



# Termos Espectroscópicos Acoplamento $jj$



Roberto B. Faria

faria@iq.ufrj.br

www.iq.ufrj.br/~faria

*Instituto de Química*

*Universidade Federal do Rio de Janeiro*



## Acoplamento $jj$

18/09/2024

# Acoplamento *jj*

---

# Termos espectroscópicos $jj$ para o chumbo



## NIST Atomic Spectra Database Levels Data

Pb I 136 Levels Found

Z = 82, Pb isoelectronic sequence

### Example of how to reference these results:

Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team (2021). *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.9), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2022, June 1]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>

[BibTex Citation](#) (new window)

Some data for neutral and singly-charged ions are available in the [Handbook of Basic Atomic Spectroscopic Data](#)

Primary data source

Query NIST  
Bibliographic  
Database for Pb I  
(new window)

[Literature on Pb I Energy Levels](#)

[Wood & Andrew 1968](#), [Moore 1958](#), Newer data on some energy levels exists in the literature. Consult the current bibliography for up-to-date information. Alternate LS-coupling designations for some of the levels are from Moore 1958. Some energy levels that were not observed by Wood & Andrew are quoted from Moore 1958. Their  $J_1$ -coupling designations are tentatively assigned based on similarities along series. The ionization limit is from [Dembczyński et al. 1994](#).

# Termos espectroscópicos *jj* para o chumbo

Configuration	Term	<i>J</i>	<i>g</i>	Level (cm <sup>-1</sup> )
6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	( <sup>1</sup> / <sub>2</sub> , <sup>1</sup> / <sub>2</sub> )	0	1	0.000
6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	( <sup>3</sup> / <sub>2</sub> , <sup>1</sup> / <sub>2</sub> )	1	3	7 819.2626
		2	5	10 650.3271
6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	( <sup>3</sup> / <sub>2</sub> , <sup>3</sup> / <sub>2</sub> )	2	5	21 457.7982
		0	1	29 466.8303
6s <sup>2</sup> 6p7s	( <sup>1</sup> / <sub>2</sub> , <sup>1</sup> / <sub>2</sub> ) <sup>o</sup>	0	1	34 959.9084
		1	3	35 287.2244
6s <sup>2</sup> 6p7p	( <sup>1</sup> / <sub>2</sub> , <sup>1</sup> / <sub>2</sub> )	1	3	42 918.6434
		0	1	44 400.8898
6s <sup>2</sup> 6p7p	( <sup>1</sup> / <sub>2</sub> , <sup>3</sup> / <sub>2</sub> )	1	3	44 674.9859
		2	5	44 809.3636

# Termos espectroscópicos $jj$ para o chumbo

Configuration	Term	$J$	$g$	Level ( $\text{cm}^{-1}$ )
$6s^2 6p^2$	$(1/2, 1/2)$	0	1	0.000
$6s^2 6p^2$	$(3/2, 1/2)$	1	3	7 819.2626
		2	5	10 650.3271
$6s^2 6p^2$	$(3/2, 3/2)$	2	5	21 457.7982
		0	1	29 466.8303
$6s^2 6p 7s$	$(1/2, 1/2)^\circ$	0	1	34 959.9084

# Acoplamento $jj$

---

- No caso do **acoplamento  $jj$** , o acoplamento spin-órbita é mais forte do que as interações eletrostáticas (interações de Coulomb) entre os elétrons.
- O acoplamento  $jj$  é mais apropriado para os elementos mais pesados.

# Acoplamento $jj$

---

O acoplamento  $jj$  baseia-se no

- momento angular total dos elétrons
- momento angular total do átomo

# Acoplamento $jj$

---

## Números quânticos

- momento angular total de cada elétron,  $j$
- momento angular total do átomo,  $J$

## Acoplamento $jj$

---

$$(j_1, j_2, j_3, \dots)_J$$

- $j_1, j_2, j_3, \dots$  são os números quânticos momento angular total de cada elétron.
- $J$  é o número quântico momento angular total do átomo.

# Acoplamento $jj$

---

$$(j_1, j_2, j_3, \dots)_J$$

- Para os átomos pesados,  $\ell$  e  $s$  não são mais bons números quânticos.
- Devemos considerar apenas os números quânticos  $j$ .

# Acoplamento $jj$

---

$$(j_1, j_2, j_3, \dots)_J$$

➤ Isto equivale a dizer que, para os átomos mais pesados, não existem mais os orbitais s, p, d, f, etc.!

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Obtendo os termos  $jj$  para um átomo

1. Cálculo dos possíveis valores de  $j$  para cada elétron
2. Determinação das possíveis combinações de valores de  $j$  dentro dos parêntesis
3. Construção dos microestados, colocando-se os elétrons nos “orbitais  $m_j$ ”
4. Cálculo de todos os possíveis valores de  $M_J$  pelo somatório  $\Sigma m_j$
5. Construção da Tabela de Contabilidade
6. Extração dos termos espectroscópicos a partir da Tabela de Contabilidade

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Calculando os possíveis valores de  $j$   
para cada elétron

- Os elétrons estão em um orbital  $p \Rightarrow \ell = 1$
  - Número quântico de spin de qualquer elétron é sempre,  $s = 1/2$
  - $j = \ell + s, \ell + s - 1, \ell + s - 2, \dots, |\ell - s|$
- $\Rightarrow$  O valor de  $j$  para cada elétron pode ser  $3/2$  ou  $1/2$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2)_J$$

$$(3/2, 1/2)_J$$

$$(1/2, 1/2)_J$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Princípio de Exclusão de Pauli

Se  $j_1 = j_2$

então,  $m_{j_1} \neq m_{j_2}$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2)_J$$

$$(3/2, 1/2)_J$$

$$(1/2, 1/2)_J$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

Construindo os microestados para o termo  $(3/2, 1/2)_J$

elétron 1 ( $j = 3/2$ )				elétron 2 ( $j = 1/2$ )		
$m_j = -3/2$	$m_j = -1/2$	$m_j = 1/2$	$m_j = 3/2$	$m_j = -1/2$	$m_j = 1/2$	$M_J = \sum m_j$
#				#		-2
#					#	-1
	#			#		-1
	#				#	0
		#		#		0
		#			#	1
			#	#		1
			#		#	2

