

I simboli di Termine atomico e correlazione con i Termini Spettrali

Giuseppe Marco Randazzo

5 luglio 2008

Sommario

Questo testo riguardante i termini spettrali e riferito verso coloro hanno avuto difficoltà di comprensione su tale argomento, il quale è stato discusso durante le lezioni di Chimica Inorganica 3 tenute dal Prof. Enrico Rizzarelli. Si tratta semplicemente di una rielaborazione degli appunti accoppiati al libro di testo *Mcquarrie - Chimica Fisica*. Buona lettura. Se incontrate errori non esitate a notificarlo. Grazie

<zeld@freaknet.org>

License

Copyright ©2008 Giuseppe Marco Randazzo aka zeld
<zekd@freaknet.org>. All rights reserved. This document is free; you
can redistribute it and/or modify it under the terms of the GNU
General Public License as published by the Free Software Foundation;
either version 2 of the License, or (at your option) any later version.

This document is distributed in the hope that it will be useful, but
WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of
MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR
PURPOSE. See the GNU General Public License for more details. You
should have received a copy of the GNU General Public License along
with this document; if not, write to the Free Software Foundation, Inc.,
675 Mass Ave, Cambridge, MA 02139, USA.

Indice

1	Alcuni concetti fondamentali	4
1.1	L'equazione di Schrödinger	4
1.2	La regola dell' Aufbau	5
1.3	La regola di Hund	5
2	I Termini spettrali	5
2.1	L'accoppiamento di Russell-Saunders	6
2.2	Accoppiamento spin-orbita	7
2.3	Termine spettrale dell' He per lo stato eccitato: capire la differenza dell'energie di due orbitali che hanno stesso numero quantico principale n (stesso livello energetico)	8
2.4	La Classificazione dei microstati: Le regole di Hund	9
2.5	Ricavo dei termini spettrali da $Z=1$ a $Z=10$	10
3	Utilità dei termini spettrali	12

1 Alcuni concetti fondamentali

1.1 L'equazione di Schrödinger

L'equazione di Schrödinger, l'equazione fondamentale della meccanica quantistica, è un'equazione differenziale che ha la forma di una equazione agli autovalori e alle autofunzioni ed è in grado di descrivere in maniera esatta il moto dell'elettrone nell'atomo di idrogeno. Le soluzioni di tale equazione vengono chiamate *funzioni d'onda* (nel particolare le *funzioni d'onda dello stato stazionario* ovvero quelle soluzioni indipendenti dal tempo), e tali soluzioni sono in grado di fornire una descrizione completa di qualsiasi sistema atomico/molecolare in termini probabilistici. Tale funzione d'onda Ψ , può essere scomposta in due componenti (necessario per visualizzare tale risultato in quanto servirebbe un iperspazio per rappresentare tale risultato):

- Componente Radiale : descrive dove giace la massima probabilità di trovare l'elettrone ($\int \psi^2 dR = \text{Probabilità}$)
- Componente Angolare : descrive la forma orbitalica, ovvero la distribuzione di probabilità nello spazio x,y,z ed è rappresentata dalle funzioni armoniche sferiche.

Risolvendo tale equazione Ψ per l'atomo di idrogeno ci accorgiamo che le funzioni d'onda dipendono da tre numeri quantici:

- n : Numero quantico principale o numero quantico energetico e descrive il livello energetico in cui sta l'orbitale, il cui valore dipende dall'autovalore E (energia) che si ottiene risolvendo l'equazione di Schrödinger.
- l : Numero quantico secondario o numero quantico azimutale o numero quantico del momento angolare e descrive il momento angolare dell'elettrone attorno al nucleo atomico ed assume valori da $0 \leq l \leq n - 1$.
- m : Numero quantico magnetico o momento angolare orbitale lungo l'asse z ed è un vettore che può assumere certe orientazioni lungo l'asse z e tale direzione viene definita solamente in presenza di un campo elettrico o campo magnetico (campi imposti da noi dall'esterno, oppure campi dovuti ad altri atomi/molecole vicini) ed assume valori da -l a +l $-l \leq m \leq +l$.

