

Programa de Termos Espectroscópicos (PTE) – Uma Implementação Computacional para Classificação dos Estados Eletrônicos.

Renaldo T. M. Júnior¹(IC)*, Eduardo C. Aguiar¹(IC), Julio C. Santos¹(IC), Maria C. P. Lima¹(IC)

¹ –Grupo PET-Química, Departamento de Química Fundamental - UFPE. Recife (PE). CEP: 50.740-540. Fone: 2126-8440 Ramal: 5014. *renaldotmjr@gmail.com

Palavras Chave: Termos Espectroscópicos, Linguagem C, Implementação.

Introdução

No início dos anos cinquenta, a ênfase da Química Inorgânica se concentrou nos compostos de coordenação dos elementos de transição. O desenvolvimento da fundamentação teórica (quântica), particularmente das teorias do campo ligante e teoria dos orbitais moleculares, motivou estudos em espectroscopia eletrônica aplicada à determinação de estruturas e configurações de níveis de energias¹.

Assim, uma configuração I^N apresenta degenerescência dada pela equação 1², onde 'N' é o número de microestados (ME) para tal configuração.

$$N = \frac{(2s + 1)(2l + 1)!}{n![(2s + 1)(2l + 1) - n]} \quad \text{Equação 1}$$

Introduzindo a repulsão elétron-elétron, os 'N' ME's se desdobram em Termos Espectroscópicos (TE) definidos pela combinação do valor de L (soma dos 'm_l' de cada elétron) e S (soma dos 'm_s' de cada elétron), de cada ME².

Tendo isto em mente, ao encontrar-se todos os 'N' ME's possíveis de uma configuração, pode-se agrupá-los em uma matriz bidimensional referenciando-os pelo seu valor de L e S. Desta matriz extraem-se os TE. Cada um destes tem um número definido de ME, este valor é dado pela equação 2.^{1,2}

$$N_{ME} = (2S + 1)(2L + 1) \quad \text{Equação 2}$$

O software apresentado neste trabalho computa os TE de uma configuração fornecida pelo usuário, calculando o número de ME total da configuração e de cada TE.

A interface, apesar de ser um programa de console, é intuitiva e de fácil manipulação.

Figura 1. Screenshot do PTE.

```

#####
##      PTE - Programa de Termos Espectroscópicos      ##
##  Programa desenvolvido sen fins comerciais para uso  ##
##  educacional.                                       ##
##  Programmers: E. C. Aguiar e R. T. Moura Jr        ##
##  Janeiro de 2006                                    ##
#####
Número de microestados para a configuração d^4: 210
2 1 0 -1 -2 2 1 0 -1 -2
1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 Ms = 4; Ml = 2;
1 1 1 0 1 0 0 0 0 0 Ms = 4; Ml = 1;
1 1 1 0 0 1 0 0 0 0 Ms = 2; Ml = 5;
1 1 1 0 0 0 1 0 0 0 Ms = 2; Ml = 4;
1 1 1 0 0 0 0 1 0 0 Ms = 2; Ml = 3;
1 1 1 0 0 0 0 0 1 0 Ms = 2; Ml = 2;
1 1 1 0 0 0 0 0 0 1 Ms = 2; Ml = 1;
1 1 0 1 1 0 0 0 0 0 Ms = 4; Ml = 0;
1 1 0 1 0 1 0 0 0 0 Ms = 2; Ml = 4;

```

Sendo um software educacional é de distribuição livre dos autores. Estes também optaram por um

código aberto para que melhoramentos possam ser desenvolvidos pelos usuários.

Resultados e Discussão

Para validação do software, foram testadas todas as configurações possíveis com um orbital desde s¹ até a f¹⁴ sendo estes resultados compatíveis com a literatura² para os casos sⁿ, pⁿ e dⁿ.

Do modo como foi escrito, o software leva em consideração o princípio de exclusão de Pauli e não repete os ME. A ordenação energética dos TE encontrados é feita segundo a regra de Hund.

-> Organizando os microestados (em funcao de L e S) na matriz resposta

*** Inprimindo a Matriz Resposta ***

S:	4	7/2	3	5/2	2	3/2	1	1/2	0
L: 14	0	0	0	0	0	0	0	0	0
L: 13	0	0	0	0	0	0	0	0	0
L: 12	0	0	0	0	0	0	0	1	0
L: 11	0	0	0	0	0	0	0	2	0
L: 10	0	0	0	0	0	1	0	5	0
L: 9	0	0	0	0	0	2	0	10	0
L: 8	0	0	0	0	0	5	0	19	0
L: 7	0	0	0	0	0	8	0	28	0
L: 6	0	0	0	1	0	14	0	43	0
L: 5	0	0	0	2	0	20	0	58	0
L: 4	0	0	0	3	0	28	0	76	0
L: 3	0	0	0	4	0	34	0	92	0
L: 2	0	0	0	5	0	41	0	106	0
L: 1	0	0	0	6	0	44	0	114	0
L: 0	0	1	0	7	0	47	0	119	0

Figura 2. Matriz Resposta para o caso do Eu(II) f⁷.

O software é escrito em linguagem C utilizando um conjunto de bibliotecas padrão e um arquivo de cabeçalho (ms_ml.h) desenvolvido pelos autores. O programa pode ser compilado em qualquer sistema operacional que tenha um compilador C. Na plataforma Windows XP o PTE foi compilado com o Dev-C++ 4.9.9.2 e com o gcc 3.4.2 em Linux.

Conclusões

O programa foi validado com para os orbitais sⁿ, pⁿ e dⁿ. Para o caso fⁿ não foram encontrados dados completos na literatura.

Novas implementações estão sendo feitas tais como inclusão do acoplamento spin-órbita e cálculo de TE para estados com mais de um orbital.

Agradecimentos

PET-Química UFPE, MEC/SESu, e aos professores Alfredo Arnóbio S. da Gama e Severino A. Júnior.

¹ da Gama, A. A. S. Notas de Aula. Química Inorgânica 12 - 2003.

² Weissbluth, M. "Atoms and Molecules". 1980, Student Edition, 420 - 427.

³ Schilt, H. "C: Completo e Total". 1997, 3a. edição. 138 - 166.