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

## Tabela de Contabilidade

Contando os microestados e obtendo os valores de  $J$

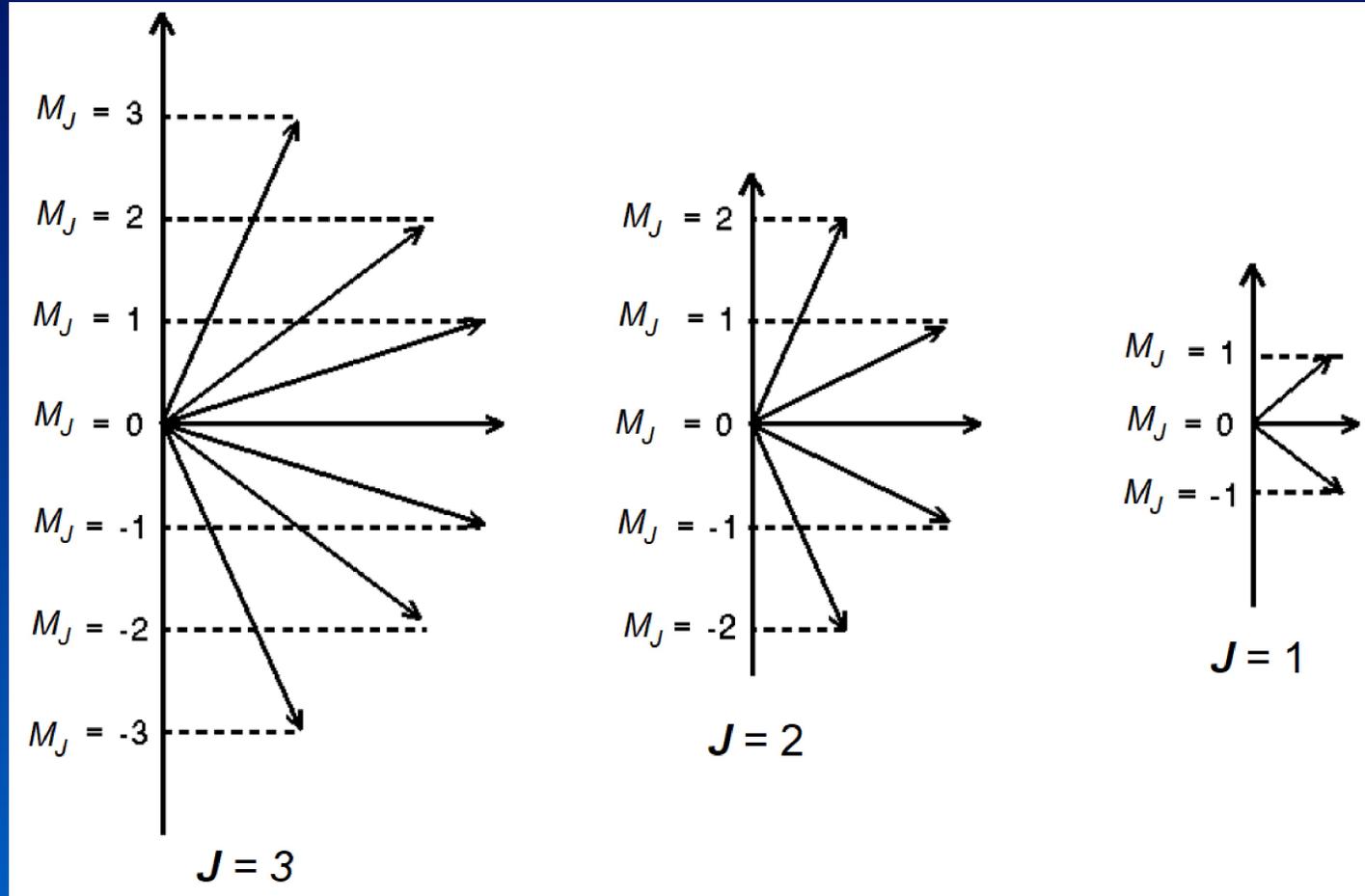
	número de microestados	número de microestados após retirar o termo $(3/2, 1/2)_2$
$M_J = 2$	1	
$M_J = 1$	2	1
$M_J = 0$	2	1
$M_J = -1$	2	1
$M_J = -2$	1	

$$J = 2$$

$$J = 1$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

## Modelo vetorial do átomo



# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2)_J$$

$$(3/2, 1/2)_{2,1}$$

$$(1/2, 1/2)_J$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2)_J$$

$$(3/2, 1/2)_{2,1}$$

$$(1/2, 1/2)_J$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Princípio de Exclusão de Pauli

Se  $j_1 = j_2$

então,  $m_{j_1} \neq m_{j_2}$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

Construindo os microestados para o termo  $(3/2, 3/2)_J$

electron 1 ( $j = 3/2$ )				electron 2 ( $j = 3/2$ )				$M_J = \sum m_j$
$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	
-3/2	-1/2	1/2	3/2	-3/2	-1/2	1/2	3/2	
#					#			-2
#						#		-1
#							#	0
	#					#		0
	#						#	1
		#					#	2

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

## Tabela de Contabilidade

Contando os microestados e obtendo os valores de  $J$

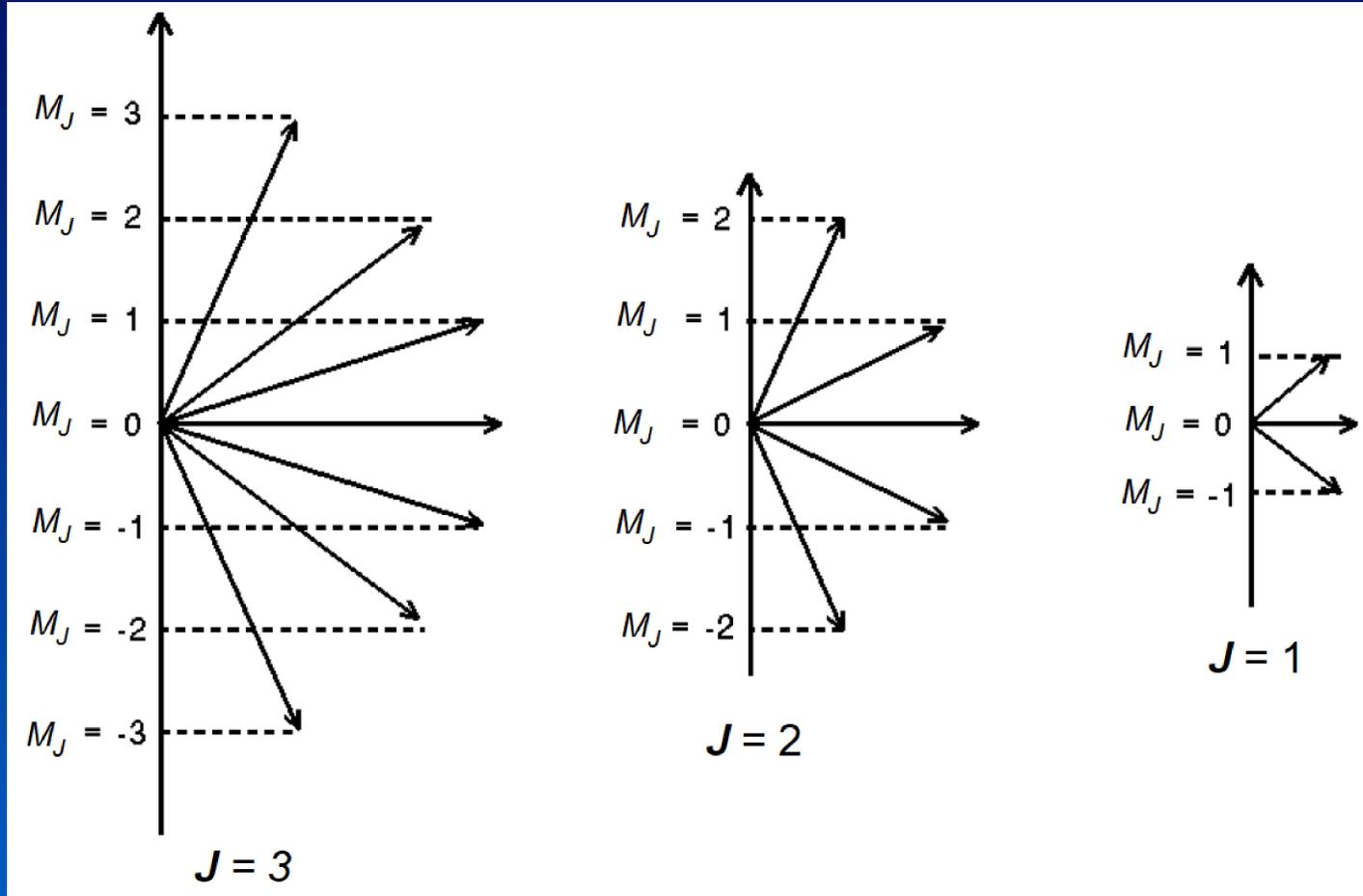
	número de microestados	número de microestados após retirar o termo $(3/2,3/2)_2$
$M_J = 2$	1	
$M_J = 1$	1	
$M_J = 0$	2	1
$M_J = -1$	1	
$M_J = -2$	1	

