



Χημεία 1^{ου} Εξαμήνου Σχολή Μεταλλειολόγων – Μεταλλουργών Μηχανικών

Ακαδημαϊκό Έτος 2025-26

Διάλεξη 4 – Κβαντική Θεωρία του Ατόμου (Μέρος 2^ο)

Το Αδιέξοδο:

Το ατομικό μοντέλο του Bohr είναι λάθος και δεν μπορούμε να έχουμε μια εξίσωση που να προσδιορίζει με ακρίβεια τη θέση και την ενέργεια των ηλεκτρονίων οποιουδήποτε ατόμου (Αρχή της Απροσδιοριστίας).

Αν ο δρόμος δεν υπάρχει, θα τον δημιουργήσουμε

How have our ideas about atoms changed over the years? This graphic looks at atomic models and how they developed.

Solid sphere model



John Dalton



1803

Plum pudding model



J.J. Thomson



1904

Nuclear model

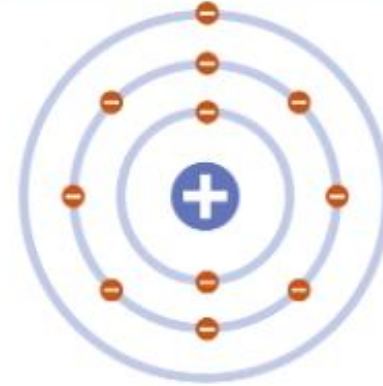


Ernest Rutherford



1911

Planetary model



Niels Bohr



1913

Quantum model



Erwin Schrödinger



1926

Πώς ανοίχτηκε ο δρόμος προς το κβαντικό μοντέλο του ατόμου;

Μοντέλο Bohr

- Τα e^- κινούνται πάνω σε κβαντισμένες ενεργειακές τροχιές
- Η σωματιδιακή φύση του φωτός εξηγεί τα ατομικά φάσματα

Υπόθεση De Broglie

- Το e^- συμπεριφέρεται σαν κύμα
- Όλα τα υλικά σωματίδια έχουν κυματικές ιδιότητες.

Αρχή της Απροσδιοριστίας

- Δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε με ακρίβεια τη θέση ενός και την ταχύτητα ενός σωματιδίου

1923

1926

1913

1924

1927

Πείραμα Compton

- Πειραματική επιβεβαίωση της ορμής του φωτονίου

Εξίσωση Schrödinger

- Τα e^- περιφέρονται γύρω από τον πυρήνα σαν κύματα.
- Δεν μπορούμε να μιλάμε για τροχιές αλλά «νέφη πιθανοτήτων» που αναμένεται να βρούμε ηλεκτρόνια

Η Εξίσωση Schrödinger για το άτομο του Υδρογόνου

Χαρακτηριστικά της Εξίσωσης

Σε τι διαφέρει από το μοντέλο Bohr

Είναι συνεπής με τη κυματική φύση της ύλης (υπόθεση De Broglie).

Είναι συνεπής με την Αρχή της Απροσδιοριστίας.

Τι νέο εισάγει;

Αντιμετωπίζει τα e^- σαν υλικά κύματα. Οι συναρτήσεις που περιγράφουν τις κινήσεις των e^- είναι κυματικές συναρτήσεις ή **κυματοσυναρτήσεις (wave functions)**.

Το τετράγωνο μιας κυματοσυνάρτησης εκφράζει την **πυκνότητα πιθανότητας (probability density)**, δηλαδή πόσο πιθανό είναι να βρούμε το e^- σε μια μικρή περιοχή του χώρου γύρω από τον πυρήνα.

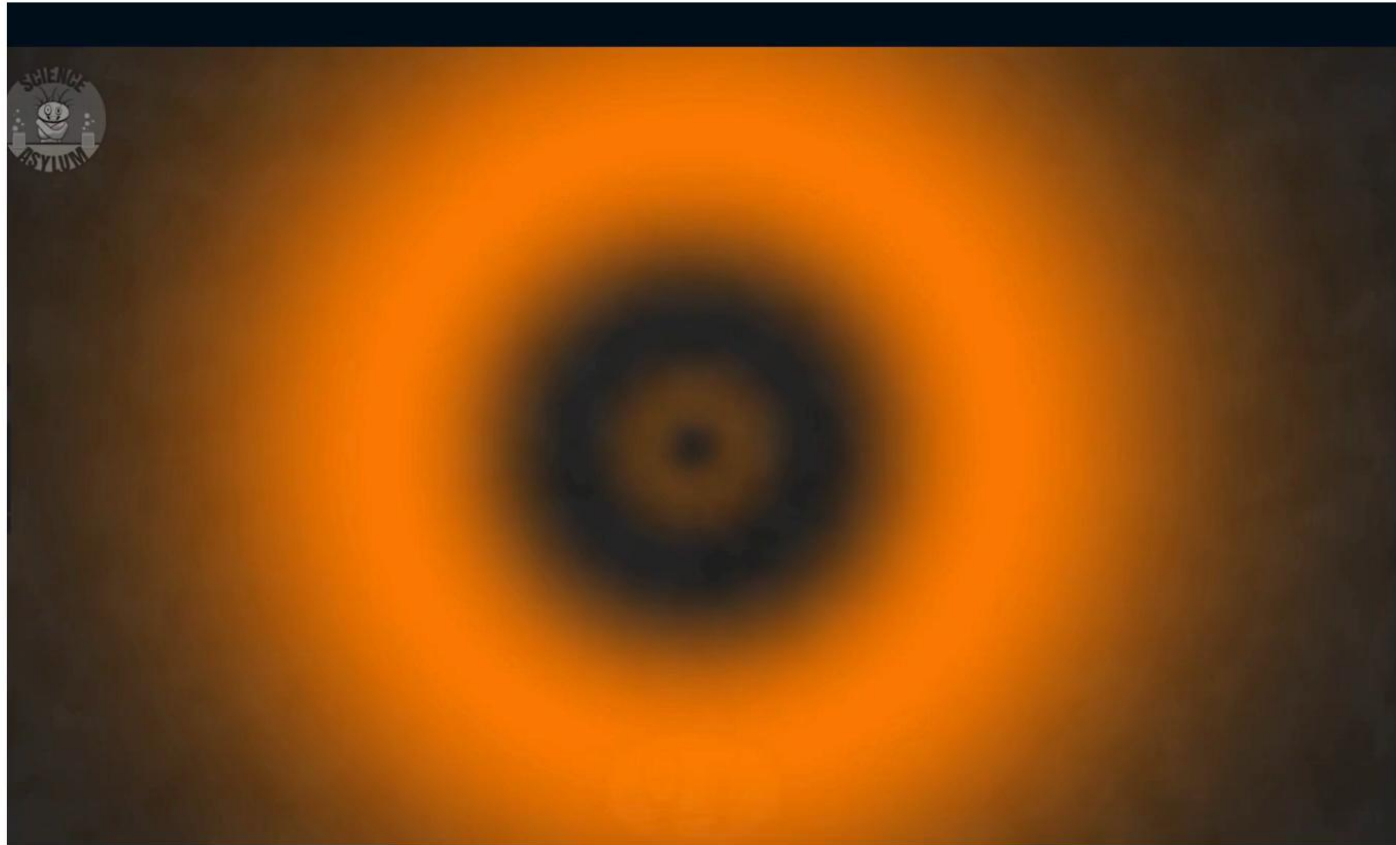
Τι διατηρεί από το μοντέλο Bohr;

Όταν επιλύουμε την εξίσωση Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου βρίσκουμε ότι η ενέργεια του e^- λαμβάνει τιμές από ένα σύνολο διακριτών τιμών που είναι ακριβώς το ίδιο σαν αυτό που προβλέπεται από το μοντέλο Bohr. Δηλαδή, η ενέργεια του e^- είναι κβαντισμένη και λαμβάνει μόνο τις τιμές που προβλέπονται από την εξίσωση (3.5) που είδαμε στην προηγούμενη διάλεξη.

