المحاضرة التاسعة أ.د. محمد احمد الكربولي

اعداد الكم The Quantum Number :

يتكون الحل(ψ) من دالتين احدهما ψ_r وتعتمد على بعد الالكترون من النواه ممثلا ب نق r وتسمى دالة الموجة radial wave function وتعتمد الاخرى ($\psi_{\phi\Theta}$)على الموقع الفراغي للالكترون ولتمثيل بقيم ϕ،Θ وتسمى دالة الموجه الزاوية angular W,f

$$\psi=\psi_{\phi\theta}\,\psi_r$$

وقد وجد ان الدالة ψ_r لها حلول مقبولة محدودة بقيم n,L فقط والدالة ψ_ϕ لها حلول مقبولة محددة بقيم m,L فقط.

والدالة ψ_ϕ لها حلول مقبولة محددة بقيم m فقط

حيث ان n,L,m اعدادكم تاخذ القيم الصحيحة المترابطة الاتيه :

N تاخذ القيم 1,2,3،..، الخ وتعرف بعدد الكم الرئيسي principal.Q.N.

L تاخذ القيم 0,1,2،.....، (n-1) ويرمز لهذه القيم الاحرف s,p,d,F,.... على التوالي.

ويعرف L بعدد الكم الثانوي Scondery Q. N.

m عدد الكم المغناطيسي magnetic Q.N.

وياخذ القيم m=+L..0...-L

اماعدا قيم m هي 2L+1 اي ان عدد قيم m تعتمد على قيم L.

When : $n = 1, L = 0 \Rightarrow (n-1)$

$L = 0 \Rightarrow (1-1) = 0$

اذا $L = 0$

$m = 2L+1, = 2x0+1 = 1$

$m = +0 \ldots 0 \ldots -0$

$m = 0$

When : $n = 2 \Rightarrow L = 0 \rightarrow (n-1)$

$L = 0 \rightarrow (2-1)$

$L = 0,1$

$L = 0 \rightarrow m = 2L+1 = 2X0+1 = 1$

$m = +L \ldots 0 \ldots -L = +0 \ldots . 0 \ldots . -0$

$m = 0$

$L = 1, m = 2L+1 = 2x1+1 = 3$

$m = +L \ldots 0 \ldots -L = +1,0,-1$

When : $n = 3, L = 0 \rightarrow (n-1)$

$L = 0 \rightarrow (3-1)$

$L = 0 \rightarrow 2$

$L=0,1,2$

$L=0 \quad m=2L+1 =2X0+1=1$

اذا $m =0$

$L=1 \rightarrow m =2L+1=2X1+1=3$

$m =+1...0...-1$

$L=2 \rightarrow m =2L+1=2x2+1=5$

$m = +L...0...-L$

$m =+2,+1,0,-1,-2$

لقد حددت قيم L بتسميات على اساس تاريخي استخدمت لوصف خطوط الطيف لذلك سميت بلحروف الطيفية لارتباطها بطيف الانبعاث الخطي وهي تمثل مستويات الطاقة .

When $L=0$, S sharp. $m =1$. $s(0)$

$L=2$ p primary $m=3$. $p(+1,0,-1)$

$L=2$ d diffuse $m =5$. $d(+2,+1,0,-1,-2)$

$L=3$ f fundamental . $m =7$. $f(\pm3,\pm2,\pm1,0)$

اي عندما $L=0$ اي الحرف S نجد ان الدالة الموجه ψ تعتمد على r فقط ويكون للحل تماثل كروي فقط حول المركز ويطلق على هذا الحل الاوربتال S

وعندما $L=0$ نجد ان $m=\pm1,0$ ونجد ان دالة الموجه ψ تعتمد على r,ϕ,θ , ويطلق على هذا النوع من الحلول الاوربتال p ويحكم قيم m الثلاثة نجد لها ثلاث حلول ممكنة

وعندما $L=2$ نجد ان $m=\pm2,\pm1,0$ وعندها تعتمد ψ على r,θ,ϕ ويطلق على هذا النوع من حلول الاوربيتال d ويحكم قيم m الخمسة نجد خمسة حلول ممكنة وهكذا عندما $L=3$

اضافة الى اعداد الكم الثلاثة m,L,n يوجد عدد كم اخر يطلق عليه عدد الكم البرمي spin Q.N. ويدل على الحركة المغزلية للالكترون وياخذ احدى القيمتين $\pm1/2$