$$J = 2$$

$$J = 0$$

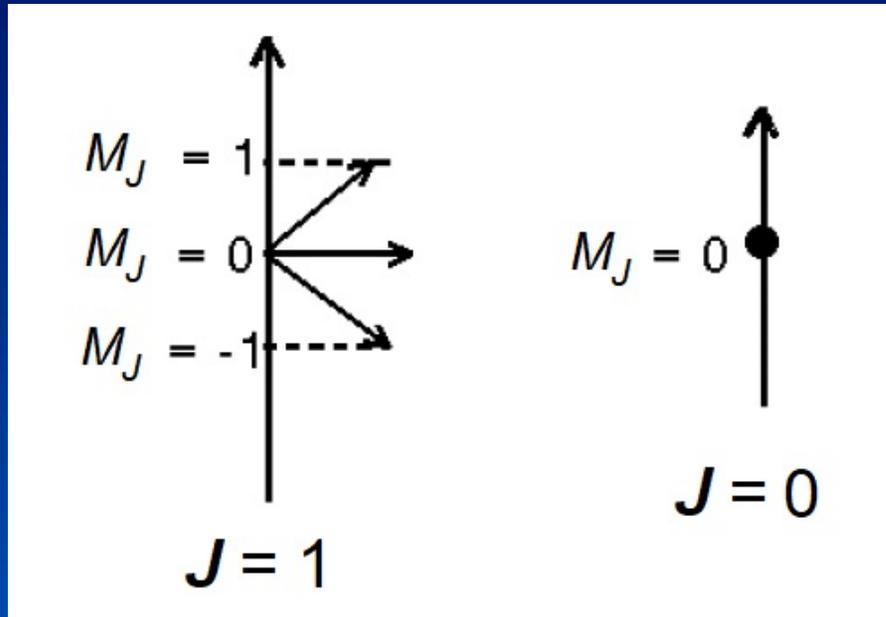
# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

## Modelo vetorial do átomo



# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

Modelo vetorial do átomo



# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2)_{2,0}$$

$$(3/2, 1/2)_{2,1}$$

$$(1/2, 1/2)_J$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2)_{2,0}$$

$$(3/2, 1/2)_{2,1}$$

$$(1/2, 1/2)_J$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

## Princípio de Exclusão de Pauli

$$\text{Se } j_1 = j_2$$

$$\text{então, } m_{j_1} \neq m_{j_2}$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

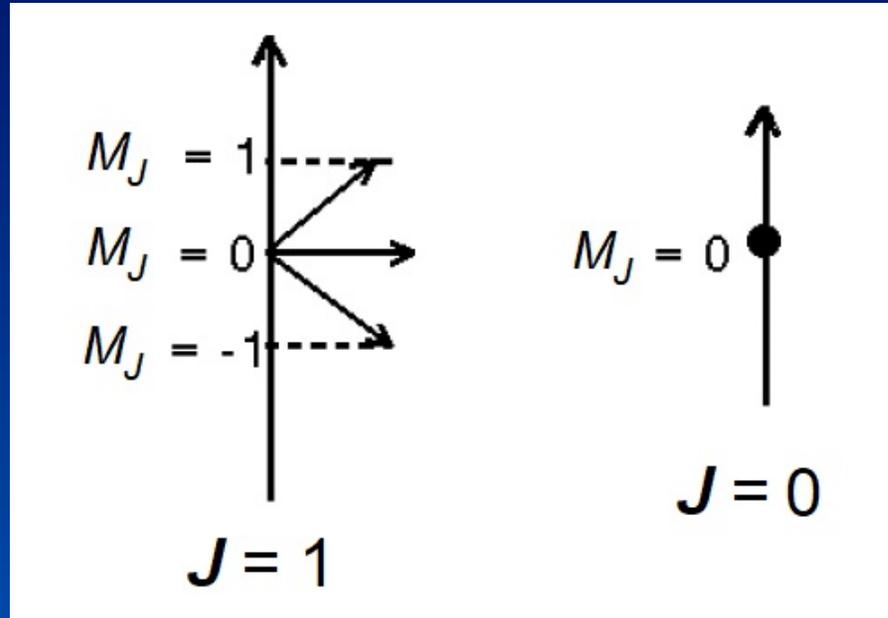
Construindo os microestados para o termo  $(1/2, 1/2)_J$

elétron 1 ( $j = 1/2$ )		elétron 2 ( $j = 1/2$ )		
$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$M_J = \sum m_j$
-1/2	1/2	-1/2	1/2	
#			#	0

$$J = 0$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

Modelo vetorial do átomo



# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2)_{2,0}$$

$$(3/2, 1/2)_{2,1}$$

$$(1/2, 1/2)_0$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

Termos espectroscópicos finais

$$(3/2, 3/2)_{2,0}$$

$$(3/2, 1/2)_{2,1}$$

$$(1/2, 1/2)_0$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

---

## Regras de Hund

- As regras de Hund são regras empíricas que são válidas somente para indicar o termo de menor energia do estado fundamental.
- As regras de Hund são aplicadas somente uma vez para determinar o termo de menor energia do estado fundamental, e não podem ser aplicadas novamente para os termos de energia maior.

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^2$

## Regras de Hund

1) O termo com o menor conjunto de valores de  $j$  dentro dos parêntesis é o termo de menor energia.

2) Se o termo tiver mais de um valor de  $J$ , termo com o maior valor de  $J$  será o termo de menor energia.

- Assim, o termo de menor energia é  $(1/2, 1/2)_0$

- A sequência de energia dos outros termos não pode ser obtida pelas Regras de Hund.