Κεντρική Ιδέα No.5

Στην κβαντικό μοντέλο του ατόμου η έννοια της τροχιάς αντικαθίσταται από την έννοια του τροχιακού (orbital). Τα τροχιακά είναι περιοχές του χώρου που είναι πιο πιθανό να βρίσκεται ένα e^- (είναι δηλαδή σύνολα πιθανότητας των ενδεχόμενων θέσεων του e^-).

Τα τροχιακά είναι περιοχές!



Τα τροχιακά είναι περιοχές ενέργειας!

Τα τροχιακά έχουν παρόμοια σημασία με τις ενεργειακές στάθμες του ατόμου Bohr, δηλαδή είναι χώροι που επιτρέπεται να καταλαμβάνουν τα e^- και αντιστοιχούν σε συγκεκριμένες τιμές ενέργειας.

Η εξίσωση Schrödinger είναι μια κυματική μορφή της αρχής διατήρησης της ενέργειας.

Δηλώνει ότι η ολική ενέργεια ενός κβαντικού σωματιδίου (κινητική + δυναμική) διατηρείται — όπως και στη κλασική μηχανική — αλλά αντί να περιγράφει τη θέση και την ταχύτητα του σωματιδίου, περιγράφει τη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, t)$, που εκφράζει την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε ένα σημείο του χώρου και χρόνου.

Εξίσωση Schrödinger – Μια απλοποιημένη προσέγγιση

- Βήμα 1^ο: Αρχή διατήρησης ενέργειας (Κλασική Μηχανική)

Στην κλασική μηχανική γράφουμε:

$$E = KE + PE = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (4.1)$$

Όπου E η ολική ενέργεια, p η ορμή, m η μάζα του σωματιδίου και $V(x)$ η δυναμική ενέργεια.

- Βήμα 2^ο: Εισάγουμε τον κυματικό/σωματιδιακό δυισμό

Σύμφωνα με την κβαντομηχανική:

1. Κάθε σωματίδιο συμπεριφέρεται και ως κύμα, που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, t)$
2. Η ορμή και η ενέργειά του συνδέονται με τις κυματικές ιδιότητες μέσω των σχέσεων:

$$p = \hbar k \quad (4.2)$$

$$E = \hbar \omega \quad (4.3)$$

Εξίσωση Schrödinger – Μια απλοποιημένη προσέγγιση

Η σχέση (4.2) προκύπτει απ' ευθείας από την Υπόθεση De Broglie: Κάθε σωματίδιο με ορμή p συμπεριφέρεται σαν να σχετίζεται με ένα κύμα μήκους κύματος λ . Μάλιστα μπορούμε να υπολογίσουμε το μήκος κύματος του σωματιδίου από τη σχέση:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.12)$$

Όπου h η σταθερά Planck.

Είδαμε στην προηγούμενη ενότητα ότι σύμφωνα με την υπόθεση De Broglie η κίνηση των e^- περιγράφεται από στάσιμα υλικά κύματα και αναγνωρίσαμε ότι για να μπορέσει ένα e^- να βρεθεί σε μια επιτρεπόμενη ενεργειακά «θέση» πρέπει να έχει μήκη κύματος που «χωρούν» σε αυτή. Σε κάθε περίπτωση η «θέση» αυτή έχει ένα μήκος και ορίζω μια νέα ποσότητα, τον **κυματικό αριθμό** k που δείχνει πόσες κυματικές ταλαντώσεις χωρούν ανά μονάδα μήκους.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Εξίσωση Schrödinger – Μια απλοποιημένη προσέγγιση

Επιστρέφοντας στη Σχέση De Broglie, η ορμή p εκφράζεται ως:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Αν πολλαπλασιάσω και διαιρέσω με 2π , έχω

$$p = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{2\pi}{2\pi} \xrightarrow{k=\frac{2\pi}{\lambda}} p = k \frac{h}{2\pi} = k\hbar$$

Όπου $\hbar$ η ανηγμένη σταθερά του Planck.

Η σχέση (4.3) προκύπτει απ' ευθείας από τη σχέση Planck–Einstein για την ενέργεια:

Οι Planck και Einstein έδειξαν ότι η ενέργεια ενός φωτονίου σχετίζεται με τη συχνότητά του (ν) μέσω της σχέσης:

$$E = h\nu$$

Εξίσωση Schrödinger – Μια απλοποιημένη προσέγγιση

Χρησιμοποιώντας τη σχέση μεταξύ γωνιακής συχνότητας και γραμμικής συχνότητας ($\omega = 2\pi\nu$), έχουμε:

$$E = h\nu = \frac{h\omega}{2\pi} = \hbar\omega$$

Όπου $\hbar$ η ανηγμένη σταθερά του Planck.

Ο De Broglie επέκτεινε αυτή τη σχέση και στα σωματίδια ύλης, προτείνοντας ότι **κάθε σωματίδιο με ενέργεια E συμπεριφέρεται σαν κύμα με γωνιακή συχνότητα ω .**

- **Βήμα 3^ο: Αντικατάσταση με τελεστές**

Ένας **τελεστής** είναι μια *μαθηματική εντολή* που μας λέει τι να **κάνουμε** σε μια συνάρτηση. Είναι σαν ένα «πρόγραμμα» που δρα πάνω σε μια συνάρτηση και δίνει ως αποτέλεσμα μια άλλη συνάρτηση.

Στην κβαντομηχανική που δεν μπορούμε να γνωρίζουμε με ακρίβεια ταυτόχρονα τις ποσότητες p και E . Τις αντικαθιστούμε λοιπόν με **τελεστές** που δρουν πάνω στην κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, t)$ και μετασχηματίζουν τις εκφράσεις τους:

Εξίσωση Schrödinger – Μια απλοποιημένη προσέγγιση

Έτσι έχουμε τον τελεστή (κανόνα) για την Ενέργεια και για την Ορμή:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$
$$p^2 \rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Οι τελεστές αυτοί προκύπτουν από την ανάλυση που κάναμε στο προηγούμενο βήμα.

Ένα κύμα ταλαντώνεται στο χρόνο και το χώρο σύμφωνα με μια σχέση της μορφής

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

Δηλαδή το κύμα ταλαντώνεται στο χώρο σε αναλογία με τον κυματικό αριθμό k και στο χρόνο σε αναλογία με τη γωνιακή του συχνότητα ω . Οι παράγωγοι στο χώρο και το χρόνο δίνουν:

$$\text{Χρονική Παράγωγος: } \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi \quad \text{Χωρική Παράγωγος: } \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi$$

Εξίσωση Schrödinger – Μια απλοποιημένη προσέγγιση

Αντικαθιστώντας τα πάντα στην εξίσωση (4.1) έχουμε:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi \quad (4.4)$$

Αυτή είναι η χρονικά εξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger σε μία διάσταση. Η εξίσωση μπορεί να διαβαστεί ως εξής:

«Η μεταβολή της κυματοσυνάρτησης με το χρόνο (αριστερά) ισούται με τη δράση του τελεστή ολικής ενέργειας πάνω στην κυματοσυνάρτηση (δεξιά).»

