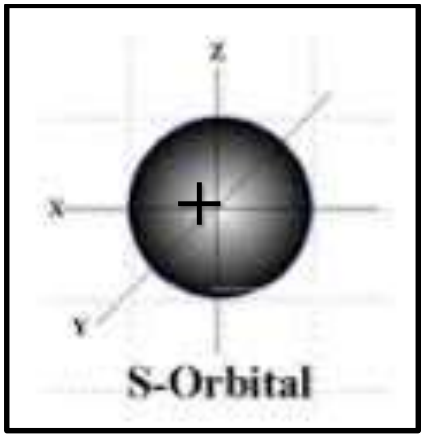
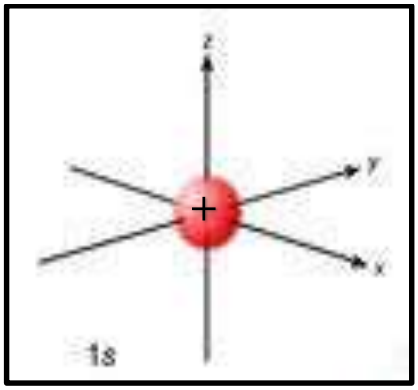
الوصف الفيزيائي للاوربيتالات الذرية:-

الاوربيتال (s) :-

تكمن أهمية معادلة شرودنكر وحلولها المقبولة في إنها تعطي وصفاً فيزيائياً للاوربيتال على أنه حيز فراغي له شكل هندسي تكون احتمالية وجود الالكترون فيه عالية وتتحدد هذه الاحتمالية بقيمة الدالة ψ^2 . وفي حالة الاوربيتال نوع (s) فان الحلول المقبولة لمعادلة شرودنكر لا تعتمد على الزوايا ثيتا θ أو فاي ϕ وإنما على نصف القطر (r) فقط ولما كان المقدار $\psi^2 d\tau$ الممثل لاحتمالية تواجد الالكترون لايعتمد على الاتجاه الزاوي لذلك فأن شكل الاوربيتال سوف يكون ذو تماثل كروي حول النواة كما موضح بالشكل ادناه :-





ولنفرض ان هذا الاوربيتال هو 1s فيمثل السطح غلافاً لكرة تكون احتمالية وجود الالكترون ضمنها أكبر من 90% من الاحتمالية الكلية. اما نصف قطر اوربيتال s الذي يتضمن 100% من الاحتمالية فسوف يصل الى اللانهاية كما يتبين من المعادلة التالية:-