# Termos $jj$ para o chumbo

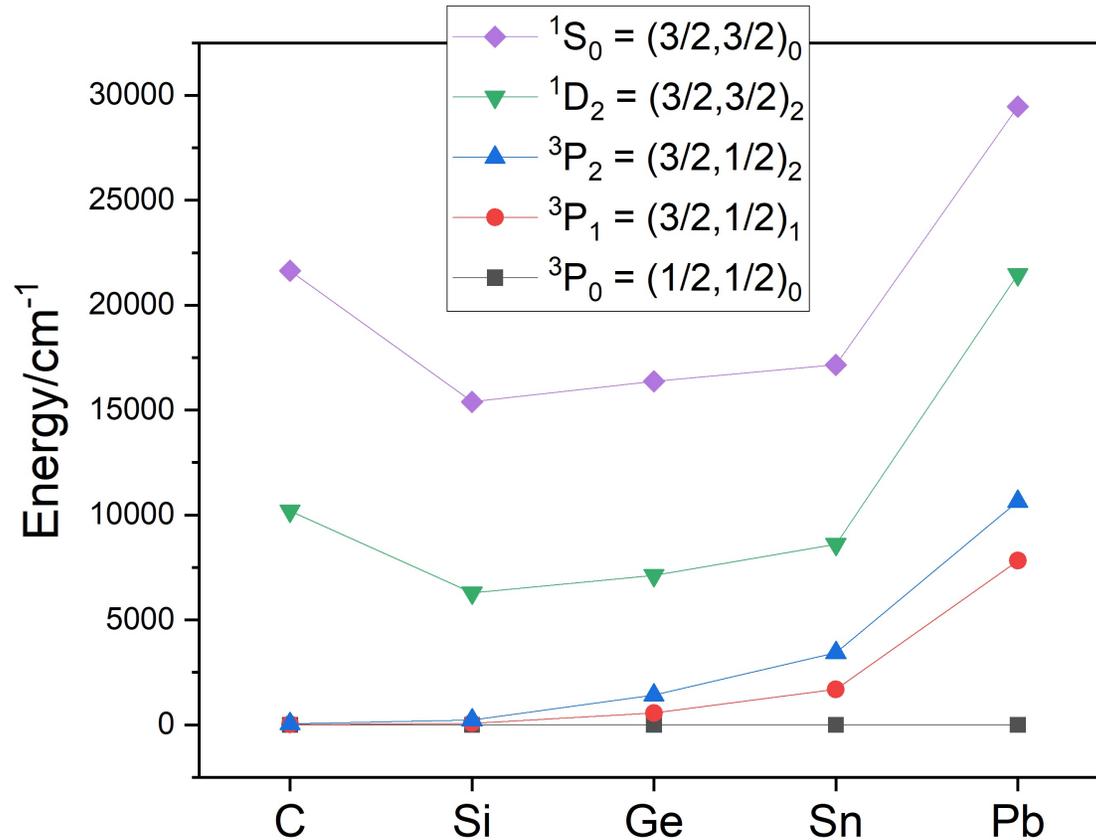
Configuration	Term	$J$	$g$	Level ( $\text{cm}^{-1}$ )
$6s^26p^2$	$(1/2, 1/2)$	0	1	0.000
$6s^26p^2$	$(3/2, 1/2)$	1	3	7 819.2626
		2	5	10 650.3271
$6s^26p^2$	$(3/2, 3/2)$	2	5	21 457.7982
		0	1	29 466.8303
$6s^26p7s$	$(1/2, 1/2)^\circ$	0	1	34 959.9084
		1	3	35 287.2244

$(3/2, 3/2)_{2,0}$

$(3/2, 1/2)_{2,1}$

$(1/2, 1/2)_0$

# Comparação $LS$ e $jj$ ( $p^2$ )



# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Calculando os possíveis valores de  $j$   
para cada elétron

- Os elétrons estão em um orbital  $p \Rightarrow \ell = 1$
  - Número quântico de spin de qualquer elétron é sempre,  $s = 1/2$
  - $j = \ell + s, \ell + s - 1, \ell + s - 2, \dots, |\ell - s|$
- $\Rightarrow$  O valor de  $j$  para cada elétron pode ser  $3/2$  ou  $1/2$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_J^\circ$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_J^\circ$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_J^\circ$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^\circ$$

O símbolo de paridade indica que a soma de todos os valores de  $\ell$  é um número ímpar.

$$(p + p + p; 1 + 1 + 1 = 3)$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_J^\circ$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_J^\circ$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_J^\circ$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^\circ$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_J^\circ$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_J^\circ$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_J^\circ$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^\circ$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Pauli exclusion principle

$$\text{Se } j_1 = j_2$$

$$\text{então, } m_{j1} \neq m_{j2}$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

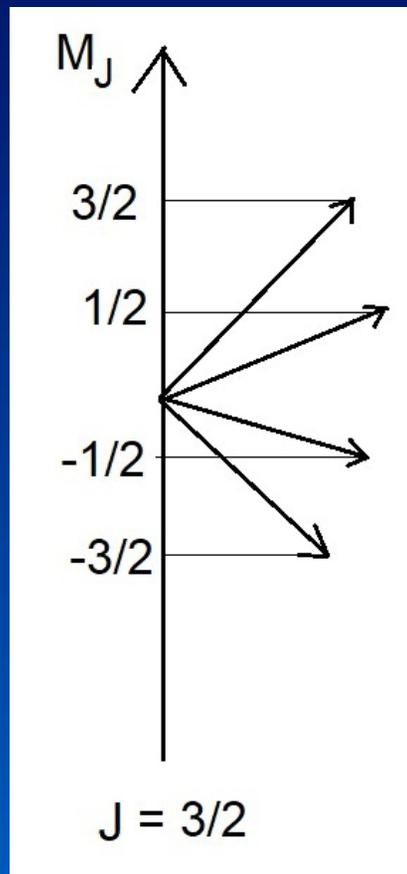
Construindo os microestados para o termo  $(3/2, 3/2, 3/2)_J^{\circ}$

elétrons 1, 2 e 3 ( $j_1 = j_2 = j_3 = 3/2$ )				
$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$M_J = \sum m_j$
-3/2	-1/2	1/2	3/2	
#	#	#		-3/2
#	#		#	-1/2
#		#	#	1/2
	#	#	#	3/2

$$J = 3/2$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

Modelo vetorial do átomo



# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_J^{\circ}$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_J^{\circ}$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

elétrons 1 e 2 ( $j_1 = j_2 = 3/2$ )				elétron 3 ( $j = 1/2$ )		$M_J = \sum m_j$
$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	
-3/2	-1/2	1/2	3/2	-1/2	1/2	
#	#			#		-5/2
#	#				#	-3/2
#		#		#		-3/2
#		#			#	-1/2
#			#	#		-1/2
#			#		#	1/2
	#	#		#		-1/2
	#	#			#	1/2
	#		#	#		1/2
	#		#		#	3/2
		#	#	#		3/2
		#	#		#	5/2

Construindo os microestados para o termo  $(3/2, 3/2, 1/2)_J^{\circ}$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