Το δεξί μέλος εκφράζει το άθροισμα κινητικής και δυναμικής ενέργειας, ακριβώς όπως στην κλασική εξίσωση διατήρησης της ενέργειας — μόνο που εδώ εφαρμόζεται στο κύμα πιθανότητας του σωματιδίου. Έτσι, η εξίσωση Schrödinger εκφράζει τη διατήρηση της ενέργειας, όχι με αριθμούς, αλλά με τον τρόπο που εξελίσσονται οι κατανομές πιθανοτήτων στο χώρο και το χρόνο.

Κβαντικοί Αριθμοί

- Καθώς οι κυματοσυναρτήσεις της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου είναι τρισδιάστατες, εξαρτώνται από τρεις κβαντικούς αριθμούς που παίρνουν τα αρχικά n , l και m_l .

Κβαντικός Αριθμός	Τι ορίζει;	Τι τιμές παίρνει;
Κύριος (n)	- Για το άτομο του υδρογόνου (μοντέλο Bohr), καθορίζει πλήρως την ενέργεια ενός τροχιακού. Για άτομα πολλών ηλεκτρονίων θα υπάρχει μια διαφοροποίηση. - Σχετίζεται και με τη μέση απόσταση ενός ηλεκτρονίου από τον πυρήνα. Όσο μεγαλύτερη η τιμή, τόσο μεγαλύτερη η απόσταση από τον πυρήνα.	$n=1, 2, 3, 4, \dots$

Κβαντικοί Αριθμοί

Κβαντικός Αριθμός	Τι ορίζει;	Τι τιμές παίρνει;										
Κβαντικός αριθμός της στροφορμής (ℓ)	- Σχετίζεται με το «σχήμα» του τροχιακού. - Οι τιμές του εξαρτώνται από τις τιμές του κύριου κβαντικού αριθμού n. - Η τιμή του ℓ σχετίζεται με γράμματα ως ακολούθως <table><tr><td>ℓ</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr><tr><td>Name of orbital</td><td>s</td><td>p</td><td>d</td><td>f</td></tr></table> - Τροχιακά με την ίδια τιμή n καλούνται φλοιοί (shells) και τροχιακά με την ίδια τιμή n και ℓ υποφλοιοί (subshells). Πχ. ο φλοιός με $n=2$ έχει δύο υποφλοιούς με $\ell=0$ και $\ell=1$.	ℓ	0	1	2	3	Name of orbital	s	p	d	f	$\ell=0...(n-1)$ πχ. Για $n=1$, $\ell=0$ ενώ για $n=3$, $\ell=0, 1, 2$
ℓ	0	1	2	3								
Name of orbital	s	p	d	f								
Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ)	- Περιγράφει τον προσανατολισμό του τροχιακού στο χώρο. - Εντός του ίδιου υποφλοιού, η τιμή του m_ℓ εξαρτάται από την τιμή του ℓ. Για κάθε ℓ υπάρχουν $2\ell+1$ ακέραιες τιμές του m_ℓ, ως ακολούθως: $-\ell, (-\ell + 1), \dots 0, \dots (+\ell - 1), +\ell$	$m_\ell=-\ell, (-\ell+1)...0...(\ell+1), \ell$ πχ. Για $\ell=0$, $m_\ell=0$ ενώ για $\ell=2$, $m_\ell=-2, -1, 0, 1, 2$										

Κβαντικοί Αριθμοί – Επιτρεπόμενοι Συνδυασμοί

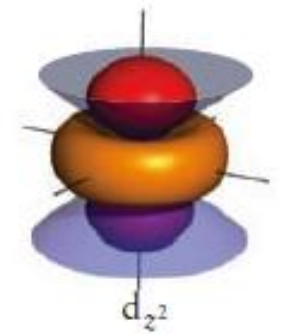
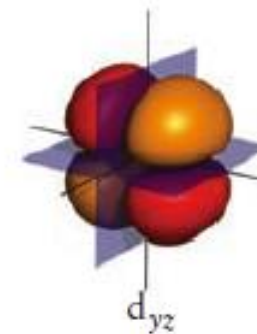
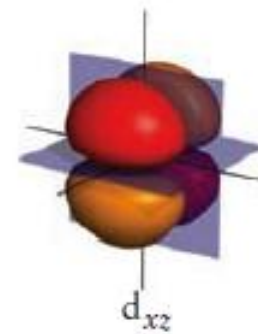
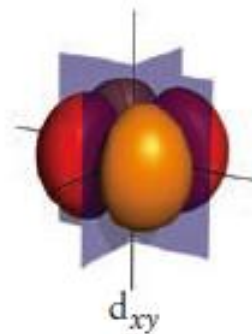
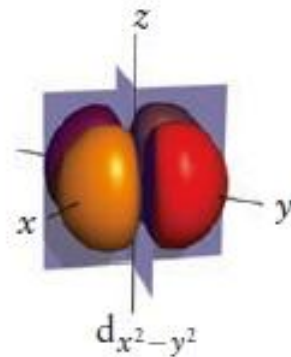
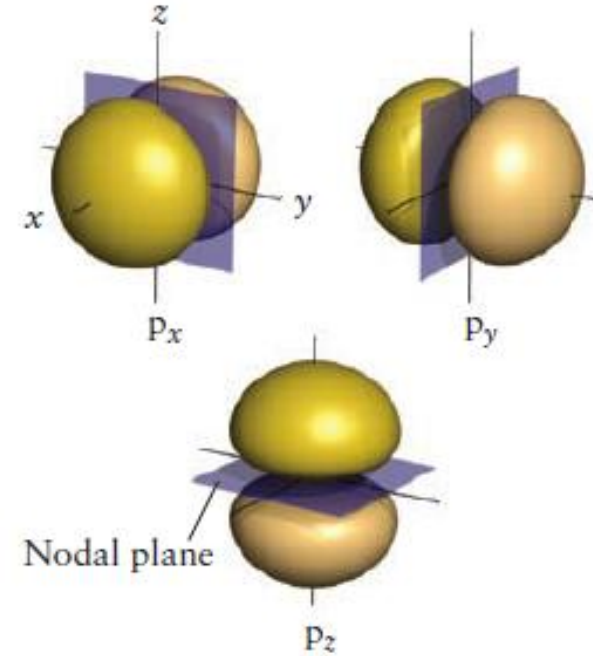
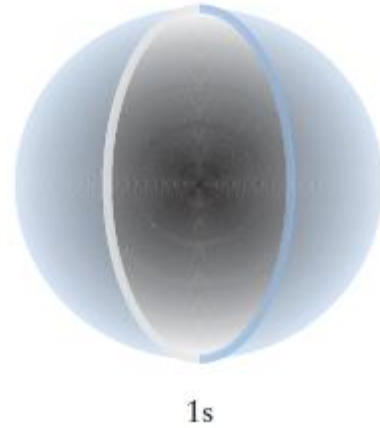
n	ℓ	m_ℓ	Αριθμός τροχιακών	Συμβολισμός τροχιακών
1	0	0	1	$1s$
2	0	0	1	$2s$
	1	-1, 0, 1	3	$2p_x, 2p_y, 2p_z$
3	0	0	1	$3s$
	1	-1, 0, 1	3	$3p_x, 3p_y, 3p_z$
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	$3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz},$ $3d_{x^2-y^2}, 3d_{z^2}$
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.

