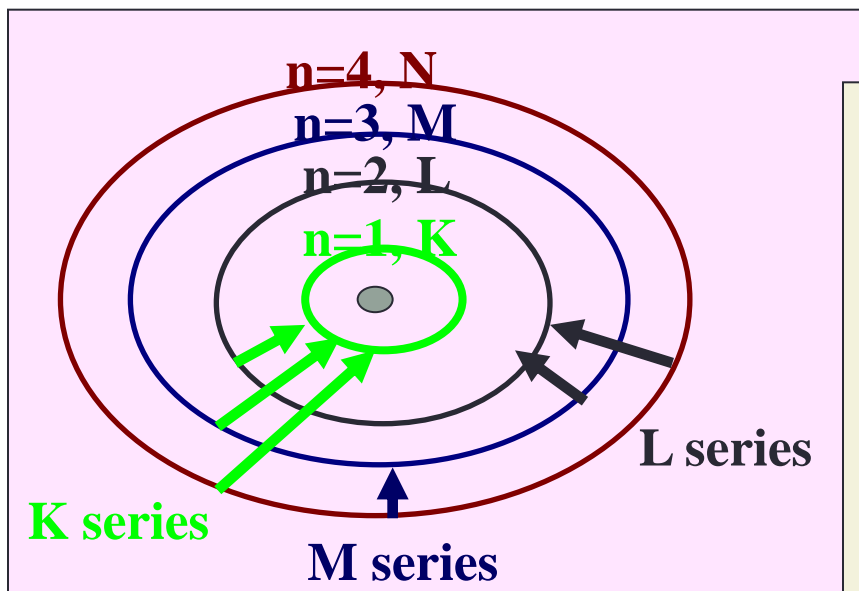
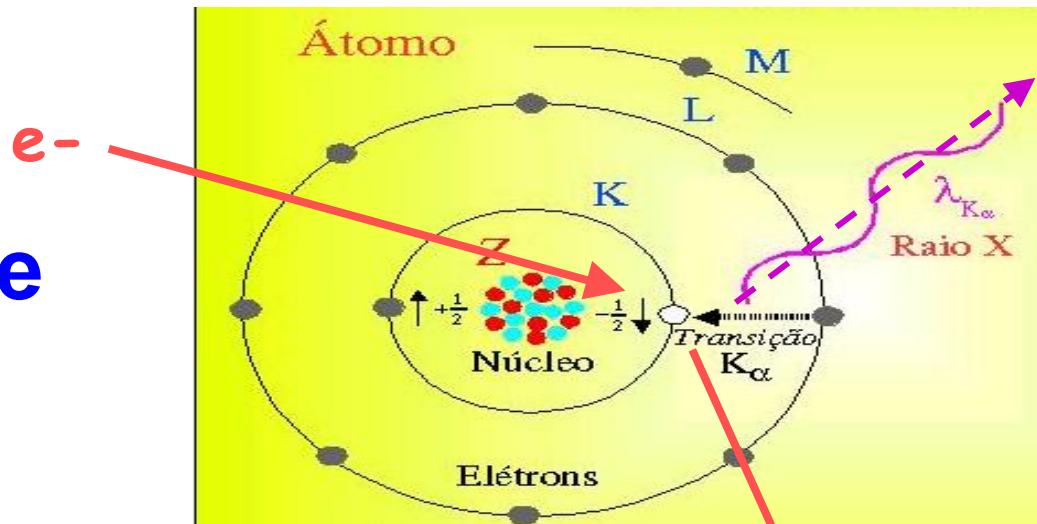