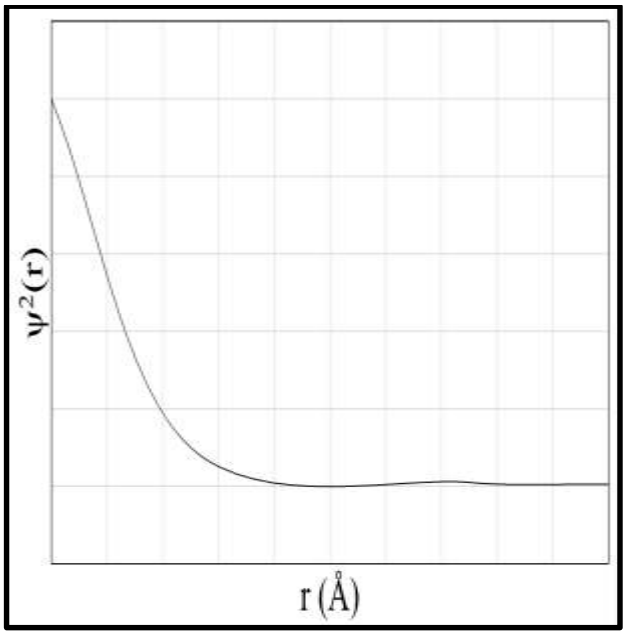
$$\int_0^{\infty} \psi^2 d\tau = 1$$

وفي حالة الاحتمالية 90% فتكون العلاقة كالتالي:-

$$\int_0^{r} \psi^2 d\tau = 0.9$$

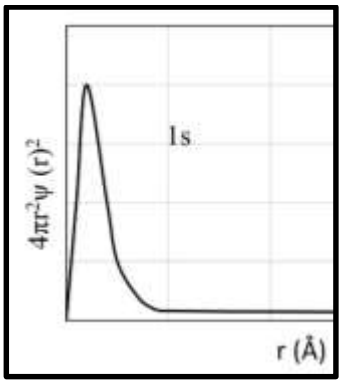
حيث ان (r) تمثل نصف القطر الاختياري للكرة الممثلة للاوربيتال وطبيعي أن تكون قيمة (r) محددة.

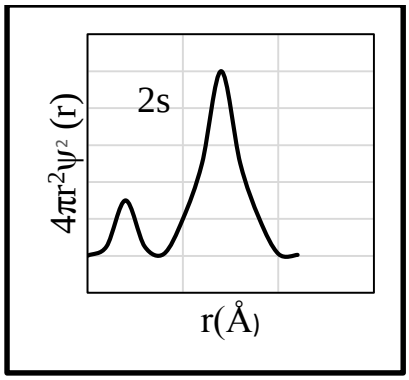
والان سوف نحسب احتمالية وجود الالكترون على مسافات مختلفة من النواة على طول المحور x مثلاً. ولما كان شكل اوربيتالات s كروية فان اختيار المحور x سوف يمثل ايضاً احتمالية وجود الالكترون على أي محور آخر يرسم من النواة حيث ان رسم معادلة احتمالية تواجد الالكترون بيانياً $\psi^2(r)$ يعطي الشكل التالي:-



احتمالية وجود الكترون (1s) على المحور السيني x

يتضح من هذا المنحني ان وحدة الحجم القريبة من النواة تتميز باعلى نسبة من الاحتمالية لوجود الالكترون كما ان الخط البياني الذي يعطي صورة أوضح هو ذلك الخط البياني الذي يبين العلاقة بين المقدار $4\pi.r^2.\psi^2(r)$ والمسافة (r) من النواة كما يتبين من دراسة الشكل التالي الذي يوضح احتمالية التوزيع القطري الذي يمثل احتمالية تواجد الالكترون ضمن غلاف كروي رقيق للغاية سمكه dr ويبعد بمسافة (r) عن النواة:-