Κβαντικοί Αριθμοί – Είναι συναρτήσεις!

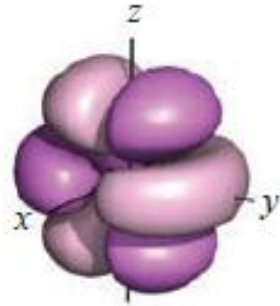
TABLE 2.1 Hydrogenlike Wavefunctions* (Atomic Orbitals), $\psi = RY$

(a) Radial wavefunctions			(b) Angular wavefunctions		
n	l	$R_{nl}(r)$	l	" m_l " [†]	$Y_{lm_l}(\theta, \phi)$
1	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	1	x	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$
2	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	1	y	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$
3	0	$\frac{2}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(3 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{9a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$	1	z	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
3	1	$\frac{2}{9\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right) e^{-Zr/3a_0}$	2	xy	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$
3	2	$\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$	2	yz	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \sin \phi$
			2	zx	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \cos \phi$
			2	$x^2 - y^2$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$
			2	z^2	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$

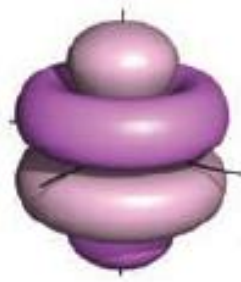
Κβαντικοί Αριθμοί – Καθορίζουν περιοχές



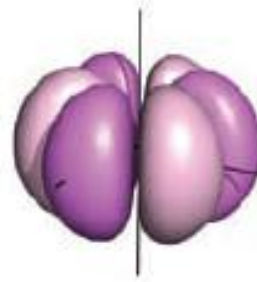
Κβαντικοί Αριθμοί – Καθορίζουν περιοχές



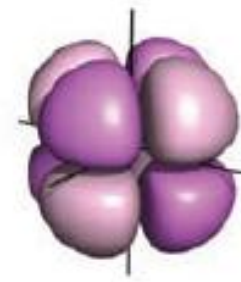
$$f_{5yz^2-yr^2}$$



$$f_{5z^3-3zr^2}$$



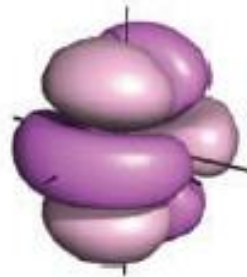
$$f_{x^3-3xy^2}$$



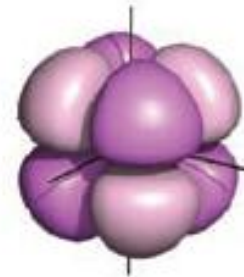
$$f_{zx^2-zy^2}$$



$$f_{y^3-3yx^2}$$



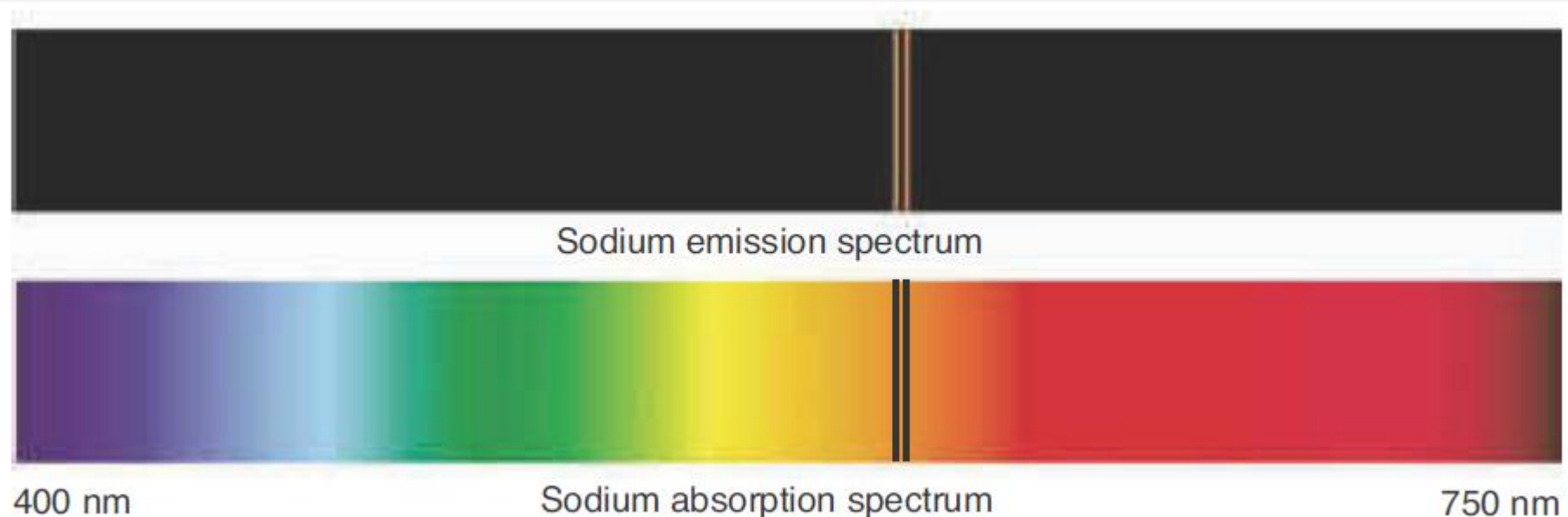
$$f_{5xz^2-xr^2}$$



$$f_{xyz}$$

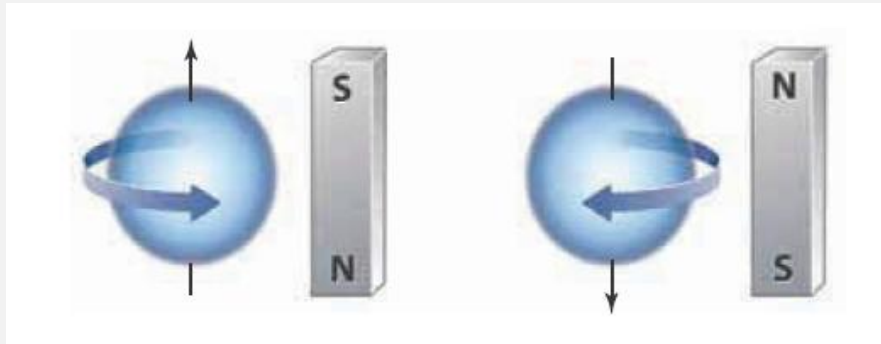
Κβαντικός αριθμός του Spin

- Όταν παρουσιάστηκε για πρώτη φορά, η εξίσωση αυτή εξηγούσε ένα μεγάλο πλήθος πειραματικών δεδομένων, ωστόσο ορισμένες μεμονωμένες παρατηρήσεις δεν ταίριαζαν πλήρως στην εικόνα. Για παράδειγμα, προσεκτική εξέταση ορισμένων φασματικών γραμμών ατόμων δείχνει ότι στην πραγματικότητα αποτελούνται από δύο πολύ κοντινές γραμμές, όπως οι δύο γραμμές στα 589,0 nm και 589,6 nm στο ατομικό φάσμα του νατρίου.



