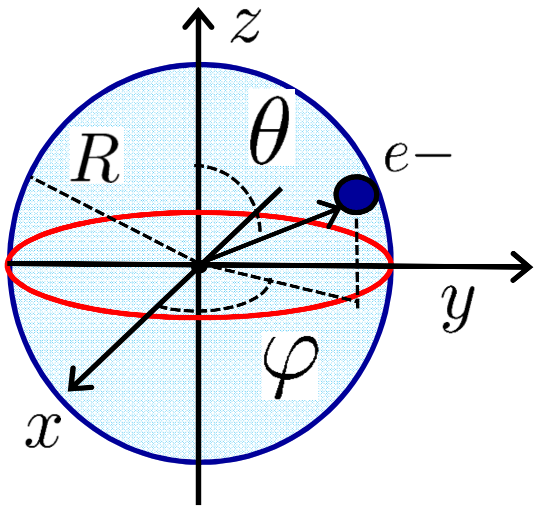
Momento angular de spin



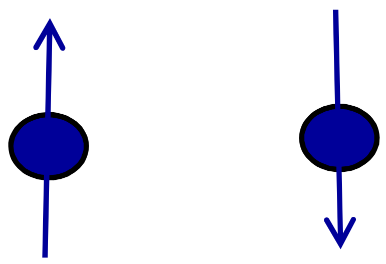
Momento angular orbital (L)

$$L_z Y_l^{m_l}(\theta,\varphi) = \hbar m_l Y_l^{m_l}(\theta,\varphi)$$

$$L^2 Y_l^{m_l}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^{m_l}(\theta,\varphi)$$

Momento angular de spin (S) com s=1/2:

$$\boxed{\begin{aligned} S_z F_{s=\frac{1}{2}}^{m_s=\pm\frac{1}{2}} &= \pm\frac{\hbar}{2} F_{s=\frac{1}{2}}^{m_s=\pm\frac{1}{2}} \\ S^2 F_{s=\frac{1}{2}}^{m_s=\pm\frac{1}{2}} &= \frac{3\hbar^2}{4} F_{s=\frac{1}{2}}^{m_s=\pm\frac{1}{2}} \end{aligned}}$$



$m_s = +\frac{1}{2}$ $\quad$ $m_s = -\frac{1}{2}$

Espectro de H incluindo o spin.

Função de onda total do elétron no átomo H

$$\boxed{\Psi^{m_s}_{n,l,m_l}(\mathbf{r}) = \psi_{n,l,m_s}(r,\theta,\varphi).F^{m_s}}$$

Espectro com spin
(2 n^2 estados degenerados!):