## Tabela de Contabilidade

Contando os microestados e obtendo os valores de  $J$

	número de microestados	número de microestados após retirar o termo $(3/2, 3/2, 1/2)_{5/2}$	número de microestados após retirar o termo $(3/2, 3/2, 1/2)_{3/2}$
$M_J = 5/2$	1		
$M_J = 3/2$	2	1	
$M_J = 1/2$	3	2	1
$M_J = -1/2$	3	2	1
$M_J = -3/2$	2	1	
$M_J = -5/2$	1		

$$J = 5/2$$

$$J = 3/2$$

$$J = 1/2$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_{5/2,3/2,1/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_{5/2,3/2,1/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

Construindo os microestados para o termo  $(3/2, 1/2, 1/2)_J^\circ$

elétron 1 ( $j_1 = 3/2$ )				elétrons 2 e 3 ( $j_2 = j_3 = 1/2$ )		
$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$M_J = \sum m_j$
-3/2	-1/2	1/2	3/2	-1/2	1/2	
#				#	#	-3/2
	#			#	#	-1/2
		#		#	#	1/2
			#	#	#	3/2

$$J = 3/2$$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_{5/2,3/2,1/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_{5/2, 3/2, 1/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(1/2, 1/2, 1/2)_J^{\circ}$$

Não é possível.

Princípio de Exclusão de Pauli

$$\text{Se } j_1 = j_2$$

então,  $m_{j_1} \neq m_{j_2}$

# Acoplamento $jj$ - configuração eletrônica $p^3$

---

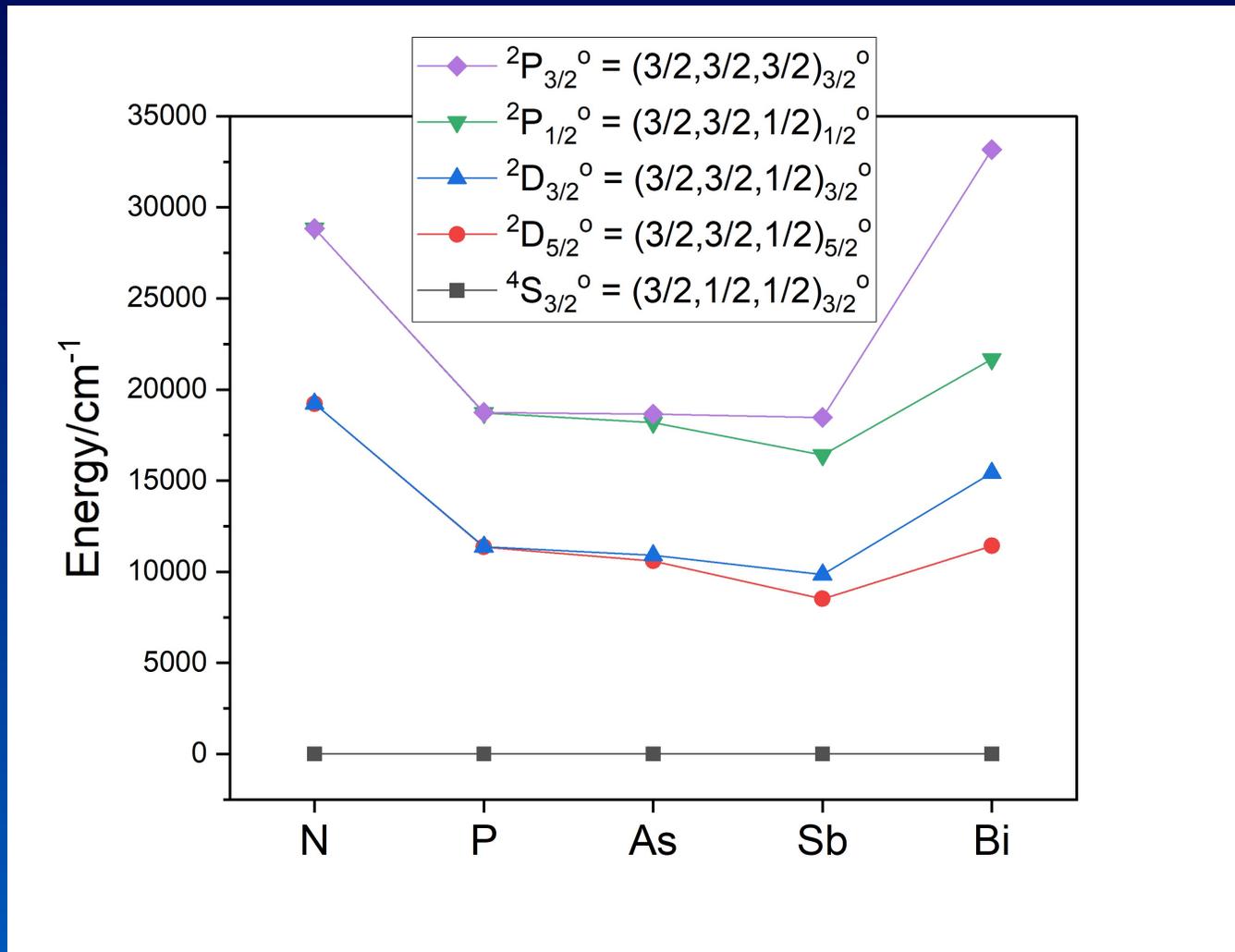
Termos espectroscópicos finais

$$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 3/2, 1/2)_{5/2,3/2,1/2}^{\circ}$$

$$(3/2, 1/2, 1/2)_{3/2}^{\circ}$$

# Comparação $LS$ e $jj$ ( $p^3$ )



# Acoplamento $jj$

$s^1$	$(1/2)_{1/2}$		
$s^2$	$(1/2, 1/2)_0$		
$p^1$	$(3/2)_{3/2}^\circ$	$(1/2)_{1/2}^\circ$	
$p^2$	$(3/2, 3/2)_{2,0}$	$(3/2, 1/2)_{2,1}$	$(1/2, 1/2)_0$
$p^3$	$(3/2, 3/2, 3/2)_{3/2}^\circ$	$(3/2, 3/2, 1/2)_{5/2, 3/2, 1/2}^\circ$	$(3/2, 1/2, 1/2)_{3/2}^\circ$
$p^4$	$(3/2, 3/2, 3/2, 3/2)_0$	$(3/2, 3/2, 3/2, 1/2)_{2,1}$	$(3/2, 3/2, 1/2, 1/2)_{2,0}$
$p^5$	$(3/2, 3/2, 3/2, 3/2, 1/2)_{1/2}^\circ$		
	$(3/2, 3/2, 3/2, 1/2, 1/2)_{3/2}^\circ$		
$p^6$	$(3/2, 3/2, 3/2, 3/2, 1/2, 1/2)_0$		

# Acoplamento $jj$ - elétrons não equivalentes

---

Caso  $s^1p^1$

Calculando os possíveis valores de  $j$  para cada elétron

- Elétron no orbital  $s \Rightarrow \ell = 0$
  - Número quântico de spin do elétron,  $s = 1/2$
  - $j = \ell + s, \ell + s - 1, \ell + s - 2, \dots, |\ell - s|$
- $\Rightarrow j$  para o elétron no orbital  $s$  só pode ser  $1/2$