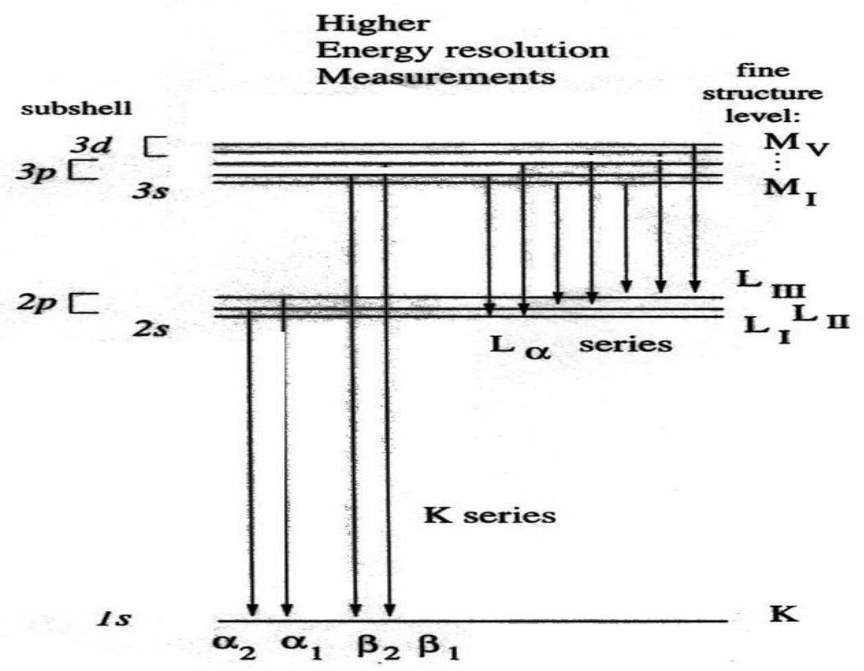
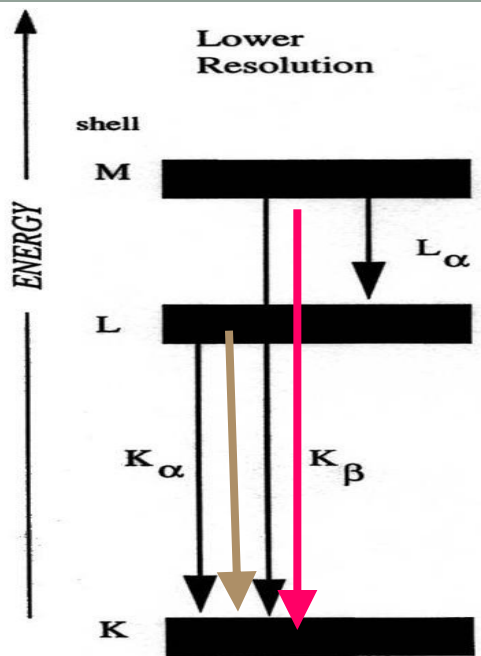
- Essas transições fazem com que os fótons de energia possuam comprimento de onda bem definidos quando emitidos

