

Física Atómica e Molecular

FOLHA 6: ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS:
ACOPLAMENTOS L-S E $j - j$; TERMOS ATÓMICOS;
EFEITO DE ZEEMAN; TRANSIÇÕES ENTRE ESTADOS ATÓMICOS

1. O estado fundamental do lítio tem a configuração $1s^2 2s^1$. Determine o termo atómico correspondente ao estado fundamental na notação de Russel-Saunders.
2. O átomo de carbono tem seis electrões. Qual é a configuração orbital do estado fundamental? Quais os termos atómicos correspondentes a essa configuração? Ordene-os por ordem crescente de energia.
3. Calcule os termos atómicos que surgem das seguintes configurações:
 - (a) Be: $1s^2 2s^2$.
 - (b) Be: $1s^2 2s^1 2p^1$.
 - (c) O: $1s^2 2s^2 2p^4$.
 - (d) Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$.
 - (e) Co: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$.

e, a partir das regras de Hund, determine, em cada um dos casos, o termo atómico correspondente ao estado de energia mais baixa.

4. Calcule os termos que surgem da configuração electrónica [...] $3d^1 4d^1$ e diga qual é o estado mais estável.
5. Determine os estados atómicos correspondentes à configuração electrónica $ns^1 md^1$ admitindo
 - (a) um acoplamento do tipo L-S.
 - (b) um acoplamento $j - j$.
6. Considere um átomo com dois electrões opticamente activos e com acoplamento do tipo $j - j$.
 - (a) Escreva a expressão do momento magnético total do átomo μ em função dos momentos angulares \mathbf{j}_1 e \mathbf{j}_2 de cada electrão. Defina para esse efeito os factores g_j associados a cada electrão e escreva, justificando, a expressão de g_{j_1} e g_{j_2} em função dos números quânticos ℓ_1, j_1 e ℓ_2, j_2 , respectivamente.
 - (b) Determine a componente do momento magnético do átomo na direcção do momento angular total \mathbf{J} . Mostre que o factor g_J é dado por

$$g_J = \frac{1}{2} (g_{j_1} - g_{j_2}) \left[\frac{j_1(j_1 + 1) - j_2(j_2 + 1)}{J(J + 1)} \right] + \frac{1}{2} (g_{j_1} + g_{j_2}). \quad (1)$$

Note que, no caso de os números quânticos j_1 e j_2 serem iguais, o factor g_J é a média de g_{j_1} e g_{j_2} .

- (c) Os átomos de chumbo são um exemplo de acoplamento $j - j$. Suponha que os átomos de chumbo estão na configuração do 1º estado excitado $6p^1 7s^1$.
 - i. Determine os estados atómicos do chumbo na configuração referida.
 - ii. Suponha que os átomos de chumbo estão no estado $\left(p_{\frac{1}{2}} s_{\frac{1}{2}} \right)_0$. Se pretender medir o momento magnético desses átomos através da aplicação de um campo magnético externo considerado fraco, qual espera que seja o resultado da medida?
 - iii. Se os átomos de chumbo estiverem no estado $\left(p_{\frac{1}{2}} s_{\frac{1}{2}} \right)_1$, diga qual a variação da energia desse estado quando os átomos de chumbo estão sob a acção de um campo magnético externo, considerado fraco.

7. Considere os seguintes termos atômicos 1S , 3S , 1P e 3P . Determine os valores do número quântico J para cada um dos termos e ordene-os por ordem crescente de energias.
8. Faça o estudo do acoplamento $j-j$ para dois electrões cujos números quânticos l são, respectivamente, $l = 0$ e $l = 1$.
9. Escreva os números quânticos para os estados descritos em termos da notação espectroscópica como $^2S_{3/2}$, 3D_2 e 5P_3 . Indique justificando se algum destes estados é impossível.
10. Um átomo de níquel (Ni), $[Ar]3d^8 4s^2$, tem os seguintes termos atômicos no estado fundamental

