

Acoplamento Spin-Órbita. A interação entre o momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ de uma partícula ou de um sistema de partículas e um campo magnético \mathbf{B} tem uma energia potencial, como vimos, dada por

$$E_B = - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (1)$$

Quando esta expressão foi anteriormente considerada, somente campos externos foram levados em consideração. Mas os resultados anteriormente apresentados são válidos para a interação entre momentos magnéticos e campos magnéticos em geral.

Na formulação atômica de Bohr, um elétron atômico apresenta movimento angular orbital em torno do núcleo atômico, cujo vetor momentum angular é representado pela letra \mathbf{L} ; consideremos este como o primeiro caso a ser analisado no modelo de Bohr. Do ponto de vista de um referencial colocado sobre o elétron, por outro lado, é o núcleo atômico, com carga positiva, que órbita em torno deste referencial (consideremos este como o segundo caso do problema em análise). A velocidade angular do núcleo, no segundo caso, é então idêntica à do elétron em torno do centro de forças, quando consideramos o primeiro caso.

Estas observações são indicativas de que o núcleo atômico produz um campo magnético \mathbf{B}_N cuja orientação, evocando razões de simetria, é paralela à do vetor momentum angular orbital do elétron, \mathbf{L} . Este campo magnético interno ao átomo pode interagir com o vetor momento magnético de spin do elétron, $\boldsymbol{\mu}_s$. Em vista de que $\boldsymbol{\mu}_s$ é proporcional ao momentum angular intrínseco \mathbf{S} do elétron, como vimos anteriormente,

$$\boldsymbol{\mu}_s = - (e/2m) \mathbf{S} \quad (2)$$

e tendo ainda em vista que, por serem paralelos, podemos assumir, para uma dada órbita, que os vetores \mathbf{B}_N e \mathbf{L} são proporcionais, podemos então escrever a expressão

$$\mathbf{B}_N = \chi_{NL} \mathbf{L} \quad (3)$$

Por fim, obtemos então uma expressão para o chamado acoplamento spin-órbita, que caracteriza como vimos o acoplamento entre o momento magnético de spin do elétron com campo magnético nuclear atômico, expresso em termos dos vetores spin e momentum angular orbital do elétron, \mathbf{L} e \mathbf{S} :

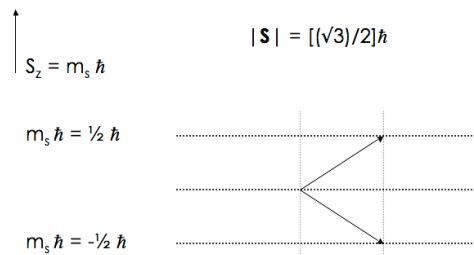
$$E_{SN} = - \boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_N = - [- (e/2m) \mathbf{S}] \cdot \chi_{NL} \mathbf{L} = \kappa_{LS} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (4)$$

Os valores precisos de χ_{NL} e κ_{LS} não necessitam serem agora considerados.

A interação spin-órbita produz assim um tipo de acoplamento semelhante ao efeito Zeeman, produzindo desdobramentos, em cada nível de energia com $\mathbf{L} \neq 0$, em dois sub-níveis, correspondendo estes sub-níveis aos valores da componente do vetor \mathbf{S} na direção de quantização z, S_z , valores estes permitidos pela relação

$$S_z = m_s \hbar \quad ; \quad m_s = s, s-1 = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \quad ; \quad |\mathbf{S}| = [\sqrt{s(s+1)}]\hbar = [\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}]\hbar = [(\sqrt{3})/2]\hbar \quad (5)$$

É importante lembrar que as duas orientações do spin \mathbf{S} são referidas, comumente, utilizando a nomenclatura inglesa, na forma *spin up* ($m_s = \frac{1}{2}$) e *spin down* ($m_s = -\frac{1}{2}$), embora os termos *up* (para cima) e *down* (para baixo) contenham elementos de imprecisão: o vetor momentum angular orbital intrínseco, também conhecido como momentum angular de spin, ou ainda, simplesmente spin, não pode nunca estar orientado na direção positiva ou negativa do eixo z, como mostra a figura abaixo



Estrutura Fina. Efeito Zeeman Anômalo. Como vimos anteriormente, o espectro correspondente ao efeito Zeeman apresenta, quando consideramos um átomo constituído por um elétron, um desdobramentos de níveis eletrônicos tal que

$$E = E_0 + E_B = E_0 + m_\ell (e\hbar/2m)B \quad (6)$$

onde E_0 corresponde ao nível quantizado de energia antes da aplicação do campo \mathbf{B} . Nesta expressão, $(e\hbar/2m) = 5,79 \times 10^{-5} \text{eV/T} = 9,27 \times 10^{-24} \text{J/T}$, representa o chamado magnéton de Bohr. Transições de níveis ocorrem para

$$\Delta E = \Delta E_0 + \Delta m_\ell (e\hbar/2m)B \quad (7)$$

No caso em que consideramos dois valores de $\ell = 0$ e 2 , os valores possíveis de m_ℓ são $= 2, 1, 0, -1$ e -2 . Os níveis mais intensos observados obedecem porém as regras de seleção

$$\Delta \ell = \pm 1 \quad ; \quad \Delta m_\ell = \pm 1, 0 \quad (8)$$

Combinando estes resultados temos

$$\Delta E = \Delta E_0 \pm (e\hbar/2m)B \quad (9)$$

para os estados mais intensos. Desta expressão resulta que podemos definir o chamado *desdobramento espectral de Zeeman*, ou *desdobramento espectral normal de Zeeman*