$$h\nu = E_{ni} - E_{nf}$$

Ionização e De-excitação

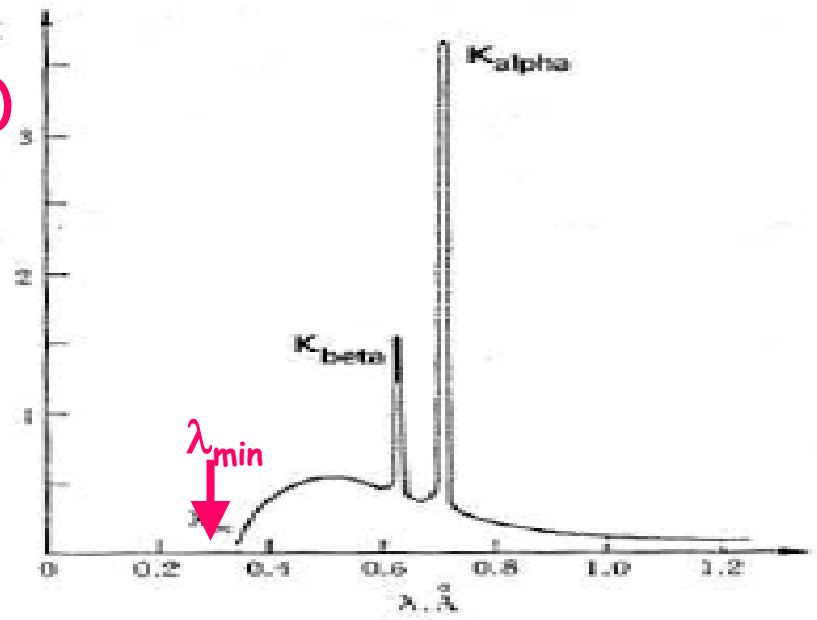
Emissão de Raio-X



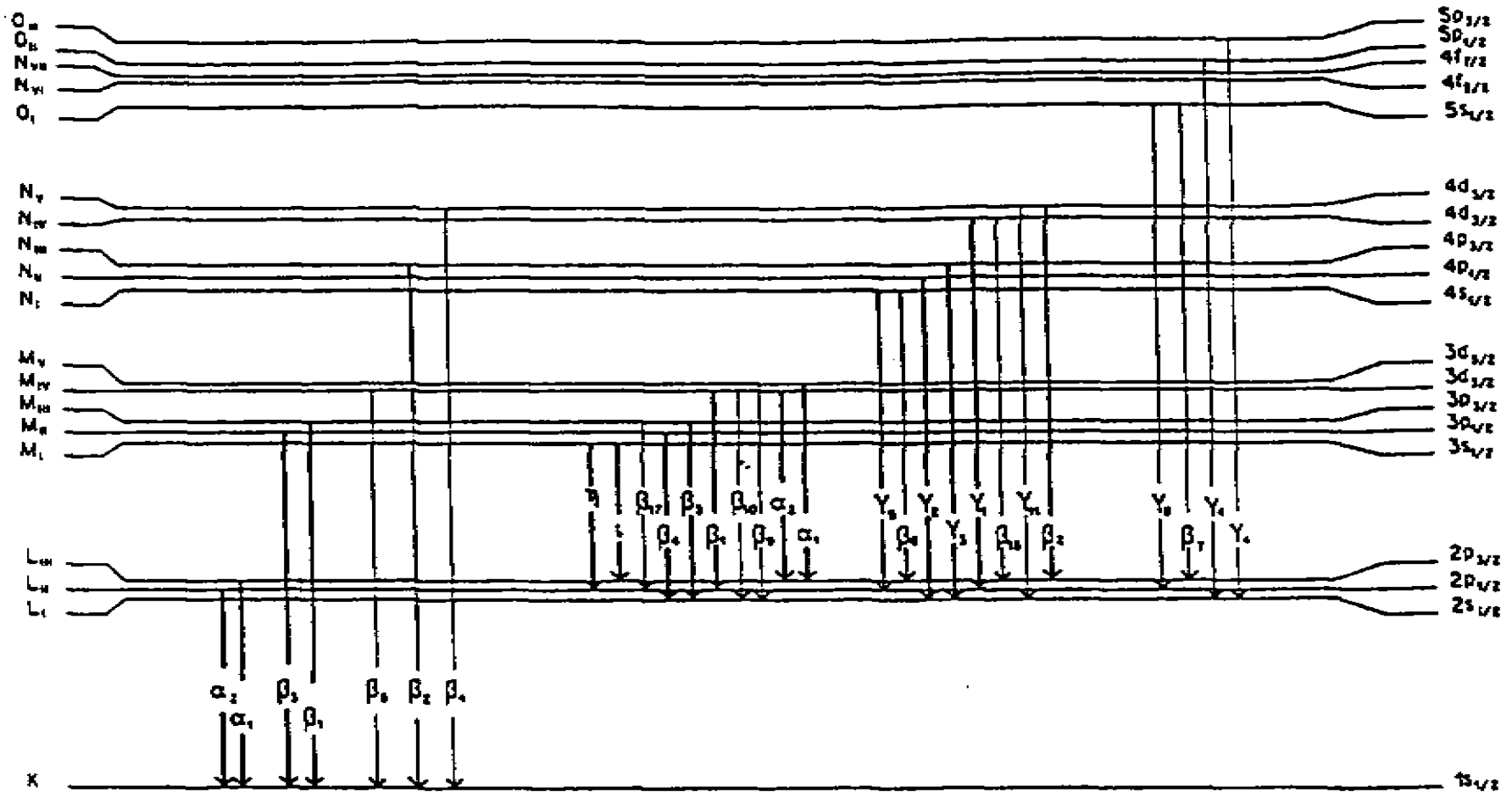


- O fóton de menor comprimento de onda, λ_{min} , seria emitido quando o elétron perdesse o máximo (toda) de sua energia cinética durante a colisão ($K' = 0$).