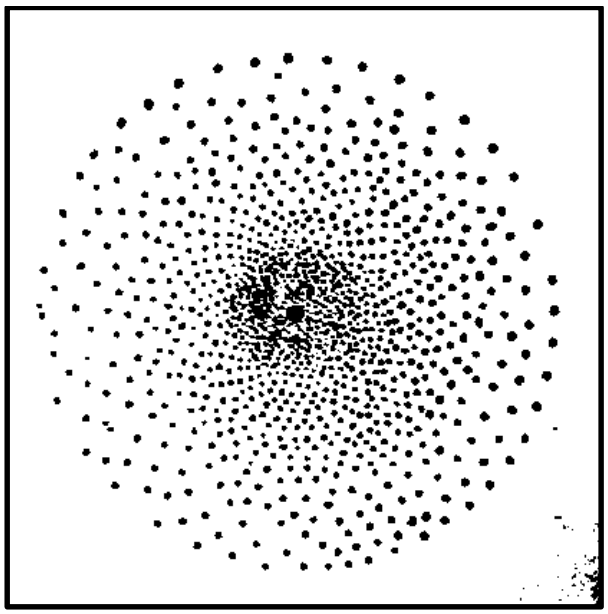




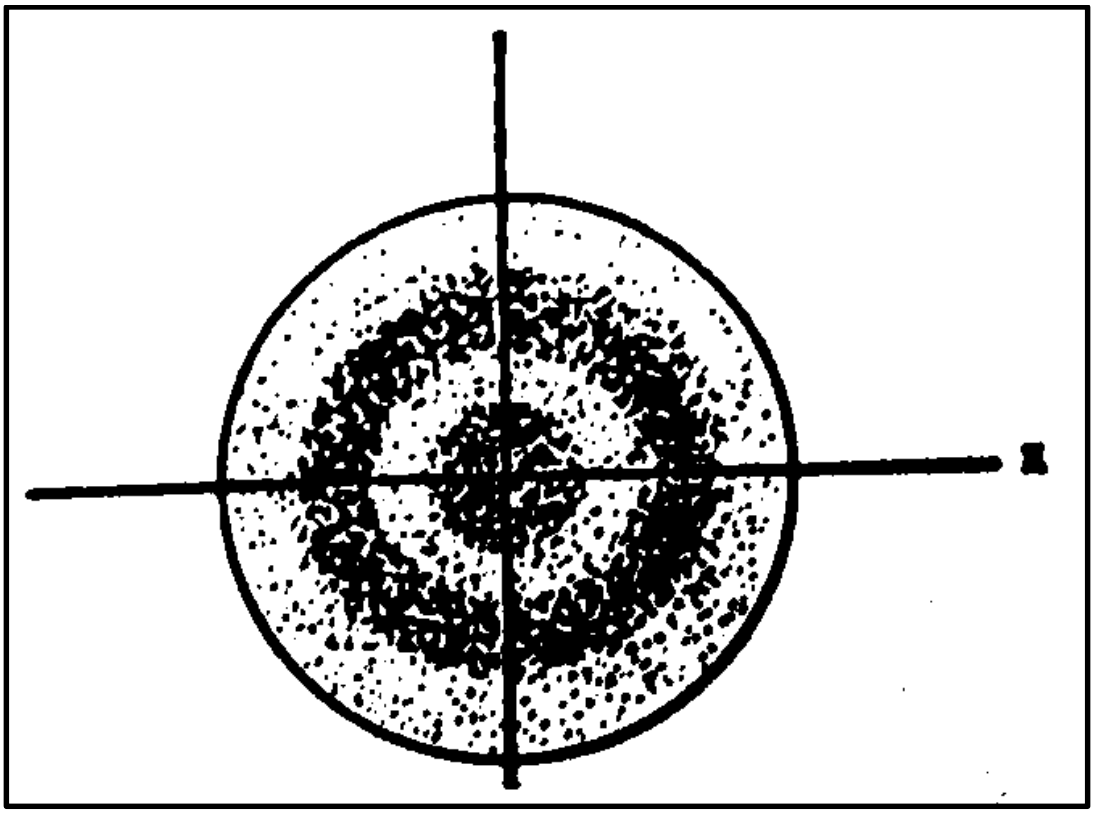
من الاشكال أعلاه يتضح أن احتمالية وجود الالكترون في الغلاف الكروي الرقيق تساوي صفر عند النواة لأن (r=0) ثم تزيد تدريجياً بزيادة قيمة (r) حتى تصل الى نهاية عظمى عندما تكون r مساوية لقيمة معينة تسمى (r_o) أو (a_o) وه تطابق نصف قطر المدار الاول الذي تحدد بنظرية بور ثم تقل الاحتمالية بعد ذلك لأن قيمة ψ^2 تقل تدرجياً كلما ابتعدنا عن النواة أي ان هذا المنحني يمثل محصلة تغير كل من r و ψ^2 للاوربتال 1s وكذلك 2s في ذرة الهيدروجين.