Tenendo conto di questi numeri quantici, rappresentiamo gli orbitali ovvero le autofunzioni che otteniamo dalla risoluzione dell'equazione di Schrödinger, e per ogni valore di l si ha un particolare orbitale, tutti differenti tra loro. Il valore di l viene usualmente indicato con una lettera, rappresentando l=0 l'orbitale s, l=1, l'orbitale p, l=2 l'orbitale d, l=3 l'orbitale f e i vari superiori con le lettere dell'alfabeto che seguono la f. L'origine delle lettere s,p,d,f derivano dalle iniziali dei termini inglesi *sharp, principal, diffuse, fundamental*.

Tutti gli orbitali, eccetto l'orbitale s, hanno componente angolare orbitale (numero quantico secondario $l \neq 0$ e cioè sono *direzionali*, ovvero hanno le probabilità orientate in certe posizioni dell'asse 3D. L'orbitale s invece risulta con simmetria sferica, per questo non ha momento angolare orbitale l, ovvero ce l'ha ma il suo valore è $l = 0$.

Quindi l'elettrone giace in certe distribuzioni di probabilità nello spazio, e tale distribuzione è nota come *configurazione elettronica*. La configurazione elettronica dipende da molti fattori tra cui la carica nucleare da schermare e dal moto di precessione dell'elettrone attorno al proprio asse. Tale moto di precessione dell'elettrone attorno al proprio asse viene descritto attraverso un altro numero quantico m_s , noto come numero quantico di spin che può assumere valori semi-interi ($+\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$) nel caso di elettroni, fermioni etc... o interi nel caso bosoni e quindi tale valore per convenzione viene rappresentato in delle scatole chiamate orbitali come una freccia in su per $+\frac{1}{2}$ o freccia in giù per $-\frac{1}{2}$ e il riempimento di tale scatoline (orbitali) seguono la regola di Hund, il principio di Pauli, e la regola dell' Aufbau o . Generalmente un sistema atomico ha stesso numero di protoni e stesso numero di elettroni affinché il sistema possa essere elettricamente neutro e quindi stabile. I livelli elettronici possono essere divisi in:

- Livelli elettronici di core : elettroni molto interni nel sistema atomico
- Livelli elettronici di valenza : gli elettroni che si trovano più all'esterno nell'atomo stesso e sono quegli elettroni facilmente da strappare al sistema.

1.2 La regola dell' Aufbau

Il principio presuppone un ipotetico processo nel quale un atomo è costruito da un progressivo riempimento degli orbitali con elettroni. Gli elettroni vengono aggiunti, cercando di assumere le condizioni più stabili (orbitali elettronici) rispettando il nucleo e gli elettroni già presenti nel sistema atomico/molecolare. Generalmente la configurazione generale per un sistema atomico è:

1s, s2, 2p,3s,3p,4s,3d,4p,5s,4d,5p,6s,4f,5d,6p,7s e da qui in poi si complica ulteriormente per gli attinidi e occorrerebbe una descrizione più dettagliata.

1.3 La regola di Hund

L' accoppiamento dei due elettroni nello stesso orbitale comporta un'interazione repulsiva fra di essi, e tale repulsione aumenta l'energia totale del sistema rispetto alla situazione che vede i due elettroni spaiati e cioè due elettroni occupanti due orbitali diversi.

2 I Termini spettrali

Le configurazioni elettroniche degli atomi sono ambigue nel senso che esiste un certo numero di insiemi di m_l (numero quantico di momento angolare orbitale lungo l'asse z) e di m_s (numero quantico di spin) in accordo con una data configurazione elettronica. I modi differenti con cui gli elettroni possono occupare gli orbitali sono detti *MICROSTATI DELLA CONFIGURAZIONE*. A questi microstati possono corrispondere energie differenti e ciò è dovuto al fatto che nel termine \hat{H} dell'equazione di Schrödinger, oltre all'energia attrattiva nucleo-elettrone vi è anche l'energia repulsiva elettrone-elettrone e ciò fa variare la

componente angolare, poichè la direzionalità provoca diverse repulsioni di elettroni e quindi fa variare anche l'energia. Tutti i microstati quindi NON hanno la stessa energia proprio perché m_l e m_s sono differenti.