# Acoplamento $jj$ - elétrons não equivalentes

Caso  $s^1p^1$

Calculando os possíveis valores de  $j$  para cada elétron

- Elétron no orbital  $p \Rightarrow \ell = 1$
  - Número quântico de spin do elétron,  $s = 1/2$
  - $j = \ell + s, \ell + s - 1, \ell + s - 2, \dots, |\ell - s|$
- $\Rightarrow$  Os valores de  $j$  para um elétron em um orbital  $p$  podem ser  $3/2$  ou  $1/2$

# Acoplamento $jj$ - elétrons não equivalentes

---

Possibilidades para os termos  $jj$   
caso  $s^1p^1$

$$(p:3/2; s:1/2)_J^\circ$$

$$(p:1/2; s:1/2)_J^\circ$$

O símbolo de paridade indica que a soma de todos os valores de  $\ell$  é um número ímpar.

$$(s + p; 0 + 1 = 1).$$

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(p:3/2; s:1/2)_J^\circ$$

$$(p:1/2; s:1/2)_J^\circ$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

Construindo os microestados para o termo  $(p:3/2; s:1/2)_J^{\circ}$

elétron 1 ( $j = 3/2$ )				elétron 2 ( $j = 1/2$ )		$M_J = \sum m_j$
$m_j = -3/2$	$m_j = -1/2$	$m_j = 1/2$	$m_j = 3/2$	$m_j = -1/2$	$m_j = 1/2$	
#				#		-2
#					#	-1
	#			#		-1
	#				#	0
		#		#		0
		#			#	1
			#	#		1
			#		#	2

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

## Tabela de Contabilidade

Contando os microestados e obtendo os valores de  $J$

	número de microestados	número de microestados após retirar o termo $(p:3/2; s:1/2)_2$
$M_J = 2$	1	
$M_J = 1$	2	1
$M_J = 0$	2	1
$M_J = -1$	2	1
$M_J = -2$	1	

$$J = 2$$

$$J = 1$$

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(p:3/2; s:1/2)_{2,1}^{\circ}$$

$$(p:1/2; s:1/2)_J^{\circ}$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(p:3/2; s:1/2)_{2,1}^{\circ}$$

$$(p:1/2; s:1/2)_J^{\circ}$$

Quais são os valores de  $J$ ?

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

Construindo os microestados para o termo  $(p:1/2; s:1/2)_J^{\circ}$

elétron 1 ( $j = 1/2$ )		elétron 2 ( $j = 1/2$ )		
$m_j$	$m_j$	$m_j$	$m_j$	$M_J = \sum m_j$
-1/2	1/2	-1/2	1/2	
#		#		-1
#			#	0
	#	#		0
	#		#	1

Princípio de Exclusão de Pauli não se aplica pois os elétrons estão em orbitais diferentes.

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

## Tabela de Contabilidade

Contando os microestados e obtendo os valores de  $J$

	número de microestados	número de microestados após retirar o termo $(p:1/2; s:1/2)_1$
$M_J = 1$	1	
$M_J = 0$	2	1
$M_J = -1$	1	

$$J = 1$$

$$J = 0$$

# Acoplamento $jj$ - caso $s^1p^1$

---

Possibilidades para os termos  $jj$

$$(p:3/2; s:1/2)_{2,1}^{\circ}$$

$$(p:1/2; s:1/2)_{1,0}^{\circ}$$

# Acoplamento $jj$ - elétrons não equivalentes

$ns^1n's^1$	$(1/2,1/2)_{1,0}$
$s^1p^1$	$(3/2;1/2)_{2,1}^\circ (1/2;1/2)_{1,0}^\circ$
$s^1p^3$	$(3/2,3/2,3/2;1/2)_{2,1} (3/2,3/2,1/2;1/2)_{3,2(2),1(2),0} (3/2,1/2,1/2;1/2)_{2,1}$
$np^1n'p^1$	$(3/2,3/2)_{3,2,1,0} (3/2,1/2)_{2,1} (1/2,1/2)_{1,0}$
$s^1d^1$	$(5/2;1/2)_{3,2} (3/2;1/2)_{2,1}$
$s^1d^2$	$(5/2,5/2;1/2)_{9/2,7/2,5/2,3/2,1/2} (5/2,3/2;1/2)_{9/2,2(7/2),2(5/2),2(3/2),1/2}$ $(3/2,3/2;1/2)_{5/2,3/2,1/2}$
$s^1p^1d^1$	$(5/2;3/2;1/2)_{9/2,2(7/2),2(5/2),2(3/2),1/2}^\circ (5/2;1/2;1/2)_{5/2}^\circ,$ $(3/2;3/2;1/2)_{7/2,2(5/2),2(3/2),2(1/2)}^\circ, (3/2;1/2;1/2)_{3/2}^\circ$
$p^1d^1$	$(5/2;3/2)_{4,3,2,1}^\circ (5/2;1/2)_{3,2}^\circ (3/2;3/2)_{3,2,1,0}^\circ (3/2;1/2)_{2,1}^\circ$
$nd^1n'd^1$	$(5/2,5/2)_{5,4,3,2,1,0} (5/2,3/2)_{4,3,2,1} (3/2,3/2)_{3,2,1,0}$