ويمكن اعطاء صورة توضحية للدالة $\psi^2(r)$ باحدى الطريقتين التاليتين:-

1- اذا افترضنا اننا تمكنا من مشاهدة الالكترون ف ذرة الهيدروجين عدداً كبيراً من المرات وأحصينا عدد مرات تواجد الالكترون في كل نقطة ومن ثم قمنا برسم صورة تكون فيها شدة التظليل متناسبة مع عدد مرات تواجد الالكترون بهذه النقطة فأننا سنحصل على رسم مشابه للشكل التالي:-



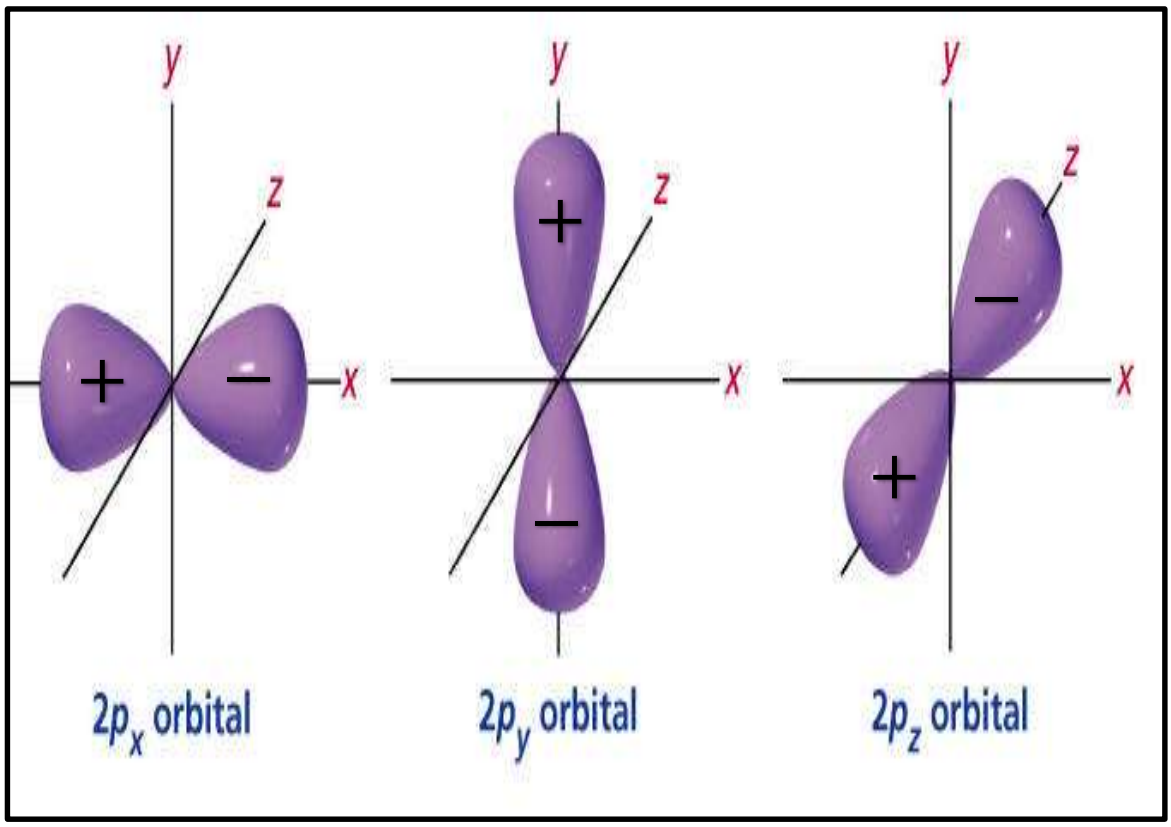
2- لو تصورنا أن الالكترون حول النواة يشابه غيمة مشحونة بالشحنة السالبة وان كثافة الغيمة تعبر عن احتمالية وجود الالكترون في منطقة معينة لحصلنا على صورة مشابهة كما موضح بالشكل التالي:-