energia inicial do eletron
 $K = eV = hc/\lambda_{min}$

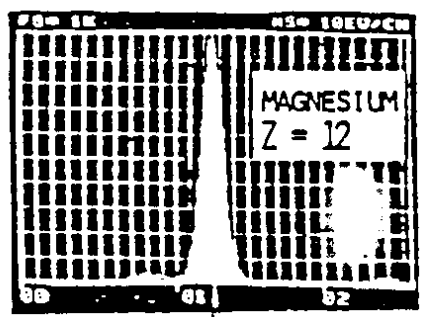


Principais transições de dipolo para raios-X

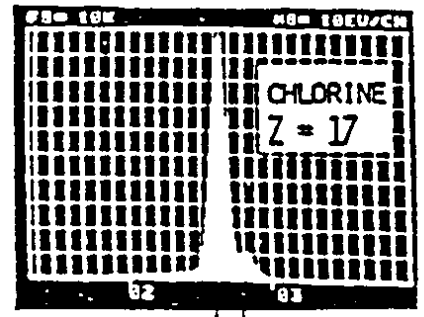


K_α - transições de $L \rightarrow K$
 K_β - transições de $M \rightarrow K$

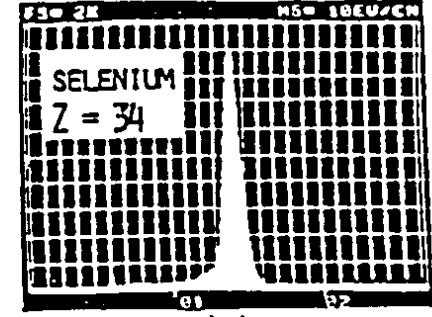
L_α - transições de $M \rightarrow L$
 L_β - transições de $N \rightarrow L$



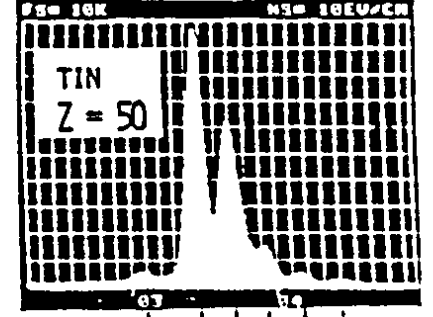
$K\alpha_{1,2}$



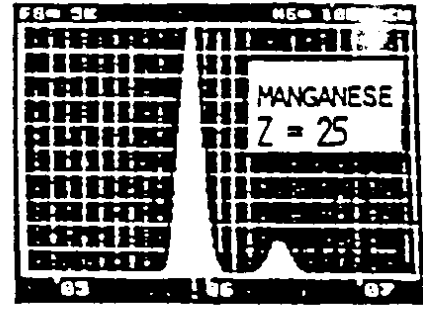
$K\alpha_{1,2}$
 $K\beta$



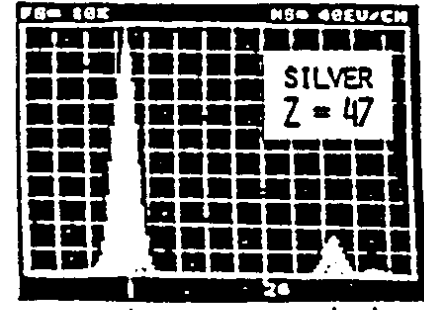
$L\alpha_{1,2}$
 $L\beta$



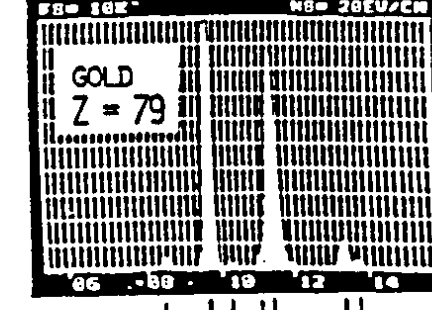
$L\alpha_{1,2}$
 $L\beta_{1,2}$
 $L\gamma_{1,2,3}$