Κβαντικός αριθμός του Spin

- Το 1926, ο Γερμανός φυσικός Βόλφγκανγκ Πάουλι υποστήριξε ότι αυτός ο διαχωρισμός θα μπορούσε να εξηγηθεί αν το ηλεκτρόνιο υπήρχε σε δύο διαφορετικές καταστάσεις. Λίγο αργότερα, οι Uhlenbeck και Goudsmit, ταύτισαν αυτές τις δύο διαφορετικές καταστάσεις με μια ιδιότητα που ονομάζεται **εγγενές σπιν του ηλεκτρονίου** – σαν το ηλεκτρόνιο να μπορούσε κυριολεκτικά να περιστρέφεται γύρω από τον άξονά του προς μία από δύο κατευθύνσεις.



- Πρέπει να τονιστεί ότι η έννοια του σπιν αποτελεί **κλασική αναλογία**. Το ηλεκτρόνιο, όπως περιγράφεται από την κβαντική θεωρία, **δεν περιστρέφεται φυσικά**. Αντίθετα, οι δύο καταστάσεις που περιγράφονται με τον όρο «σπιν» προκύπτουν λόγω **σχετικιστικών φαινομένων** που δεν περιλαμβάνονται στην αρχική εξίσωση Schrödinger.

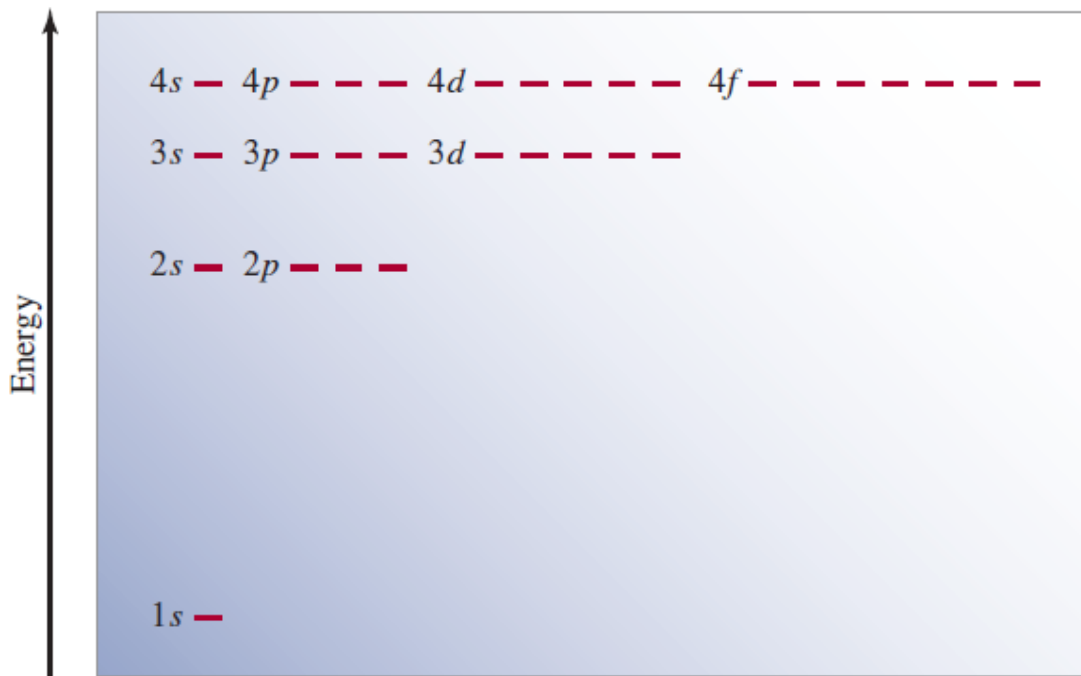
Κβαντικός αριθμός του Spin

Κβαντικός Αριθμός	Τι ορίζει;	Τι τιμές παίρνει;
Κβαντικός αριθμός του spin (m_s)	- Τα ηλεκτρόνια γύρω από το άτομο συμπεριφέρονται σαν μικροσκοπικοί μαγνήτες. Αυτό συμβαίνει γιατί έχουν μια ιδιοπεριστροφή και σύμφωνα με την κλασική Η/Μ θεωρία κάθε περιστρεφόμενο φορτίο παράγει ένα μαγνητικό πεδίο. - Για αυτό το λόγο είναι υποχρεωτική η εισαγωγή ενός τέταρτου κβαντικού αριθμού για την πλήρη περιγραφή της κβαντικής κατάστασης ενός ηλεκτρονίου.	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

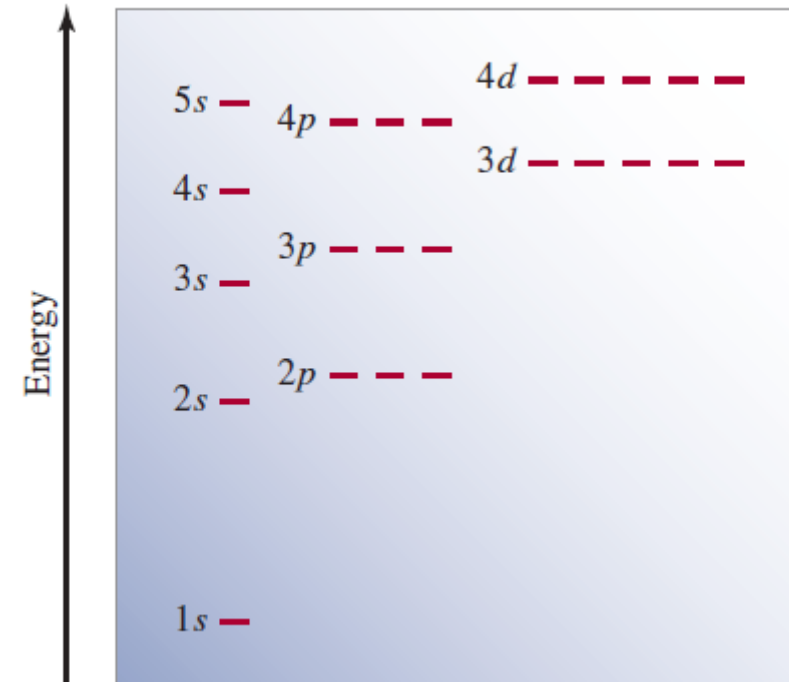
Δόμηση Πολυηλεκτρονικών Ατόμων



Διαφορά του H από τα πολυηλεκτρονικά άτομα

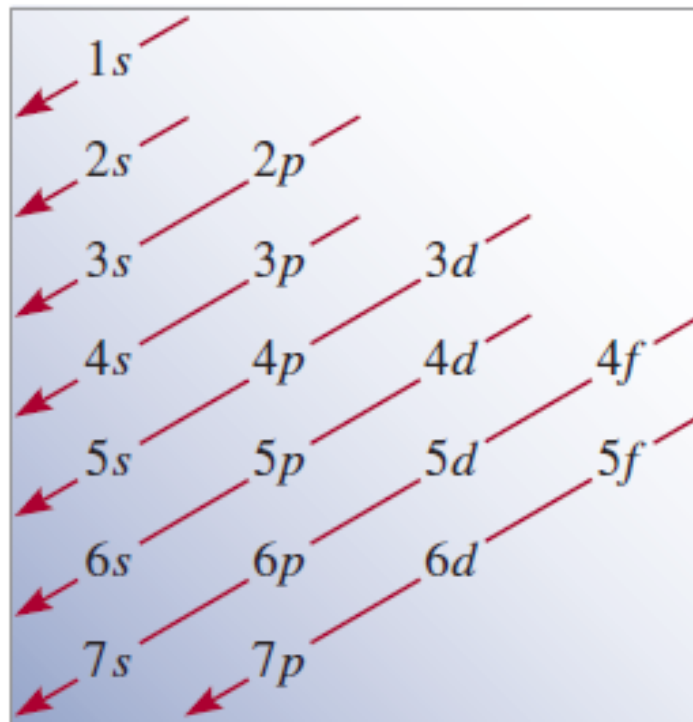


Διάγραμμα ενεργειακών επιπέδων για το Υδρογόνο
– Ενεργειακά επίπεδα εξαρτώνται μόνο από την τιμή του n .