# Regras de Seleção

## Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico

---

Acoplamento  $LS$

$$T \leftrightarrow T^{\circ}$$

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta L = 0, \pm 1$$

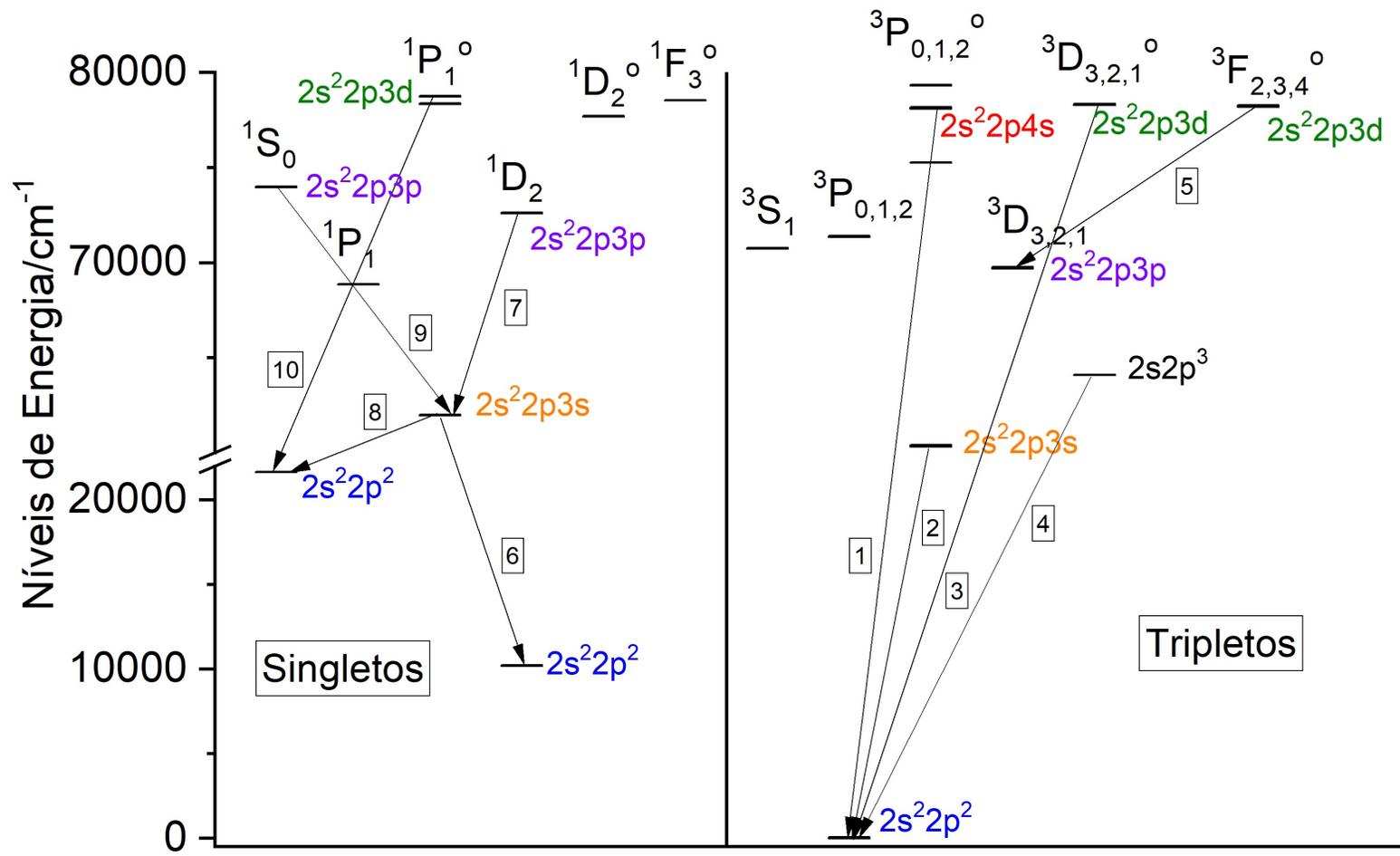
$$\Delta J = 0, \pm 1 \text{ (} 0 \leftrightarrow 0 \text{ proibido)}$$

Acoplamento  $jj$

$$T \leftrightarrow T^{\circ}$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \text{ (} 0 \leftrightarrow 0 \text{ proibido)}$$

# Espectro de emissão do carbono (C I) - Linhas persistentes\*



\*Sansonetti, J. E.; Martin, W. C. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2005**, *34*, 1559-2259

# Regras de Seleção

## Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico

---

Acoplamento  $LS$  - o carbono é um elemento leve

$T \leftrightarrow T^{\circ}$  (não há transições “verticais”)

$\Delta S = 0$  (não há mistura entre singletos e tripletos)

$\Delta L = 0, \pm 1$

$\Delta J = 0, \pm 1$  ( $0 \leftrightarrow 0$  proibido)

# Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico - carbono triplete $\leftrightarrow$ triplete

---

[1] 128,03330 nm  $2s^2 2p^1 4s^1 (^3P_2^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_2) \Delta J = 0 \quad \Delta L = 0$

[2] Seis linhas muito próximas

165,8121 nm  $2s^2 2p^1 3s^1 (^3P_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_2) \Delta J = +1 \quad \Delta L = 0$

165,7907 nm  $2s^2 2p^1 3s^1 (^3P_0^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_1) \Delta J = +1 \quad \Delta L = 0$

165,7379 nm  $2s^2 2p^1 3s^1 (^3P_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_1) \Delta J = 0 \quad \Delta L = 0$

165,7008 nm  $2s^2 2p^1 3s^1 (^3P_2^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_2) \Delta J = 0 \quad \Delta L = 0$

165,6928 nm  $2s^2 2p^1 3s^1 (^3P_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_0) \Delta J = -1 \quad \Delta L = 0$

165,6267 nm  $2s^2 2p^1 3s^1 (^3P_2^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_1) \Delta J = -1 \quad \Delta L = 0$

[3] Quatro linhas muito próximas

127,75497 nm  $2s^2 2p^1 3d^1 (^3D_3^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_2) \Delta J = -1 \quad \Delta L = -1$

127,75131 nm  $2s^2 2p^1 3d^1 (^3D_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_1) \Delta J = 0 \quad \Delta L = -1$

127,72824 nm  $2s^2 2p^1 3d^1 (^3D_2^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_1) \Delta J = -1 \quad \Delta L = -1$

127,72453 nm  $2s^2 2p^1 3d^1 (^3D_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_0) \Delta J = -1 \quad \Delta L = -1$

# Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico - carbono triplete $\leftrightarrow$ tripleto

---

[4] três linhas muito próximas

156,1438 nm	$2s^2 2p^3 (^3D_3^o) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_2)$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = -1$
156,0709 nm	$2s^2 2p^3 (^3D_1^o) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_1)$	$\Delta J = 0$	$\Delta L = -1$
156,0682 nm	$2s^2 2p^3 (^3D_2^o) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P_1)$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = -1$