Raggruppando tutti i microstati che hanno la stessa energia, ottengo dei livelli energetici che sono evidenziabili spettroscopicamente e che prendono il nome di *TERMINI SPETTRALI*. La procedura per poterli raggruppare è la seguente:

- 1 Classificare tutti i microstati in una data configurazione mediante Termini
- 2 Identificare le transizioni tra questi termini nello spettro di un atomo
- 3 Determinare la differenza di energia delle transizioni per valutare l'energia di repulsione elettronica

La classificazione di tutti i microstati di una data configurazione fatta in Termini può essere prevista mediante delle regole ben precise, nel particolare facendo riferimento a teorie come l'accoppiamento di Russell-Saunders e l'accoppiamento spin-orbita J e anche l'accoppiamento J-J. Tali teorie non fanno altro che raggruppare in termini i valori di m_l e m_s degli elettroni presenti in una data configurazione, e vengono usate per spiegare i fenomeni di magnetismo nella materia.

2.1 L'accoppiamento di Russell-Saunders

Come nel caso di un vettore momento angolare che interagendo con un campo esterno acquista un moto di precessione attorno alla direzione del campo, così i vettori momento angolari di due diversi elettroni in un atomo possono accoppiarsi per formare un momento angolare totale risultante, e ciascuno dei vettori acquista a sua volta un moto di precessione attorno al vettore risultante. Avendo due elettroni con componente angolare l_1 e l_2 , il momento angolare orbitale totale L sarà dato dalla somma vettoriale di questi valori:

$$L = \sum_i l_i$$

Sempre per i due elettroni avente momento angolare di spin m_{s1} e m_{s2} , il momento angolare totale di spin sarà dato dalla somma vettoriale di questi valori:

$$S = \sum_i m_s$$

Il risultato di questo calcolo, chiamato *accoppiamento di Russell-Saunders* viene presentato come un *simbolo di termine atomico* che possiede la seguente forma:

$$^{2S+1}L_J$$

dove $2S+1$ rappresenta la molteplicità di spin del sistema atomico in esame, L è il simbolo di termine che per analogia a $l=0=s$, $l=1=p$, $l=2=d$, $l=3=f$, etc... , assume i seguenti valori: $L=0=S$, $L=1=P$, $L=2=D$, $L=3=F$, etc... . Il simbolo J viene ignorato in questa fase, ma verrà spiegato successivamente.

Sappiamo in oltre che per ogni valore di l esistono valori m_l compresi fra -1 e +1 per un valore totale di $m_l = 2l + 1$, così per analogia per ogni termine/valore L avremo $M_L = 2L + 1$ valori di momento angolare orbitale totale lungo l'asse

z, e similmente per ogni valore di M_S corrispondono una serie di valori pari a $2S+1$, quindi $2S+1$ proiezioni che la componente z di S può assumere.

Consideriamo adesso la configurazione elettronica ns^2 ovvero due elettroni nell'orbitale s di energia n. Per tale sistema esiste solamente un solo insieme di valori perché:

- orbitale s corrisponde a $l=0$ e i due elettroni stanno entrambi sull'orbitale s quindi $L = 0+0=0$ per ciò il termine spettrale momento angolare totale è S
- per ogni valore di l corrispondono un insieme di $-l \leq m_l \leq +l$ e nel nostro caso $l = 0$ quindi si ha un solo valore di $m_l = 0$
- essendo i due elettroni nello stesso orbitale s, per il principio di Pauli, occuperanno tale orbitale con spin anti-parallelo l'un l'altro, per cui $m_{s1} = +\frac{1}{2}$ e $m_{s2} = -\frac{1}{2}$ quindi la somma dello spin totale S è 0 perché $S = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0$ quindi la molteplicità di spin risultante è $2S+1=0+1=1$

Quindi da queste considerazioni il termine spettrale risultante è:

$1S$

Adesso vediamo cosa indica l'indice J.