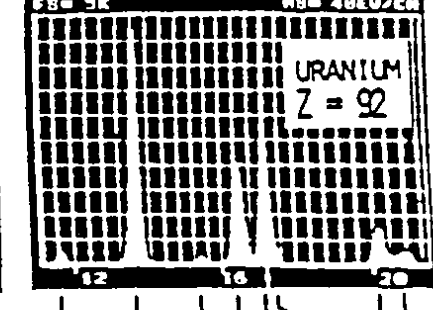
$K\alpha_{1,2}$
 $K\beta$



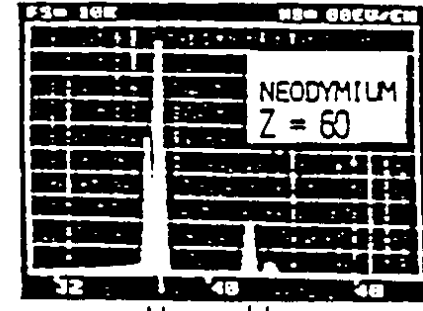
$K\alpha_{1,2}$
 $K\beta_1$
 $K\beta_{2,3}$



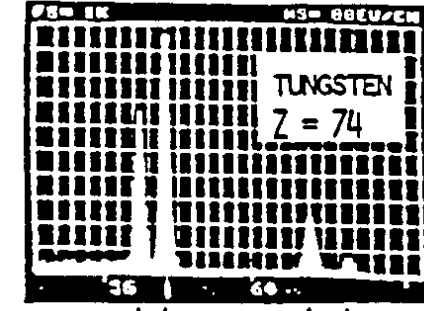
$L\alpha_{1,2}$
 $L\beta_{1,2}$
 $L\gamma_{1,2,3}$



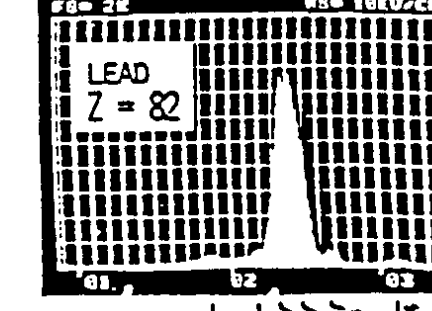
$L\alpha_{1,2}$
 $L\beta_{1,2,3}$
 $L\gamma_{1,2,3}$



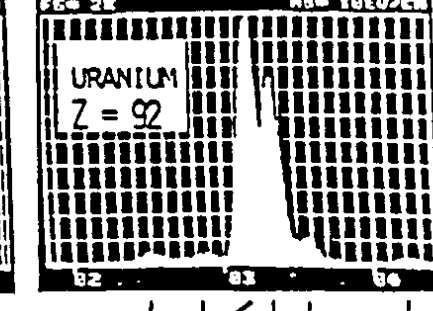
$K\alpha_{1,2}$
 $K\beta_1$
 $K\beta_{2,3}$



$K\alpha_{1,2}$
 $K\beta_1$
 $K\beta_{2,3}$



$M\alpha_1$
 $M\beta_{1,2,3}$
 $M\gamma_{1,2,3}$



$M\alpha_1$
 $M\beta_{1,2,3}$
 $M\gamma_{1,2,3}$

Cálculo das energias das transições - RX

A energia dos fótons envolvidos nestas transições de espectros característicos de raio-X pode ser calculado:

Linha K_α (um e^- da camada L ($n=2$) preenche o buraco da camada K ($n=1$)). O elétron na camada L é parcialmente escondido do núcleo pelos outros elétrons da camada K, assim vê a carga nuclear como $Z-1$ (carga efetiva)

$$h\nu = E_{ni} - E_{nf} \quad n=2 \longrightarrow n=1$$

$$E[K_\alpha] = -\frac{ke^2}{2a_0} \frac{(Z-1)^2}{2^2} + \frac{ke^2}{2a_0} \frac{(Z-1)^2}{1^2} = \frac{ke^2}{2a_0} \frac{3(Z-1)^2}{4}$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad r_n = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

Para o Mo ($Z=42$)

$$E[K_\alpha] = 17.146(\text{keV}) \quad \lambda[K_\alpha] = \frac{hc}{E[K_\alpha]} = \frac{12.4\text{keV}\cdot\text{\AA}}{17.146(\text{keV})} = 0.723\text{\AA}$$

As energias dos raios-X (λ) das linhas variam de elemento para elemento, pois a energias envolvidas dependem das energias de ligações dos e^- nas camadas internas (que aumentam uniformemente como aumento de Z). Uma série de medidas experimentais realizadas em 1913 e 1914 por H.G. J. **Moseley** das transições K_α de diferentes elementos confirmaram a validade da equação acima

Moseley, 1913

Gráfico de Moseley (raiz quadrada do inverso do comprimento de onda em função do Z)