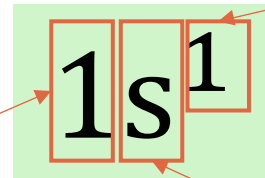
Διάγραμμα ενεργειακών επιπέδων για πολυηλεκτρονικά άτομα – Ενεργειακά επίπεδα εξαρτώνται μόνο από την τιμή του n και του l .

Ενέργειες ατομικών τροχιακών – Μνημονικός κανόνας διαγωνιών



Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Σημειολογία

Σημειώνει τον αριθμό των ηλεκτρονίων στο τροχιακό (ή υποφλοιό)



Σημειώνει τον κύριο κβαντικό αριθμό n

Σημειώνει τον κβαντικό αριθμό της στροφορμής ℓ

Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Διαγραμματική απεικόνιση

Το στοιχείο του οποίου την ηλεκτρονιακή κατανομή σχεδιάζουμε βρίσκεται στα αριστερά

H

Το κουτί αναπαριστά ένα τροχιακό



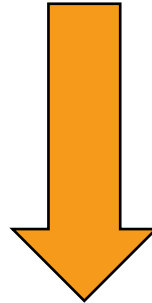
Το βέλος δείχνει τη φορά του spin.

$1s^1$

Το τροχιακό με τα ηλεκτρόνια του τοποθετούνται κάτω από το κουτί.

Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Απαγορευτική Αρχή

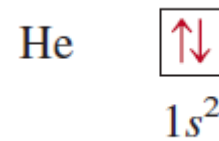
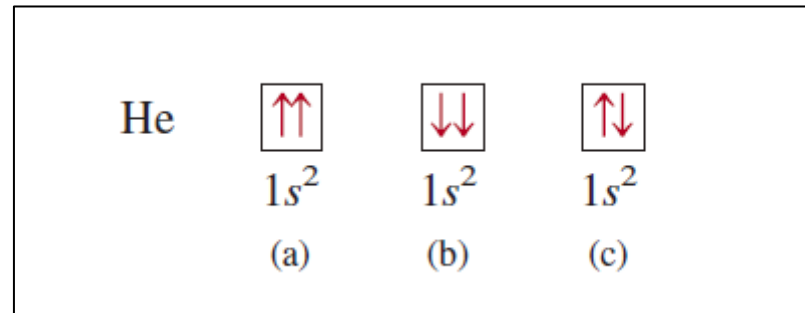
Γενική Διατύπωση: Δύο ή περισσότερα σωματίδια με spin μισού ακεραίου δεν μπορούν να καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση, σε ένα σύστημα που υπακούει στους νόμους της κβαντομηχανικής.



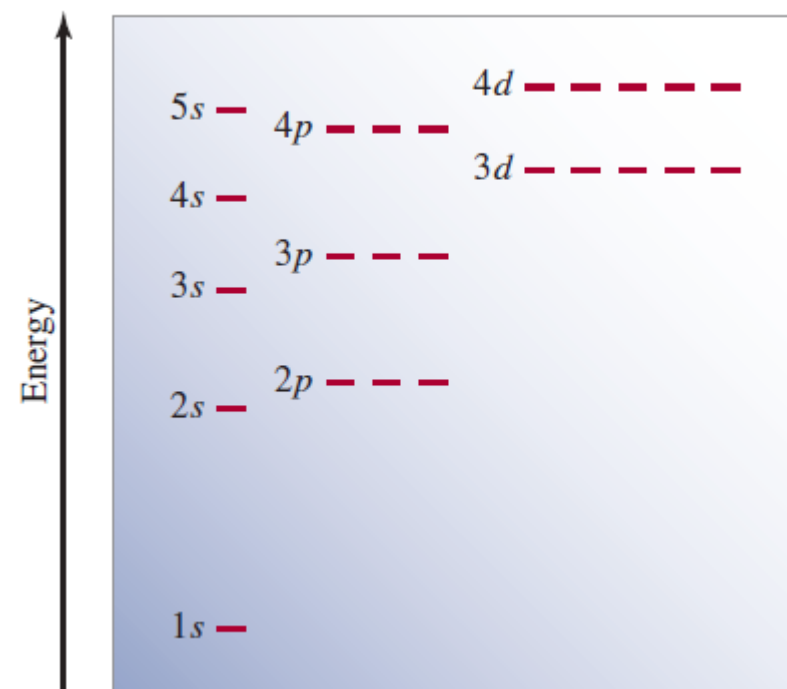
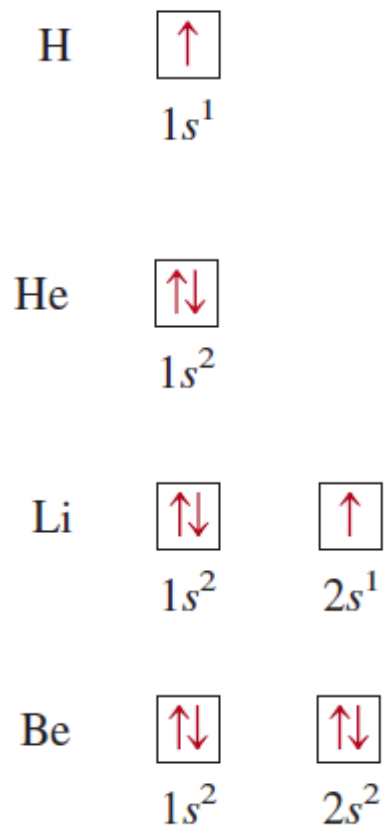
Διατύπωση για τα άτομα: Δύο ή περισσότερα ηλεκτρόνια που βρίσκονται δεσμευμένα σε ένα άτομο δεν μπορούν να χαρακτηρίζονται από τους ίδιους 4 κβαντικούς αριθμούς.

Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Απαγορευτική Αρχή

Ποια από τις παρακάτω τρεις εναλλακτικές επιλογές για το $1s^2$ υπακούει στην απαγορευτική αρχή;



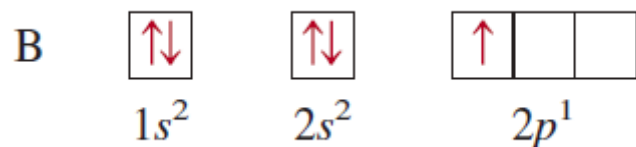
Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Συμπλήρωση μέχρι και το B



Μέχρι εδώ με τη βοήθεια της Απαγορευτικής Αρχής μπορούμε να δομήσουμε κανονικά.

