

# Nova Sistemática para Obtenção de Termos no Acoplamento $jj$

Hugo Orofino Lima<sup>1</sup> (PG), Roberto B. Faria<sup>1</sup> (PQ)\* faria@iq.ufrj.br

<sup>1</sup>Instituto de Química - UFRJ

Palavras Chave: espectroscopia atômica, termos espectrais, acoplamento  $jj$ , acoplamento  $LS$

## Introdução

As transições eletrônicas num átomo são geralmente explicadas segundo o acoplamento  $LS$  entre o momento angular orbital total,  $L$ , e o momento angular de spin total,  $S$ . Entretanto, para átomos mais pesados o acoplamento spin-órbita para cada elétron faz com que somente o número quântico  $j$  seja um bom número quântico. Neste caso, os níveis eletrônicos são indicados segundo o acoplamento entre os momentos angulares totais,  $j$ , de cada elétron, chamado de acoplamento  $jj$ .

Termos espectrais para o acoplamento  $LS$  são apresentados em muitos livros, mas não para o acoplamento  $jj$ . A razão é que este se aplica a átomos mais pesados e também pela inexistência de uma notação universal e de uma forma sistemática para obter os termos válidos.

Neste trabalho, apresentamos um procedimento inédito para determinar os termos espectrais no acoplamento  $jj$ , baseado no procedimento proposto por Orchin e Jaffé para o acoplamento  $LS$ <sup>1</sup>.

## Resultados e Discussão

No acoplamento  $jj$ , os números quânticos válidos são  $n$ ,  $l$ ,  $j$  e  $m_j$ , sendo que  $-j < m_j < j$ . Como dois elétrons não podem ter os quatro números quânticos iguais, temos dois casos. Se dois elétrons possuem o mesmo  $j$ , então, na construção dos microestados, eles não podem ter o mesmo  $m_j$ . Se os valores de  $j$  forem diferentes, podemos ter microestados onde dois elétrons pode ter  $m_j$  iguais. Como exemplo, tomemos a configuração  $p^2$  onde  $l_1 = l_2 = 1$  e  $s_1 = s_2 = 1/2$  e os valores possíveis de  $j$  de cada elétron são  $l + s = 3/2$  e  $l - s = 1/2$ . Seguindo a notação de Haigh<sup>2</sup>,  $(j_1, j_2)_J$ , temos os termos  $(3/2, 3/2)_J$ ,  $(3/2, 1/2)_J$  e  $(1/2, 1/2)_J$ , onde  $J$  é o momento angular total.

Indicando cada elétron por um "x" montamos a tabela de microestados colocando cada elétron num "orbital"  $m_j$ . Para o termo  $(3/2, 1/2)_J$ , como os  $j$  são diferentes, é conveniente separar os elétrons (Tabela 1). Colecionando os valores de  $M_J$  na Tabela 2, temos  $M_J$  de  $-2$  a  $2$ , indicando  $J = 2$ . Tirando um microestado de cada linha ficamos com de  $M_J$  de  $-1$  a  $1$ , indicando  $J = 1$ , resultando no termo  $(3/2, 1/2)_{2,1}$ . Para o termo  $(3/2, 3/2)$ , com  $j$  iguais, os  $m_j$  têm que ser diferentes, permitindo colocar os elétrons num mesmo segmento da tabela, mas em "orbitais"  $m_j$  diferentes (Tabela 3). Com  $M_J$  de  $-2$  a  $2$ , temos  $J = 2$ . Como há duas ocorrências de  $M_J = 0$ , temos

também  $J = 0$ , levando ao termo  $(3/2, 3/2)_{2,0}$ . Usando esta sistemática para o termo  $(1/2, 1/2)_J$  obtemos um único microestado com  $J = 0$  e o termo  $(1/2, 1/2)_0$ .

Tabela 1. Microestados para o termo  $(3/2, 1/2)_J$ .

elétron 1, $j = 3/2$ $m_j$				elétron 2, $j = 1/2$ $m_j$		$M_J = \Sigma m_j$
$-3/2$	$-1/2$	$1/2$	$3/2$	$-1/2$	$1/2$	
x				x		$-2$
x					x	$-1$
	x			x		$-1$
	x				x	$0$
		x		x		$0$
		x			x	$1$
			x	x		$1$
			x		x	$2$

Tabela 2. Microestados do termo  $(3/2, 1/2)_J$ .

$M_J$	Número de microestados	
$M_J = 2$	1	
$M_J = 1$	2	1
$M_J = 0$	2	1
$M_J = -1$	2	1
$M_J = -2$	1	

Tabela 3. Microestados para o termo  $(3/2, 3/2)_J$ .

elétrons 1 e 2, $j = 3/2$ $m_j$				$M_J = \Sigma m_j$
$-3/2$	$-1/2$	$1/2$	$3/2$	
x	x			$-2$
x		x		$-1$
x			x	$0$
	x	x		$0$
	x		x	$1$
		x	x	$2$

## Conclusões

A metodologia apresentada para a configuração  $p^2$ , no acoplamento  $jj$ , é simples e pode facilmente ser estendida a outras configurações eletrônicas.

## Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPERJ.

<sup>1</sup> Orchin, M.; Jaffé, H. H. "Symmetry, Orbitals, and Spectra (S.O.S.)" Wiley-Interscience: Nova York, 1971.

<sup>2</sup> Haigh, C.W., *J. Chem. Educ.* 1995, 72, 206-210.