المعنى الفيزيائي لاعداد الكم :

1-عدد الكم الرئيسي n : Principle Quantum number

يعين هذا العدد الطاقة الكلية للغلاف الرئيسي كذلك يحدد بعد الالكترون عن النواة وياخذ n الاعداد الصحيحة الاتية :

$n=1,2,3,...\infty$

وتسمى هذه الاغلفة حسب الاحرف الاتية : عندما

$n=1,2,3,4,5,6,7$

K L M N O P Q

عدد الالكترونات التي يتشبع

التسلسل	عدد الالكترونات	رمز الغلاف الرئيسي	رقم الغلاف n
1	2e	K	1

2	L	8e	2
3	M	18e	3
4	N	32e	4
5	O		5
6	P		6
7	Q		7

عندما $n=1$ تكون الطاقة في ادنى قيمة لها اي تكون لها قيمة سالبة كبيرة و كلما زادت قيمة nكلما زادت طاقة الالكترون (نقل القيمة السالبة) حتى تصل الى الصفر في اللانهاية وعندما يتحرر الالكترون من قوة جذب النواة

يحتوي كل عدد كم رئيسي على عدد من الاوربيتالات يمكن معرفتها من القانون الاتي:$No.of\ orbitals=n^2$

ان جميع قيم عدد الكم الثانوي Lلاي عدد كم رئيسي n تكون متساوية الطاقة قبل تسليط المجال المغناطيسي او عندما تكون فارغة ولكنها تختلف بلطاقة عند تسليط المجال المغناطيسي وكلما ازدات قيم Lتزداد طاقتها: $L=0,1,2,3$

$S<P<d<f$

2-عددالكم الثانوية secondary Qua.Nu: L

وهو العدد الذي يحدد مستوى الطاقة الثانوي (الغلاف الثانوي) الذي يتواجد فيه الالكترون وتكون قيم L بلشكل الاتي: $L=0,...,(n-1)$

When n=1

L=0,...(1-1)=0,...0

L=0➔S

اذا يوجد الاوربيتال 1Sوهذا 1 هو n فقط في الغلاف الرئيسي الاول .

When n=2 , L=0,...(2-1)=0,1

S P

اذا يوجد الغلافات الثانوية 2P,2Sفي الغلاف الرئيسي الثاني.

When n=3

L=0,...(3-1)=0,1,2

S P d

اذا يوجد 3p ,3S, 3d في الغلاف الرئيسي الثالث

يستفاد من قيم Lللحصول على مايلي:

1-حسابات الزخم الزاوي الاوربيتال orbital angular momentum وهو قيمة متجهة وثابتة للمستوى (الغلاف) الثانوي الواحد(f,d,p,s)ويمكن ايجاد الزخم الزاوي للالكترون في اوربيتال محدد بلقيمة Lمن العلاقة الاتية :

$$\text{Angular momentum}(n\ L) = \frac{h}{2\pi}\sqrt{L(L+1)}$$

تمثل h/2πوحدة الزخم الزاوي.

عندما $L=0 \rightarrow (n\ L) = \frac{h}{2\pi}\sqrt{0(0+1)}$

$(n\ L)=0$

الزخم الزاوي صفر وهذا لا يعني الالكترون في سكون وانما محصلة الزخم الزاوي =0 اي ان احتمالية تحركه في اتجاه معين يساوي احتمالية احتمالية تحركه في الاتجاه المضاد وهذا يحصل محصلة الزخم الزاوي =0.

عندما $L=0 \rightarrow (n\ L)=\sqrt{1(1+1)}\frac{h}{2\pi}$

$=\sqrt{2}\frac{h}{2\pi}$

When $L=2 \quad \rightarrow \frac{h}{2\pi}\sqrt{2(2+1)} \rightarrow (n\ L)=\frac{h}{2\pi}\sqrt{6}$

2-تحديد شكل الاوربيتال :

سكن اهمية معادلة شرودنكر وحلولها المقبولة في انها تعطي وصفا فيزيائيا للاوربيتال على انه (حيز فراغي له شكل هندسي تكون احتمالية وجود الالكترون فيه عالية ونحدد هذه الاحتمالية بقيمة ψ^2 وهذه تحددها الدالة القطرية r والدالةالزاويةΘو ϕ مع المحاور x,y,z والدوال r,ϕ,Θ تمثل بعد الالكترون عن مركز نواة الذرة والزوايا التي يكونها مع المحاور وهذا يتم من خلال تحديد العقد التي تكونها حركة الالكترون وتستخرج من العلاقة الاتية : No.of node=L