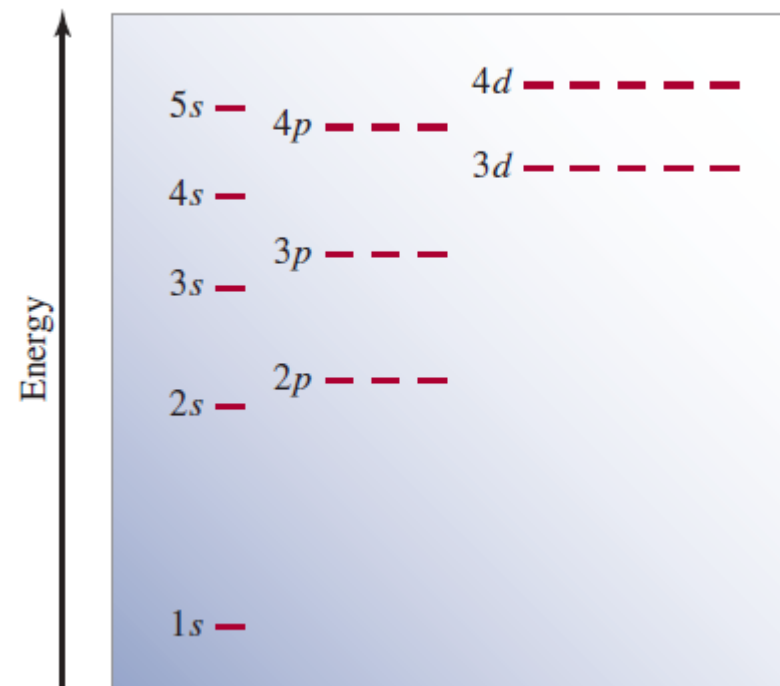
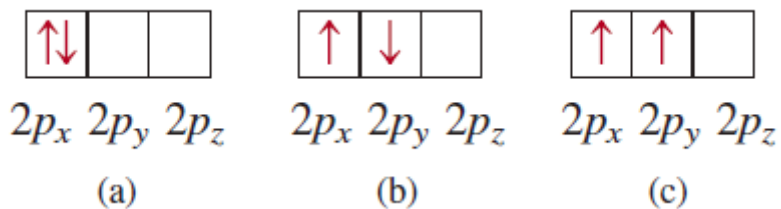
Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Κανόνας του Hund

Καθώς συμπληρώνουμε τα τροχιακά των πρώτων στοιχείων, φτάνοντας στο B έχουμε να τοποθετήσουμε ένα ηλεκτρόνιο σε ένα p τροχιακό. Επειδή είναι ισοδύναμα, δεν παίζει ρόλο σε ποιο θα το βάλουμε.



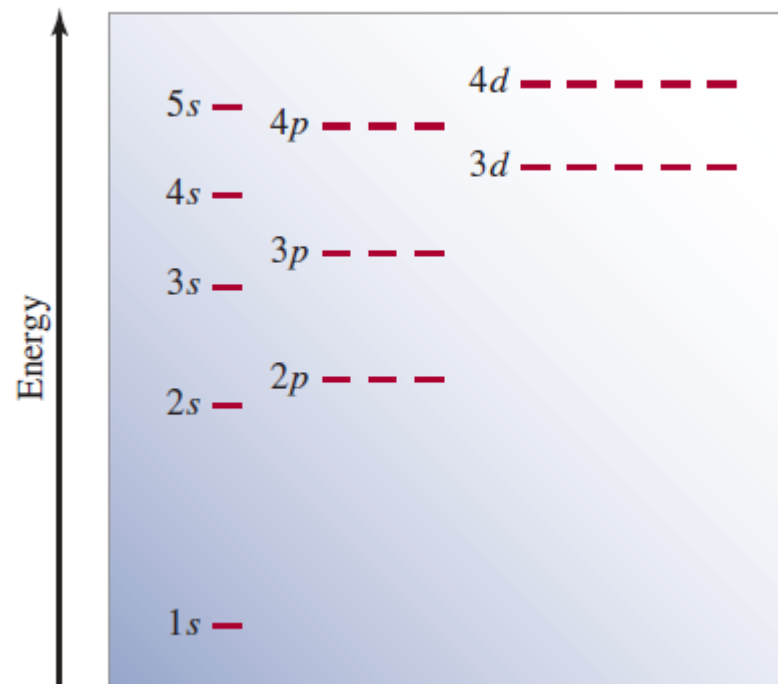
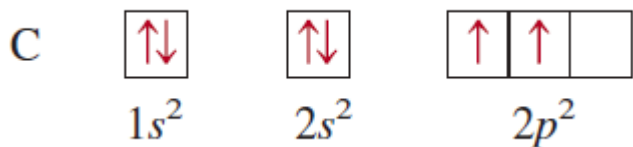
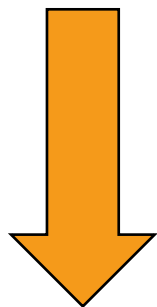
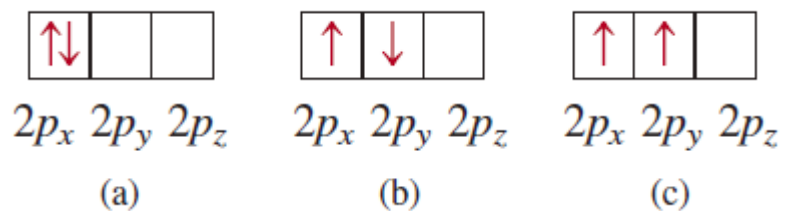
Τι κάνουμε όμως για το αμέσως επόμενο, για τον C?

1. Πρέπει να βάλουμε το δεύτερο ηλεκτρόνιο συζευγμένο ή ασύζευκτο;
2. Αν είναι ασύζευκτο με παράλληλο ή αντιπαράλληλο spin;



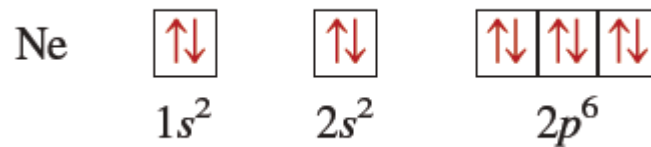
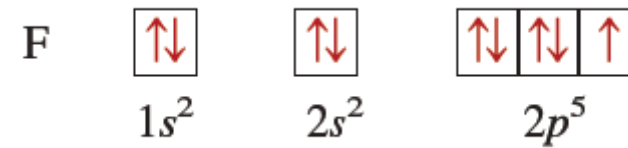
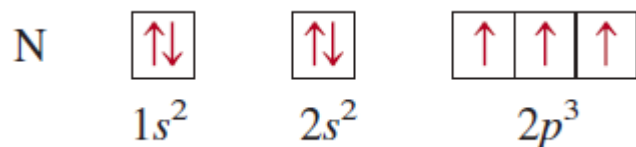
Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Κανόνας του Hund

Κανόνας του Hund: Η πιο σταθερή διάταξη των ηλεκτρονίων στους υποφλοιούς είναι αυτή με τα μέγιστο αριθμό παράλληλων spin.