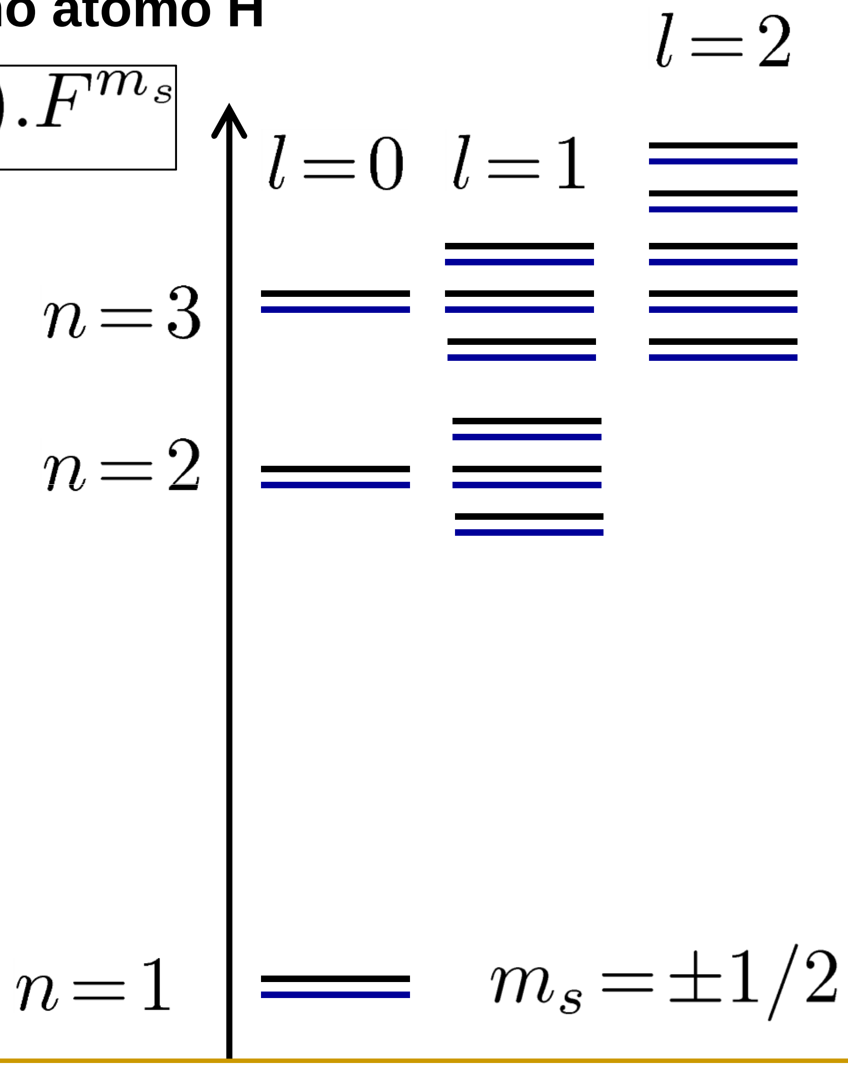
$$\boxed{E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{13.6\ \text{eV}}{n^2}}$$

$$n = 1, 2, \ldots$$

$$l = 0, 1, 2, \cdots, n-1$$

$$-l \leq m_l \leq l$$

$$m_s = \pm\frac{1}{2}$$



E se tivermos mais de um elétron?

Átomos tem potencial com simetria esférica: L^2 é conservado.

Cada elétron: 4 números quânticos.

$$\boxed{n = 1, 2, \ldots} \quad \boxed{l = 0, 1, 2, \cdots, n-1} \quad \boxed{-l \leq m_l \leq l} \quad \boxed{m_s = \pm\frac{1}{2}}$$

"Preenchimento" dos níveis segue o Princípio de Pauli:

Dois elétrons em um átomo nunca podem ter o mesmo conjunto de números quânticos (n,l,m_l,m_s).

ou, equivalentemente:

Dois elétrons não ocupam o mesmo estado quântico.

Exemplo 1

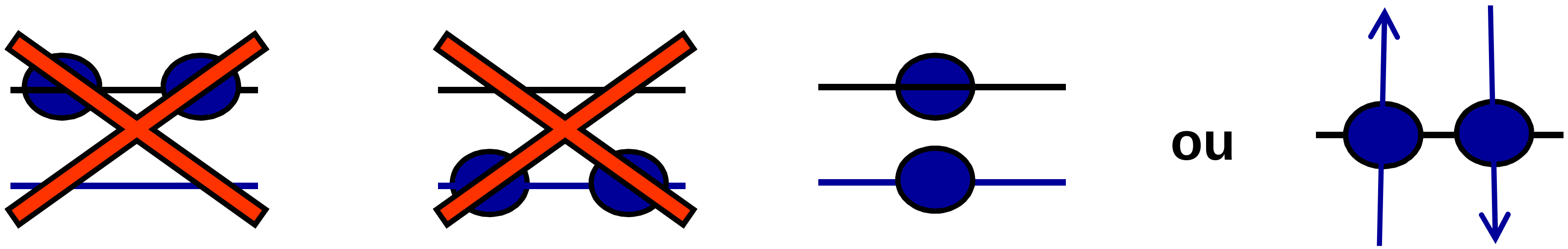
Dois elétrons com mesmo n e l=0:

Necessariamente terão o mesmo m_l (m_l=0)

$$l = 0$$

$$n \qquad m_s = +1/2$$
$$m_s = -1/2$$

Dois elétrons não ocupam o mesmo estado quântico.