2.2 Accoppiamento spin-orbita

I vettori risultanti L ed S rappresentano rispettivamente il *momento angolare totale* e il *momento angolare totale di spin*. Se accoppiamo L ed S quello che si ottiene è che da una somma vettoriale giungiamo ad un vettore che è detto *ACCOPPIAMENTO SPIN-ORBITA* ed è simboleggiato nel termine atomico e/o spettrale tramite l'indice J. L'accoppiamento spin-orbita tende a spiegare il momento magnetico generato dagli elettroni in movimento, ma è noto che oltre agli elettroni vi sono i protoni anch'essi in moto di precessione e come tale generano un campo magnetico. Quindi nel totale il campo magnetico nella materia, oltre ad essere generato dagli elettroni in movimento, viene generato dai nuclei carichi positivamente (nel dettaglio dai protoni). Ora l'accoppiamento spin-orbita cresce al crescere della carica nucleare, quindi per valori di:

Z bassi : il solo accoppiamento Russell-Sanders mi può spiegare il fenomeno magnetico

Z alti : a causa dell'elevata carica nucleare si verifica l'accoppiamento spin-orbita, quindi devo tenere conto anche di j. Se la carica nucleare ha valori molto alti, dopo l'accoppiamento spin-orbita si verifica il così detto accoppiamento J-J dove $J_{tot} = \sum_i J_i$

Di conseguenza per una configurazione elettronica ns^2 il valore di J è dato da $J=L+S=0+0=0$, quindi il nostro sistema ns^2 viene descritto dal seguente termine spettrale:

$1S_0$

Anche una configurazione elettronica np^6 , quindi con gli orbitali elettronici pieni avrà un termine spettrale 1S_0 , e perfino una configurazione elettronica nd^{10} avrà un termine spettrale 1S_0 , proprio perché la somma dei loro L risultanti ed S risultanti sarà 0 a causa dei loro valori uguali e opposti.

2.3 Termine spettrale dell' He per lo stato eccitato: capire la differenza dell'energie di due orbitali che hanno stesso numero quantico principale n (stesso livello energetico)

Consideriamo lo spettro dell'elio per capire perché gli orbitali 2s e 2p sono ad energie differenti, in questo caso 2s ; 2p. L'elio allo stato eccitato ha una configurazione elettronica $1s^12s^1$ perché allo stato fondamentale è $1s^2$ dove $n=1$, $l=0$, $ml = 0$ e $m_{s1} = +\frac{1}{2}$, $m_{s2} = -\frac{1}{2}$ e per lo stato fondamentale il termine spettrale è 1S_0 per i motivi detti prima. Nel caso della configurazione dello stato eccitato oltre alla configurazione $1s^12s^1$ potremmo avere la configurazione $1s^12p^1$ e la differenza tra le due configurazioni sta nel fatto che il primo è un orbitale di tipo s e l'altro è di tipo p a parità di numero quantico principale $n=2$. Per l'atomi di idrogeno è stato visto che la transizione elettronica è legata al numero quantico n , invece per atomi con più di un elettrone entra in gioco il numero quantico l e più basso è il valore di l , più bassa sarà l'energetica del sistema atomico risultando così più stabile. Ovviamente nel caso dell'elio il termine S è più stabile del termine P , per questo la configurazione dello stato eccitato è $1s^12s^1$ proprio perché i termini S sono più vicini allo stato fondamentale rispetto ai termini P (per $s=0$ quindi per analogia $L=0$ e quindi il termine spettrale è S). Tuttavia allo stato eccitato possiamo avere due tipi di stati di molteplicità di spin a causa dell'orientamento dei due elettroni e questi stati sono:

- singoletto con $2S+1=1$ quindi con $S=0$ (spin antiparalleli)
- tripletto con $2S+1=3$ quindi con $S=1$ (spin paralleli)

Facendo un diagramma con i dati spettrali mi accorgo che lo stato di tripletto si trova ad una energia più bassa rispetto allo stato di singoletto per via dell'interazione di scambio, ovvero oltre all'energia del sistema dovuta all'interazione elettrostatica fra gli elettroni descritta dall'interazione coulombiana, esiste una *interazione di scambio* che è descritta mediante degli *integrali di scambio* che contribuiscono all'energia del sistema. Un integrale di scambio rappresenta l'interazione fra due densità di probabilità miste" e non ha alcun equivalente classico: la sua natura ed origine sono puramente quantistiche e derivano dal requisito di antisimmetria della funzione d'onda rispetto allo scambio di particelle, ovvero, tecnicamente, dalla forma determinantale della funzione d'onda. Tra i termini 1S_0 e 3S_1 c'è la stessa configurazione elettronica ma differente valore di molteplicità di spin e di accoppiamento spin-orbita. Sia sul 1S_0 che sul 3S_1 gli elettroni stanno in orbitali differenti ma nel termine dove la molteplicità è un tripletto (3) gli spin sono paralleli mentre nel caso in cui la molteplicità è un singoletto (1) gli elettroni stanno con spin antiparallelo. Tuttavia l'interazione di scambio fra gli elettroni a spin parallelo fa sì che l'energetica del sistema si abbassi.

Se invece l'elettrone starebbe su un orbitale di tipo p allora ci sarebbe differenza

fra stato di singoletto e stato di tripletto, e questa è la configurazione del para-He, e allo stesso modo per questa configurazione elettronica possiamo giungere a due termini spettrali facendo le stesse considerazioni fatte per la configurazione $1s^1 2s^1$, e tali termini spettrali sono 1P_1 , 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 . I differenti valori di J sono dovuti al fatto che l'elettrone può subire tre tipi di accoppiamento spin-orbita, e ciò è dovuto al fatto che L ed S sono vettori, non scalari, quindi occorre considerare tre tipi di possibili somme:

- L e S con stessa direzione quindi la somma vettoriale J si rafforza ed è $J=1+1=2$
- L e S con direzione opposta quindi la somma vettoriale J si annulla in questo caso perché i massimi valori sono $L=1$ e $S=1$ quindi $J=L-S=0$
- L e S con direzioni intermedie quindi la somma vettoriale J oltre ai valori L ed S dipende da un angolo formato tra L ed S e in questo caso con $L=1$ e $S=0$ $J=1$

Se applico un campo esterno, per effetto Zeeman ottengo lo splitting di tutti i termini spettrali visti ottenendo così un ulteriore evidenziamento degli stati di tripletto e ottenendo ulteriori stati con valori M_J che variano da $-J$ a $+J$.

2.4 La Classificazione dei microstati: Le regole di Hund

Generalmente il numero dei modi distinti di distribuire N elettroni in M orbitali di spin appartenenti allo stesso stato elettronico, quindi a orbitali equivalenti, è dato da:

$$\frac{M!}{N!(M-N)!}$$

Ciascuno degli stati designati tramite un simbolo di termine corrisponde ad una funzione d'onda determinata che è una autofunzione di \widehat{L}^2 e \widehat{S}^2 e ciascun termine (stato) corrisponde ad una certa energia. I vari stati vengono quindi ordinati secondo tre regole empiriche formulate da Hund. Le regole sono le seguenti:

- 1 Lo stato col maggior valore di S è quello più stabile (possiede la minor energia), e diminuendo S la stabilità diminuisce (S è il momento angolare totale di spin)
- 2 Per più stati con stesso valore di S, risulterà più stabile quello stato col massimo valore di L.
- 3 Se i vari stati possiedono stessi valori di S ed L, allora, per una configurazione elettronica che riempie meno della metà degli orbitali alla stessa energia, lo stato col più piccolo valore di J sarà il più stabile, mentre per una configurazione elettronica che riempie più della metà degli orbitali alla stessa energia, lo stato col più grande valore di J sarà il più stabile.