Συμπλήρωση ατομικών τροχιακών – Κανόνας του Hund

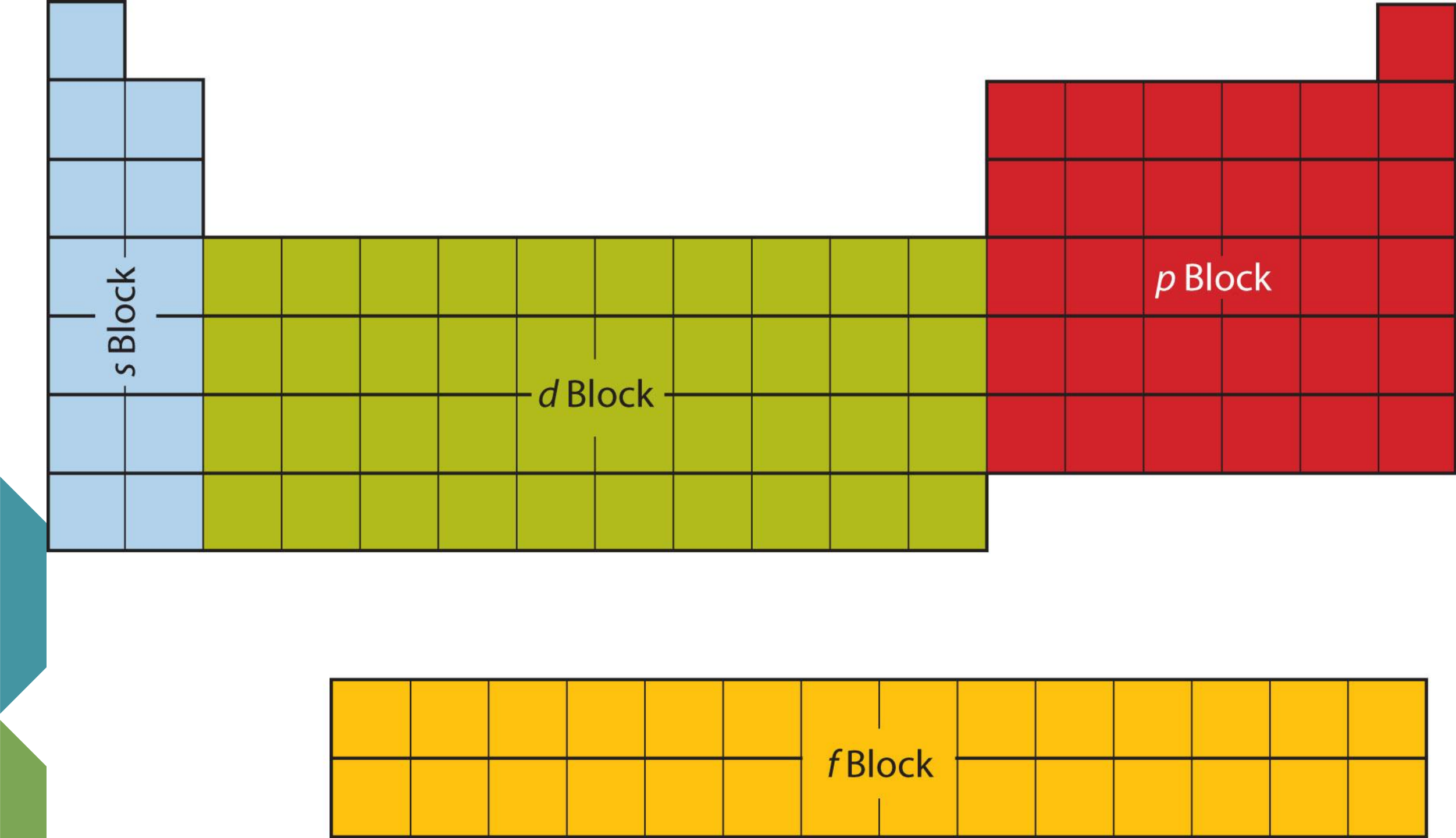
Ο Κανόνας του Hund είναι και ο τελευταίος κανόνας που χρειαζόμαστε για να οικοδομήσουμε τα στοιχεία του Περιοδικού Πίνακα.

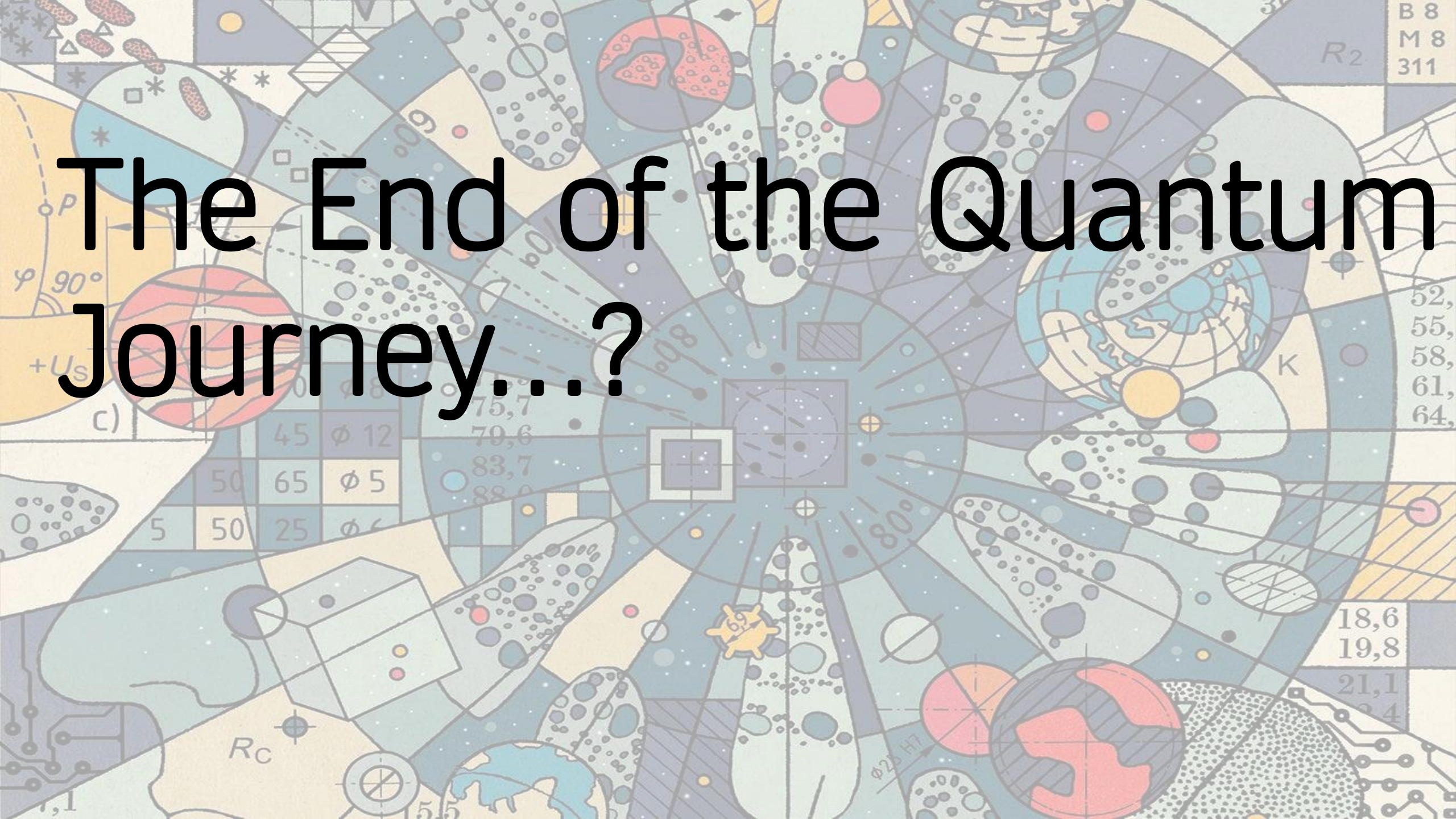


Ο Περιοδικός Πίνακας των Τροχιακών

Ο Περίοδικος Πίνακας των Χημικών																	
1 H 1s																	2 He 1s
3 Li 2s	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na 3s	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K 4s	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb 5s	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs 6s	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr 7s	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112	113	114				

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr





The End of the Quantum Journey...?