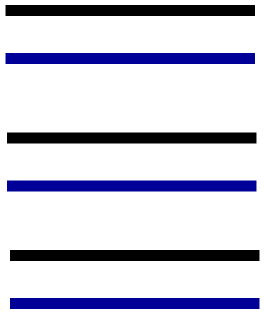
OK!

Exemplo 2:

2) Dois elétrons com mesmo n e l=1:

Mais possibilidades: podem ter ml diferentes (m_l=-1,0,+1)

n



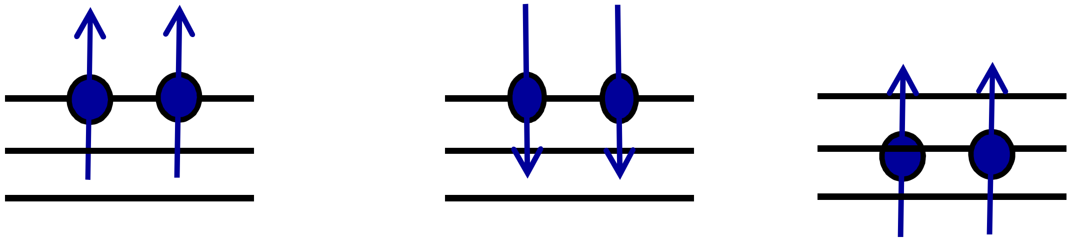
$$m_l = +1; m_s = +1/2$$
$$m_l = +1; m_s = -1/2$$
$$m_l = 0; m_s = +1/2$$
$$m_l = 0; m_s = -1/2$$
$$m_l = -1; m_s = +1/2$$
$$m_l = -1; m_s = -1/2$$

$$l = 1$$

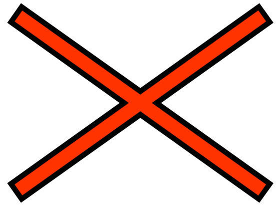
O princípio de Pauli não permite dois elétrons com mesmos m_l e m_s mas permite todas as outras combinações!

Exemplo 2:

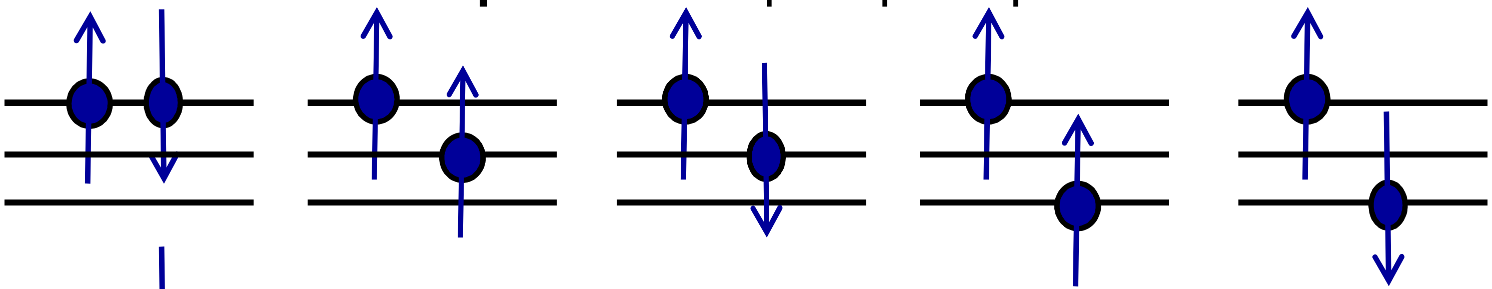
O princípio de Pauli proíbe estados como