$$^1S_0, ^3P_0, ^3P_1, ^3P_2, ^1D_2, ^3F_2, ^3F_3, ^3F_4, ^1G_4.$$

- (a) Ordene-os de acordo com as regras de Hund.
 - (b) Diga, justificando, em quais dos estados os átomos possuem momento magnético nulo.
 - (c) Suponha que estes átomos, no estado de energia mais baixa, são sujeitos a uma experiência de Stern-Gerlach. Descreva os resultados observados.
11. Medidas realizadas com linhas espectrais de átomos de carbono neutro mostram que um certo termo excitado consiste de três níveis de estrutura fina com energias (medidas em relação ao estado fundamental) de 60 333, 60 353 e 60 393 cm^{-1} . Determine os valores de L, S e J para estes níveis de estrutura fina.
 12. Num átomo que obedece ao acoplamento L-S, as separações entre níveis adjacentes de energia crescente de um multipletto particular com cinco níveis estão na razão 1:2:3:4. Associe números quânticos L, S, J a esses níveis. Justifique.
 13. Um determinado sistema atômico está num estado representado pelo tripleto 3D . A diferença de energia entre os dois termos desse tripleto com menor valor de número quântico J é de $5,3 \times 10^{-5} \text{eV}$.
 - (a) Determine a energia da interacção spin orbital para cada um dos termos do tripleto.
 - (b) Estime o valor mínimo de campo magnético necessário para que haja sobreposição entre um subnível proveniente do estado do tripleto com menor J e um subnível proveniente do estado adjacente. *Nota: Considere que nessas condições a suposição de que o campo exterior é baixo é ainda uma aproximação aceitável.*
 14. A risca vermelha do cádmio ($Z=48$) que ocorre a 6438 Å, resulta da transição entre os estados 6^1D_2 e 5^1P_1 . Quantas riscas correspondentes a esta transição aparecem no espectro de emissão quando os átomos de cádmio estiverem sujeitos a um campo magnético fraco, de 5kGauss?
 15. Considere átomos de sódio ^{11}Na sob a acção de um campo magnético externo.
 - (a) Faça o estudo do efeito de Zeeman para as linhas "D" do sódio que são emitidas por transições de níveis atômicos da configuração 3p (estados 2P) para o estado fundamental (estados 2S).
 - (b) Os comprimentos de onda do dubleto de sódio que corresponde às transições $^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ e $^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ são, respectivamente, 5895,3Å e 5889,9Å. Determine os comprimentos de onda das riscas correspondentes àquele dubleto quando é aplicado um campo magnético, considerado fraco, de 0,1T.
 - (c) Faça o estudo do efeito de Paschen-Back para as mesmas linhas "D".
 16. Considere o espectro do titânio colocado num campo magnético fraco de intensidade 0.3 tesla.
 - (a) Represente esquematicamente a decomposição dos níveis 3D_2 , 3P_1 e 3P_0 na presença do referido campo, indicando, em unidades de μ_B , qual a energia de interacção com o campo para cada nível;
 - (b) indique, justificando, quais as transições que são permitidas dos níveis 3P_0 e 3P_1 para 3D_2 ;
 - (c) determine os termos atômicos que surgem da configuração electrónica do titânio $[Ar]3d^1 4s^2 4p^1$, considerando um acoplamento $j-j$.

17. Considere a transição do estado singlete 1P_1 para o estado singlete 1D_2 nos átomos de carbono. Seja ν_0 a frequência dessa transição, na ausência de campos magnéticos externos. Suponha agora que os átomos de carbono são sujeitos a um campo magnético externo fraco, H .
- Explique qual o efeito deste campo nos níveis de energia correspondentes aos estados singletos atrás referidos e indique justificando quais as transições observadas.
 - Quantas "riscas" são observadas no espectro? Relacione a frequência correspondente a estas "riscas" com a frequência ν_0 .
18. Considere a transição do estado excitado 3S_1 para o estado 3P_2 em átomos de mercúrio e seja ν a frequência da radiação emitida, na ausência de campos magnéticos externos.
- Explique qual o efeito de um campo magnético forte, B , nos referidos estados atômicos, indique justificando quais as transições observadas e relacione a frequência ν' da luz emitida com a frequência ν .
19. Determine o termo atômico correspondente ao estado fundamental do escândio ($Z=21$). Considere que os átomos de Sc, na configuração $[Ar]4s^24p^1$, estão sob a influência de um campo magnético fraco. Quais as transições possíveis entre esta configuração e o estado fundamental?
20. Os iões de praseodímio Pr^{3+} têm dois electrões na camada $4f$.
- Use as regras de Hund para calcular os valores de L , S e J para o estado de energia mais baixa do ião e o factor g de Landé correspondente.
 - Suponha que se aplica a um sal de praseodímio um campo magnético \mathbf{B} , suficientemente fraco para não quebrar o acoplamento spin-orbital.
- A probabilidade de um ião ter um valor particular de M_J à temperatura absoluta T é dada por uma distribuição de Boltzmann

$$p = e^{-\frac{E_{M_J}}{k_B T}} / \sum_{M_J} e^{-\frac{E_{M_J}}{k_B T}},$$

onde E_{M_J} é a energia de interacção entre o campo magnético aplicado e o momento dipolar magnético do ião.

Determine o valor médio da componente do momento magnético do ião na direcção do campo aplicado. Faça $B=1\text{T}$ e $T=300\text{K}$.