$$\Delta E_{\text{Zeeman}} = (e\hbar/2m)B = \hbar \omega_{\text{Zeeman}} \quad (10)$$

onde

$$\omega_{\text{Zeeman}} = (e/2m)B \quad (11)$$

representa a *freqüência normal de Zeeman*. Se a orientação do momentum angular orbital não fosse quantizada, então se observaria que as linhas apresentariam uma distribuição contínua de bandas ao invés dos valores discretos observados, pois o momentum angular orbital poderia assumir qualquer valor. Este efeito é chamado porém de normal porque a análise acima não pode explicar todos as linhas observadas em um experimento de Zeeman. Há transições adicionais devidas ao acoplamento do spin do elétron com o campo magnético aplicado. Seus efeitos envolvem, além da existência de linhas espectrais de transição adicionais, a redução do efeito Zeeman normal, no caso em que a intensidade do campo magnético externo seja expressiva. Este efeito adicional originou a concepção do *efeito Zeeman anômalo*.

Retornando ao acoplamento spin-órbita no átomo, vimos que há, devido à interação **L** e **S**, uma energia potencial adicional associada ao níveis de energia do elétron, dada por $E_{\text{SN}} = -\mu_s \cdot \mathbf{B}_N = -[(e/2m)\mathbf{S}] \cdot \chi_{\text{NL}} \mathbf{L} = \kappa_{\text{LS}} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$. Esta energia potencial, que resulta de um tipo de acoplamento semelhante ao do efeito Zeeman, produz desdobramentos, em cada nível de energia com $\mathbf{L} \neq 0$. Este desdobramento corresponde porém neste caso a somente dois sub-níveis, associados aos valores da componente do vetor **S** na direção de quantização z, S_z , tal que $S_z = m_s \hbar$; $m_s = s, s-1 = 1/2, -1/2$; $|\mathbf{S}| = [\sqrt{s(s+1)}]\hbar = [\sqrt{3/2(3/2+1)}]\hbar = [(\sqrt{3})/2]\hbar$. Portanto, há mais níveis atômicos de energia disponíveis para os estados eletrônicos do que aqueles que foram considerados anteriormente no átomo de hidrogênio. Em conseqüência disso, haverá linhas adicionais no espectro de hidrogênio que não foram anteriormente consideradas. A figura abaixo exemplifica estes aspectos.

Momentum Angular Total. Na mecânica quântica podemos definir o momentum angular total dado por

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (12)$$

onde L e S representam, respectivamente, o momentum angular orbital e o momentum angular intrínseco. e A magnitude do momentum angular total é quantizada na forma

$$|\mathbf{J}| = [\sqrt{J(J+1)}] \hbar \quad (13)$$

O número quântico J pode assumir os valores

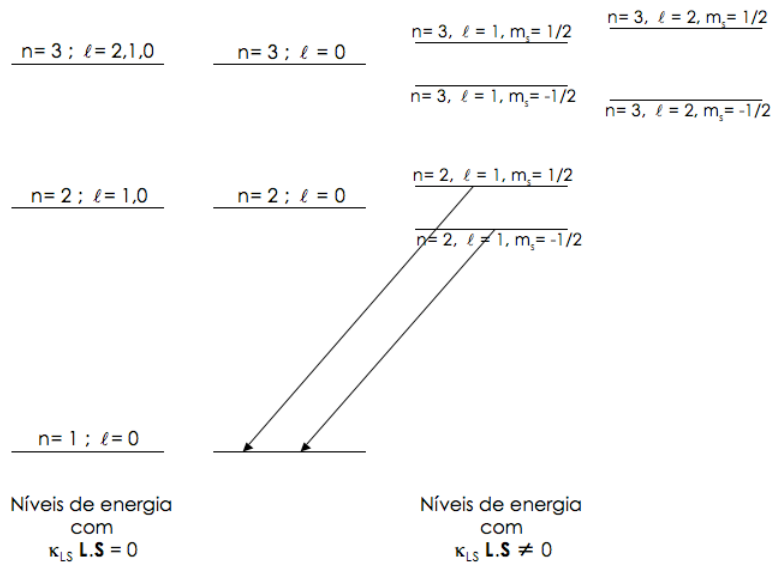
$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad (14)$$

A orientação do vetor \mathbf{J} pode ser quantizada na forma (sendo z o eixo de quantização);

$$J_z = M_J \hbar \quad (15)$$

sendo que

$$M_J = J, J - 1, J - 2, \dots, -J \quad (16)$$



Problemas

1. Expresse $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ em termos de J , L , e S . Solução: $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \hbar^2$.
2. Calcule os valores possíveis de $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ para $L = 1$ e $S = \frac{1}{2}$. a) $J = 3/2$, $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar^2$; b) $J = 1/2$, $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = -\frac{1}{2} \hbar^2$. Encontre as orientações relativas entre estes vetores.
3. Estime a intensidade do campo magnético produzido no movimento orbital de um elétron que resulta nas 2 linha D do sódio com 5889,95 e 5895,92 Angstrom. Solução: $B = 18,4 \text{ T}$.
4. Calcule o valor da constante κ_{LS} usando os dados do problema anterior. Solução: $\kappa_{LS} = 3,28 \times 10^{27} (\text{eV} \cdot \text{s}^2)^{-1}$.