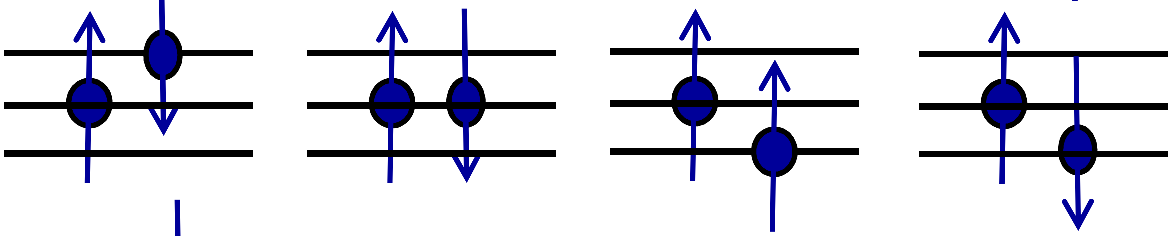


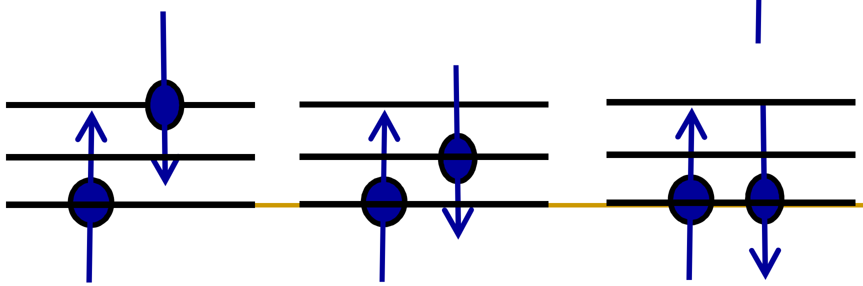
etc.



Estados **permitidos** pelo princípio de Pauli:





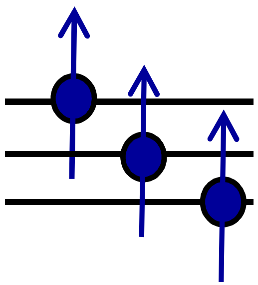


OK!

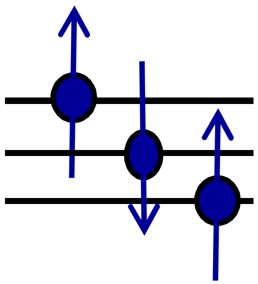
Lembrando que os dois elétrons
são ***partículas idênticas***

(1a) Regra de Hund:

Dadas duas configurações orbitais idênticas, a de mais baixa energia será aquela com maior número de spins paralelos obedecendo ao princípio de Pauli.