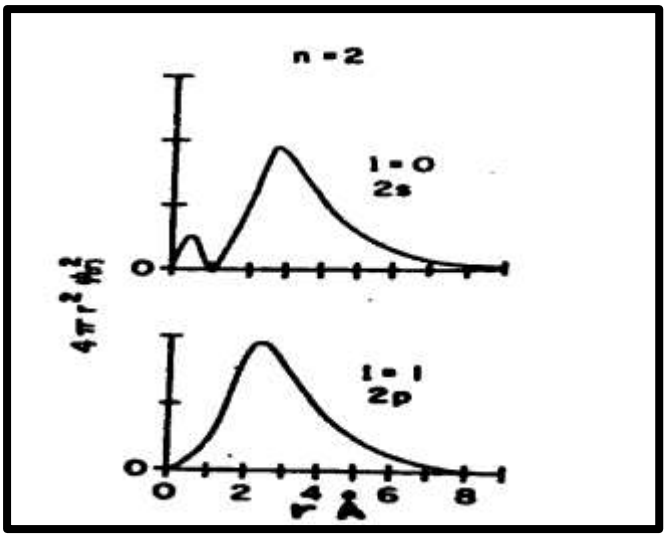
الاوربيتال P :-

يحتوي الغلاف الثاني على اوربيتال نوع (2s) وعلى ثلاث اوربيتالات متساوية في الطاقة من نوع (p) ويرمز لها (2p) ويتضح من حل معادلة شرودنكر لدالة الموجة (ψ) للاوربيتال p ان دالة الموجة (ψ) تعتمد على كل من r و θ و ϕ ولذلك فان اشكال اوربيتال p الثلاث ليس لها تماثل كروي وانما يتكون كل منها من فصين وتكون متعامدة على بعضها البعض وتقع على المحاور الثلاثة (x, y, z) وبذلك يرمز لها بحسب المحور الذي تقع عليه $2p_x$ و $2p_y$ و $2p_z$. ومن الجدير بالذكر هنا أن كل من هذه الاشكال يمثل احتمالية وجود الالكترون ضمن الغلاف المحدد بالشكل وان هذه الاحتمالية

تتناسب مع ($\psi 2$) وهو دائماً يكون رقم موجب اذا كانت ψ سالبة أم موجبة وكما موضح بالشكل التالي:-

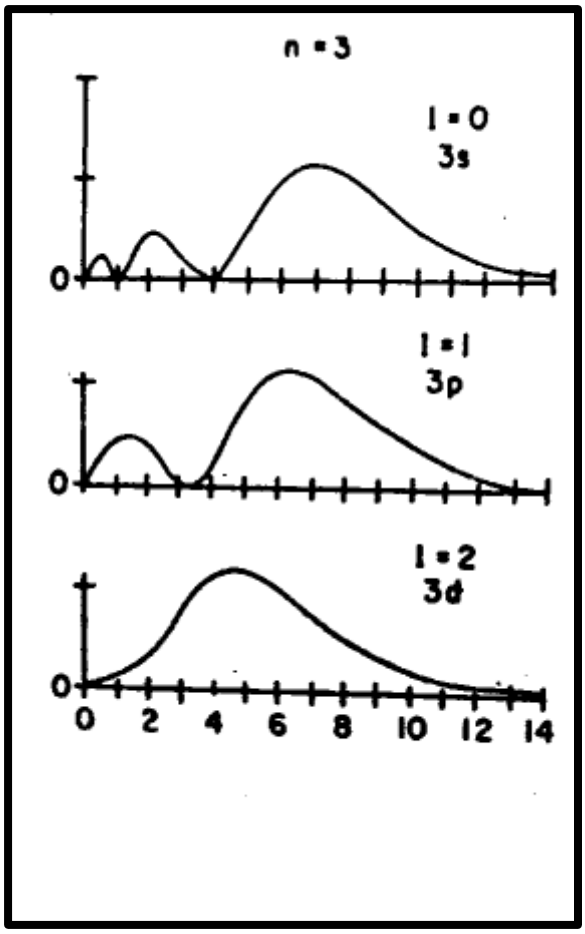


وعند رسم الدالة $4\pi r^2\psi^2_{(r)}$ ضد (r) لاوربيتالات p بشكل عام مقارنة مع 2s نحصل على الرسوم البيانية التالية وهي تمثل احتمالية وجود الالكترون على بعد r من النواة في اوربيتالات 2p و 2s:-