[5] duas linhas muito próximas

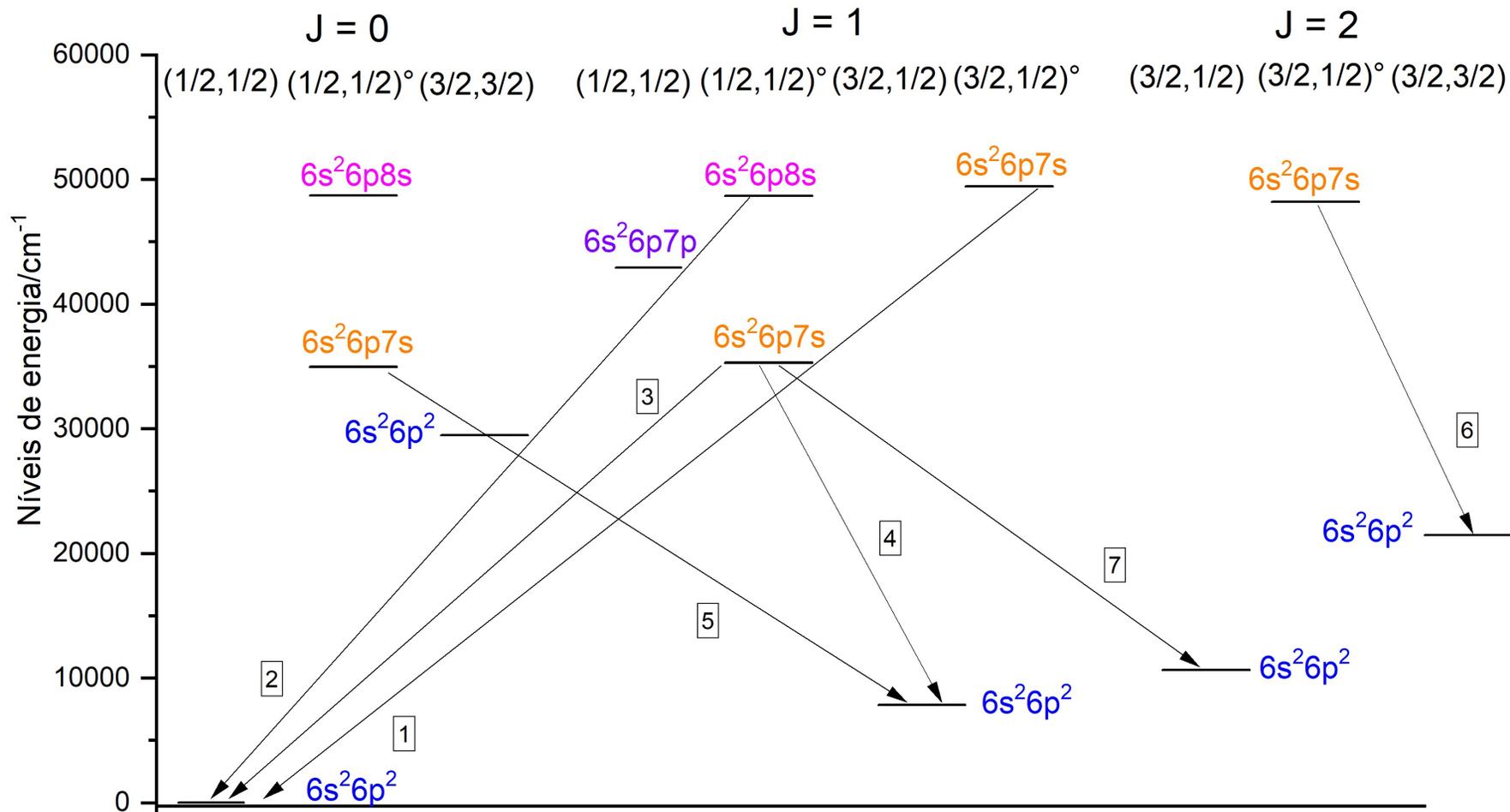
117,5476 nm	$2s^2 2p^1 3d^1 (^3F_3^o) \rightarrow 2s^2 2p^1 3p^1 (^3D_2)$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = -1$
117,5332 nm	$2s^2 2p^1 3d^1 (^3F_4^o) \rightarrow 2s^2 2p^1 3p^1 (^3D_3)$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = -1$

# Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico -carbono singleto $\leftrightarrow$ singleto

---

[6] 193,0906 nm	$2s^2 2p^1 3s^1 (^1P_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^1D_2)$	$\Delta J = +1$	$\Delta L = +1$
[7] 940,573 nm	$2s^2 2p^1 3p^1 (^1D_2) \rightarrow 2s^2 2p^1 3s^1 (^1P_1^{\circ})$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = -1$
[8] 247,8561 nm	$2s^2 2p^1 3s^1 (^1P_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^1S_0)$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = -1$
[9] 833,515 nm	$2s^2 2p^1 3p^1 (^1S_0) \rightarrow 2s^2 2p^1 3s^1 (^1P_1^{\circ})$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = +1$
[10] 175,1827 nm	$2s^2 2p^1 3d^1 (^1P_1^{\circ}) \rightarrow 2s^2 2p^2 (^1S_0)$	$\Delta J = -1$	$\Delta L = -1$

# Espectro de emissão do chumbo (Pb I) - linhas persistentes\*



\*Sansonetti, J. E.; Martin, W. C. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2005**, 34, 1559-2259

# Regras de Seleção

## Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico

---

Acoplamento  $jj$  - o chumbo é um elemento pesado

$T \leftrightarrow T^{\circ}$  (não há transições “verticais”)

$\Delta J = 0, \pm 1$  ( $0 \leftrightarrow 0$  proibido)

## Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico - chumbo

---

[1] 202,2016 nm	$6s^2 6p^1 7s^1 (3/2,1/2)_1^\circ \rightarrow 6s^2 6p^2 (1/2,1/2)_0$	$\Delta J = -1$
[2] 205,3284 nm	$6s^2 6p^1 8s^1 (1/2,1/2)_1^\circ \rightarrow 6s^2 6p^2 (1/2,1/2)_0$	$\Delta J = -1$
[3] 283,3053 nm	$6s^2 6p^1 7s^1 (1/2,1/2)_1^\circ \rightarrow 6s^2 6p^2 (1/2,1/2)_0$	$\Delta J = -1$
[4] 363,9568 nm	$6s^2 6p^1 7s^1 (1/2,1/2)_1^\circ \rightarrow 6s^2 6p^2 (3/2,1/2)_1$	$\Delta J = 0$
[5] 368,3462 nm	$6s^2 6p^1 7s^1 (1/2,1/2)_0^\circ \rightarrow 6s^2 6p^2 (3/2,1/2)_1$	$\Delta J = +1$
[6] 373,9935 nm	$6s^2 6p^1 7s^1 (3/2,1/2)_2^\circ \rightarrow 6s^2 6p^2 (3/2,3/2)_2$	$\Delta J = 0$
[7] 405,7807 nm	$6s^2 6p^1 7s^1 (1/2,1/2)_1^\circ \rightarrow 6s^2 6p^2 (3/2,1/2)_2$	$\Delta J = +1$

## Transições eletrônicas permitidas por dipolo elétrico - chumbo

---

[1] 202,2016 nm	$6p_{3/2} 7s_{1/2} (3/2, 1/2)_1^{\circ} \rightarrow 6p_{1/2}^2 (1/2, 1/2)_0$	$\Delta J = -1$
[2] 205,3284 nm	$6p_{1/2} 8s_{1/2} (1/2, 1/2)_1^{\circ} \rightarrow 6p_{1/2}^2 (1/2, 1/2)_0$	$\Delta J = -1$
[3] 283,3053 nm	$6p_{1/2} 7s_{1/2} (1/2, 1/2)_1^{\circ} \rightarrow 6p_{1/2}^2 (1/2, 1/2)_0$	$\Delta J = -1$
[4] 363,9568 nm	$6p_{1/2} 7s_{1/2} (1/2, 1/2)_1^{\circ} \rightarrow 6p_{1/2} 6p_{3/2} (3/2, 1/2)_1$	$\Delta J = 0$
[5] 368,3462 nm	$6p_{1/2} 7s_{1/2} (1/2, 1/2)_0^{\circ} \rightarrow 6p_{1/2} 6p_{3/2} (3/2, 1/2)_1$	$\Delta J = +1$
[6] 373,9935 nm	$6p_{3/2} 7s_{1/2} (3/2, 1/2)_2^{\circ} \rightarrow 6p_{3/2}^2 (3/2, 3/2)_2$	$\Delta J = 0$
[7] 405,7807 nm	$6p_{1/2} 7s_{1/2} (1/2, 1/2)_1^{\circ} \rightarrow 6p_{1/2} p_{3/2} (3/2, 1/2)_2$	$\Delta J = +1$