الاوربيتال S: عندما L=0 فان عدد العقد هو صفروهذا يعني ان احتمالية وجود الالكترون لا تعتمد على الاتجاه الزاويϕوΘ بل تعتمد على البعد rفقط لذلك يكون شكل الاوربيتال كروي من نوع s

اي ان له دالة قطرية فقط وبما ان محصل الزخم الزاوي له 0 فهو اي الاوربيتال متماثل منتظم ضمن الابعاد الثلاثة X,Z,Y والشكل الاتي يمثل التماثل الكروي للاوربيتال S حول النواة:

اما احتمالية وجود الكترون على مسافات مختلفة من النواة على طول المحور X يتمثل بلشكل الاتي :

وهذا يعني ان احتمالية وجود الكترون في الغلاف الكروي (الاوربيتال S) تساوي صفرعند النواة وذلك لان $r=0$ ثم تزيد تدريجيا بزيادة r حتى تصل الى نهاسة عظمى عندما r تساوي r_0 او a_0 (اي نق المدار الاول حسب نظرية بور)ثم نقل الاحتمالية بعد ذلك لان ψ^2 نقل تدريجيا كلما ابتعدنا عن النواة اي ان الشكل المنحني يمثل محصلة تغير كل من r و ψ^2

الاوربيتال P:

عندما $L=1$ فان عدد العقد هو 1 وان الاوربيتالاتالمستوى الثانوي P وعددها ثلاثة اوربيتالات اي ان دالة الموجه ψ تعتمد على $r,\theta,\phi,$ ولهذا فان اشكال الاوربيتال p الثلاثة ليس لها تماثل كروي واتجاه كل منها يتكون من فصين وان كل اوربيتال يحتوي عقدة واحدة وانها متعامدة على بعضها البعض وهي p_x,p_y,p_z

حيث p_x يقع على المحور x

P_y يقع على المحور y

P_Z يقع على المحور Z

وتجد الاشارة هنا الى ان كل من هذه الاشكال(P_X,P_Y,P_Z)يمثل احتمالية وجود الالكترون ضمن الغلاف المحدد بلشكل وان هذه الاحتمالية تتناسب مع ψ^2 وهو رقم موجب سواء كانت لψ فيه + كما في احد الفصين او قيمة سالبة كما في الفص المقابل

ويجب ان نعلم ان الغلاف الرئيسي $(n=2|)$ يحتوي اوربيتال من النوع 2P وهي $2P_X, 2P_Y, 2P_Z$ المتساوية الطاقة degenerate

اما احتمال وجود الالكترون على بعد r من النواة في اوربيتالات 2s,2p يمثل بلشكل الاتي :

الاوربيتال d:

عندما L=2 فان عدد الاوربيتال المستوى الثانوي dتكون خمسة اوربيتالات متساوية الطاقة degeneraze يكتوي كل اوربيتال على عقدتين اي كل اوربيتال يحتوي يحتوي عقدتين متعامدتين تتوزع الكثافة الالكترونية بعضها على المحاور المتعامدة والبعض الاخر يقع بين المحاور وبسبب التعامد فان اشارة ψ تكون نفسها (متناظرة) لكل فصين متقابلين ولهذا فان الاوربيتال d يتكون من اربعة فصوص على محورين متعامدين

اوربيتالات d الخمسة هي :

dx^2-y^2يتكون من فصين على المحور x وفصين على المحور yولذلك فانه يقع على المحور

dxy اربعة فصوص تقع بين المحورين x,y

dxz اربعة فصوص تقع بين المحورين x,z

Dyz اربعة فصوص تقع بين المحورين y,z

فالاوربيتالات dxy,dxz,dyzتقع بين المحاور .

الاوربيتال الخامس هو dz^2 يمكن تصوره كمحصلة

الاوربيتالين هما dx^2-z^2 ,dy^2-z^2 ولكنه يتكون من فصين حول المحور z وحلقة (عقال) في المستوى XY ولذا فان الاوربيتال dz^2يقع على المحاور .

والشكل الاتي يمثل اوربيتال d الخمسة :

اما احتمالية وجود الالكترون على بعد r من النواة في اوربيتالات 3s,3p,3d فيمثلها الشكل الاتي :

الاوربيتالات المتماثلة وغير المتماثلة :