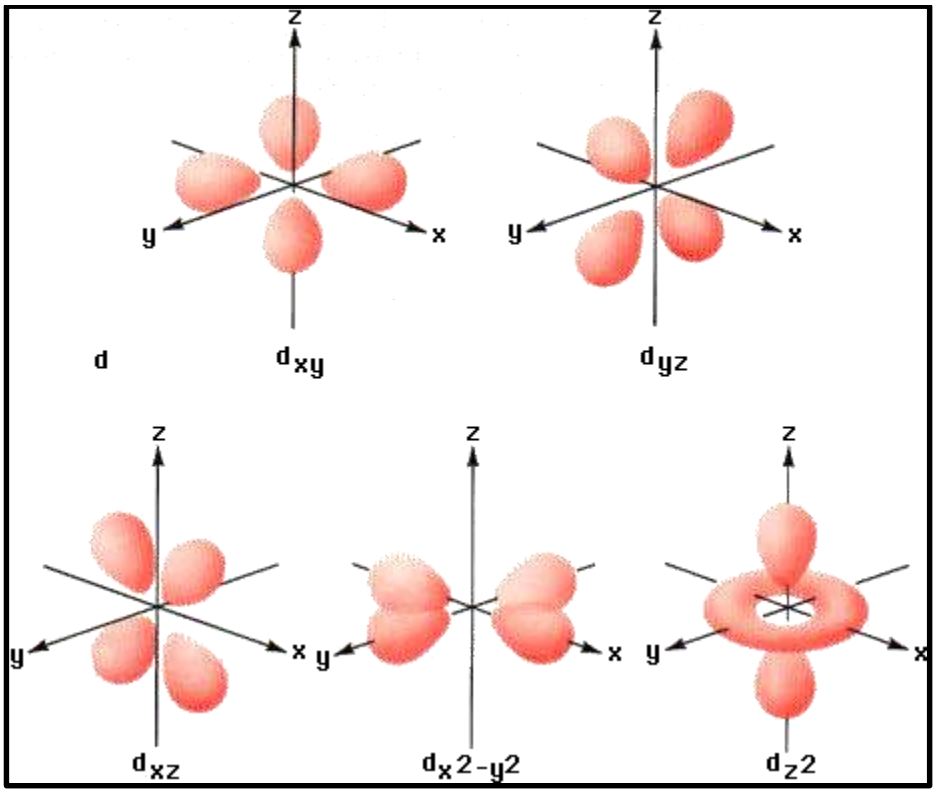


الاوربيتال d :-

في الغلاف الرئيسي الثالث (M) أي ان (n=3) توجد ثلاث انواع من الاوربيتالات هي 3s و 3p و 3d والاوربيتال الجديد 3d له خمسة اوربيتالات متساوية الطاقة وكما سبق ذكره فأن العلاقة بين الدالة $4\pi r^2\psi^2_{(r)}$ وبين (r) بالنسبة لاوربيتالات d موضحة بالشكل التالي الذي يمثل احتمالية وجود الالكترونات في اوربيتالات 3s و 3p و 3d :-



والتمثيل الفراغي أدناه فيه يختلف شكل الاوربيتال d عن الاوربيتال s أو p في إنه يتكون من أربعة فصوص على محورين متعامدين فمثلاث يحتوي الاوربيتال dx^2-y^2 على فصين على المحور x وآخرين على المحور y ويمكن أن نتصور أن الاوربيتال dxy نتج عن تحريك الاوربيتال dx^2-y^2 بزاوية قدرها 45 درجة ضمن مستوى xy وحول المحور z . وبالمثل فأن الاوربيتال dyz يقع بين المحورين y و z وان الاوربيتال dxz يقع بين المحورين x و z . أما الاوربيتال الاوربيتال dz^2 فيمكن تصوره كمحصلة dx^2-z^2 و dy^2-z^2 أي إنه يتكون من فصين حول المحور z وحلقه في المستوى xy .



الأشكال الخارجية لأوربيتال d