Tali regole permettono di determinare i termini spettrali solo per lo stato fondamentale.

2.5 Ricavo dei termini spettrali da Z=1 a Z=10

Idrogeno (H) (Z=1)

La configurazione elettronica per l'atomo di idrogeno è $1s^1$ quindi $l=0$, per analogia $L=0$ e il termine spettrale è S. La molteplicità di spin $2S+1$ dove $S=\frac{1}{2}$ quindi $2 * \frac{1}{2} + 1 = 2$ e l'accoppiamento spin-orbita risultante J è $J=L+S=0 + \frac{1}{2}=\frac{1}{2}$. Il termine spettrale risultante è:

$${}^2S_{\frac{1}{2}}$$

Elio (He) (Z=2)

La configurazione elettronica per l'elio è $1s^2$ quindi $l=0$, per analogia $L=0$ e il termine spettrale è S. La molteplicità di spin è 1 perché gli elettroni sono appaiati a spin antiparallelo quindi $S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ e il valore dell'accoppiamento spin-orbita è $J=L+S=0$. Il termine spettrale risultante è:

$1S_0$

Litio (Li) (Z=3)

Per il litio la configurazione elettronica è $1s^2 2s^1$, quindi $l=0$, per analogia $L=0$ e il termine spettrale è S. La molteplicità di spin è $2S+1$ dove $S=\frac{1}{2}$ quindi $2 * \frac{1}{2} + 1 = 2$ e l'accoppiamento spin-orbita risultante J è $J=L+S=0 + \frac{1}{2}=\frac{1}{2}$. Il termine spettrale risultante è:

$${}^2S_{\frac{1}{2}}$$

Berillio (Be) (Z=4)

Per il berillio la configurazione elettronica è $1s^2 2s^2$, quindi $l=0$, e per analogia $L=0$ quindi il termine spettrale è S. La molteplicità di spin è 1 perché gli elettroni sono appaiati a spin antiparallelo quindi $S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ e il valore dell'accoppiamento spin-orbita è $J=L+S=0$. Il termine spettrale risultante è:

$1S_0$

Boro (B) (Z=5)

La configurazione elettronica per il boro è $1s^2 2s^2 2p^1$ e ci accorgiamo che il quinto elettrone va a finire sull'orbitale di tipo p che ha valore di $l=1$ e per analogia $L=1$ quindi il termine spettrale è L. Poiché c'è un solo elettrone con valore di $m_s = \frac{1}{2}$ quindi $S=\frac{1}{2}$, perciò la molteplicità di spin sarà $2S+1=2$. Il valore dell'accoppiamento spin-orbita J quindi può assumere valore massimo pari a $|L+S| = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ e valore minimo pari a $|L-S| = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$, quindi i termini spettrali risultanti sono 2 in questo caso e sono: ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ e ${}^2P_{\frac{1}{2}}$.

Carbonio (C) (Z=6)

La configurazione elettronica per il carbonio è $1s^2 2s^2 2p^2$ perché sono 6 elettroni da sistemare. $1s^2 2s^2$ sono livelli energetici chiusi quindi non vengono tenuti in considerazione per quanto riguarda i termini spettrali, ma i due elettroni che stanno sugli orbitali di tipo p possono avere diversi microstati della configurazione, e possono essere raggruppati mediante i termini spettrali. Gli elettroni

sull'orbitale p hanno ogni uno $l=1$ e i valori di m_l che vanno da -1 a $+1$ quindi sono $-1,0,+1$, perciò per ogni elettrone posso avere $2L+1$ valori di M_L e come tale L per ogni elettrone può assumere valori che sono $2,1,0$ (dal valore massimo di L al valore minimo) e tali valori sono risultato della somma di L in 3 casi possibili che gli elettroni possono trovarsi, ovvero:

- $L=m_{l_1} + m_{l_2} = 1 + 1 = 2$
- $L=m_{l_1} + m_{l_2} = 1 + 0 = 1$
- $L=m_{l_1} + m_{l_2} = 1 - 1 = 0$

In oltre i due elettroni possono essere:

- appaiati quindi con $S=0$ e perciò con molteplicità di spin $2S+1=1$ (Singoletto)
- paralleli quindi con $S=1$ e perciò con molteplicità di spin $2S+1=3$ (Tripletto)

Ma per il principio di Pauli i due elettroni non possono stare appaiati, ma sono spaiati in quanto vi sono orbitali isoenergetici degeneri a disposizione. quindi avremo il sistema con gli spin paralleli in uno stato di tripletto e i valori possibili di J sono:

- $L=2, S=1, J=L+S=3$
- $L=1, S=1, J=L+S=2$
- $L=0, S=1, J=L+S=1$

Essendo $L=2,1,0$ i termini spettrali corrispondenti a tali numeri sono D, P ed S. Se schematizziamo tutti i termini spettrali ci accorgiamo che vi saranno termini che sono uguali, quindi sono alla stessa energia e possono essere quindi raggruppati. Per cui per il sistema con 2 elettroni su un orbitale p triplamente degenero posso avere 15 microstati che vengono raggruppati in 3 set, senza che almeno un set sia ripetuto. Quindi ho:

- 5 microstati della configurazione con $L=2, M_S=0$ (perché stanno sullo stesso orbitale a spin antiparallelo) e i diversi valori di $M_L = \pm 2, \pm 1, 0$ e di conseguenza i 5 valori di accoppiamento spin-orbita J che sono $J = \pm 2, \pm 1, 0$. Tutti questi termini sono: ${}^1D_2, {}^1D_1, {}^1D_0, {}^1D_{-1}, {}^1D_{-2}$ e quindi il termine spettrale che li rappresenta è 1D .
- 9 microstati della configurazione con $L=1, M_L = \pm 2, \pm 1, 0, M_S = 1$, (perché possono stare a spin parallelo proprio perché stanno in orbitali diversi) sistema perciò con molteplicità $2S+1=3$ e con valori possibili di accoppiamento spin-orbita sono $J = \pm 2, \pm 1, 0$. Essendo $L=1$ il termine spettrale da prendere in considerazione per analogia è P, quindi questi nove microstati possono essere raggruppati tramite questi termini spettrali: 5 microstati rappresentati da 3P_2 che sono i microstati più stabili tra quelli in P, 3 microstati rappresentati da 3P_1 e 1 microstato rappresentato da 3P_0 .

- 1 microstato della configurazione con $L=0$, $M_S=0$, molteplicità di spin $2S+1=1$ e con valore di accoppiamento spin-orbita $J=0$. Essendo $L=0$ per analogia il termine spettrale da prendere in considerazione è S e quindi il termine in tutto è uno solo: 1S_0 .

Seguendo le tre regole di Hund il valore più stabile tra tutti i termini spettrali è:

$3P_0$

Dall'azoto al neon Per tali sistemi valgono atomici le stesse considerazioni fatte per i vari casi precedentemente.

Ricordiamo che la regola di Hund, e tali termini spettrali valgono SOLO per lo stato fondamentale.

3 Utilità dei termini spettrali

I simboli di termine atomico o termini spettrale, come li abbiamo chiamati, vengono chiamati in aiuto durante la spettroscopia, perché le linee spettrali atomiche possono essere assegnate a transizioni tra stati che vengono descritti tramite i simboli di termine atomici. I valori calcolati teoricamente, in oltre, sono in ottimo accordo con i dati sperimentali ottenuti per mezzo di spettroscopia UV/VIs.