

HUNDOVA PRAVILA

Jure Brence

November 2016

V tej nalogi bomo s Hundovimi pravili obravnavali polnjenje f -orbitalne. Ta ima orbitalno vrtilno količino $l = 3$ in posledično sedem različnih projekcij vrtilne količine: $l_z \in \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$. Zaradi Paulijevega izključitvenega načela sta lahko v vsakem stanju največ dva elektrona (z nasprotnim spinom). Obravnavana orbitala lahko sprejme torej največ $D = 2(2l + 1)$ elektronov. Njihovo razporeditev po stanjih dobimo z upoštevanjem Hundovih pravil v navedenem vrstem redu.

1. $S = \sum_i S_i = \max.$

To pravilo nam pove, da se bodo najprej napolnila vsa stanja z elektroni z enakim spinom. Šele ko bodo vsa stanja polovično zapolnjena, se bodo začela polniti z elektroni z nasprotnim spinom.

2. $L = |\sum_i L_i| = \max.$

Drugo pravilo povzroči, da se stanja začnejo polniti pri enem od stanj z največjo absolutno vrednostjo orbitalne vrtilne količine in se polnijo po vrsti proti nič, ter nato naprej proti nasprotni vrednosti. Ekvivalentno je, če začnemo pri $l_z = -3$ ali $l_z = +3$.

3. $J = \begin{cases} |S - L|; & N_e \leq D/2 \\ |S + L|; & N_e > D/2 \end{cases}$

Prvi dve pravili sta dovolj, da opišemo elektronsko konfiguracijo orbitale. Zadnje pravilo nam pove še, kako izračunamo velikost skupne vrtilne količine.

Spodnja tabela prikazuje elektronsko konfiguracijo za različna števila elektronov v f -orbitali, ter velikosti skupnega spina, skupne orbitalne vrtilne količine, ter skupne vrtilne količine. V zadnjem stolpcu je še zapis stanja s spektroskopsko oznako. Pri tej velikosti orbitalne vrtilne količine označimo s črko, po ključu:

$$\begin{array}{lcccccccccc} L = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & \dots \\ & S & P & D & F & G & H & I & K & L & \dots \end{array}$$

Ne	l_z							S	L	J	$2S+1L_J$
	-3	-2	-1	0	1	2	3				
1	↑							1/2	3	5/2	$^2F_{5/2}$
2	↑	↑						1	5	4	3H_4
3	↑	↑	↑					3/2	6	9/2	$^4I_{9/2}$
4	↑	↑	↑	↑				2	6	4	5I_4
5	↑	↑	↑	↑	↑			5/2	5	5/2	$^6H_{5/2}$
6	↑	↑	↑	↑	↑	↑		3	3	0	7F_0
7	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	7/2	0	7/2	$^8S_{7/2}$
8	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	↑	3	3	6	7F_6
9	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	5/2	5	15/2	$^6H_{15/2}$
10	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	2	6	8	5I_8
11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	3/2	6	15/2	$^4I_{15/2}$
12	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	1	5	6	3H_6
13	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	1/2	3	7/2	$^2F_{7/2}$
14	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	0	0	0	1S_0