E_1

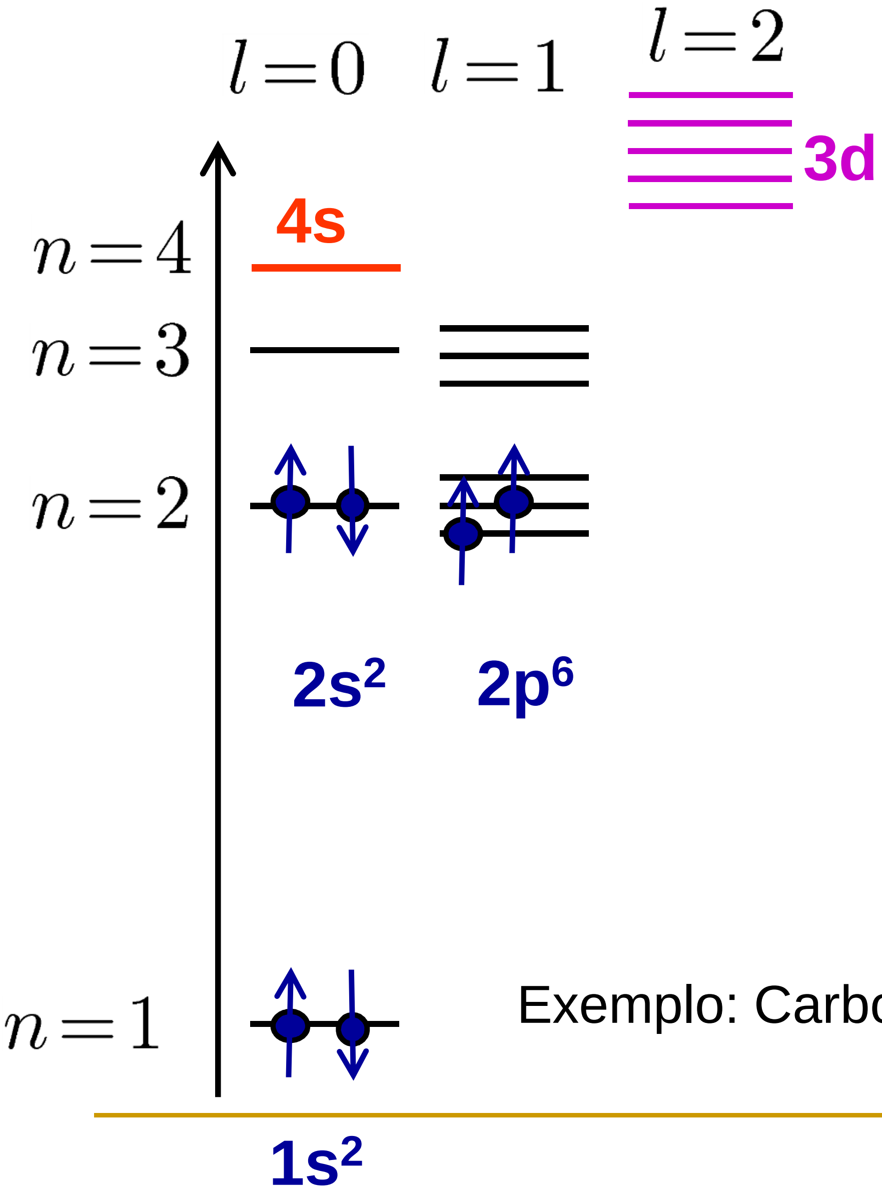


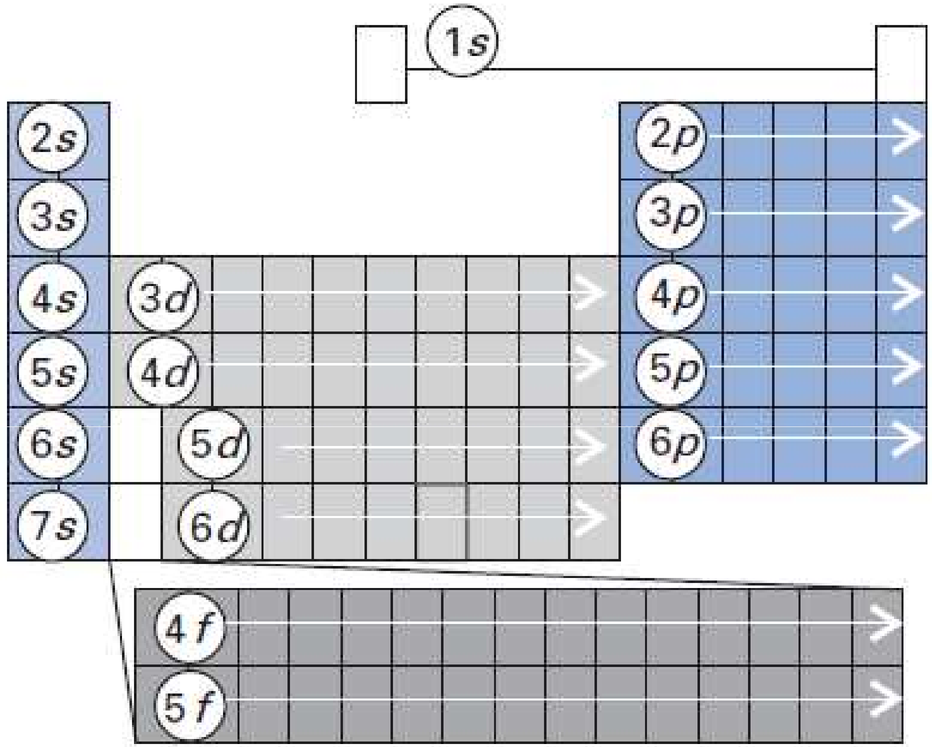
E_2

Regra de Hund (spin):

$$\boxed{E_1 < E_2}$$

Preenchimento de orbitais.





Exemplo: Carbono (Z=6) **[C]=$1s^2$ $2s^2$ $2p^2$**

Tabela Periódica