الحالات الذرية المشتقة من الترتيب الالكتروني:-

رمز الحالة (رمز التيرم) (Term Symbol) :-

عند كتابة الترتيب الالكتروني لذرة نواجه صعوبة أخرى لم نذكرها سابقاً وهي الاحتماليات المتعددة الممكنة عند وضع هذه الالكترونات في اوربيتالات متساوية الطاقة. فمثلاً عند وجود الكترونين في اوربيتال p هنالك عدة احتماليات لتوزيع الالكترونات ضمن هذا الاوربيتال لان التوزيع الالكتروني المتبع هو عندما تكون الذرة في الحالة المستقرة أي بدرجة حرارة الصفر المطلق التي تعادل (273-) درجة مئوية فوجود الذرة في درجة حرارة الغرفة التي تعادل 298 درجة مطلقة أي 25 درجة مئوية يعرضها الى اكتساب حرارة (طاقة) واكتساب الطاقة يكون من قبل الكترونات الذرة فتصبح هذه الالكترونات في حالة متهيجة مما يجعل من عملية انتقالها الى اوربيتالات أخرى أو انتقال داخلي ضمن الاوربيتال نفسه عملية ممكنة ومنطقية ، على هذا الاساس فأن ترتيب الالكترونات في اوربيتال p قد يتضمن الاحتمالات التالية:-

اوربيتال p		
+1	0	-1
↑		↓

اوربيتال p		
+1	0	-1
↑	↓	

اوربيتال p		
+1	0	-1
↓↑		

اوربيتال p		
+1	0	-1
↑	↑	

اوربيتال p		
+1	0	-1
↑		↑

اوربيتال p		
+1	0	-1
	↑	↑

فبعض هذه الحالات تكون متساوية الطاقة والبعض الآخر يكون أكثر طاقة غيرها ومن الطبيعي عند وجود الكترون واحد فقط تكون الاحتماليات أقل وكلما أزداد عدد الالكترونات في الاوربيتال كلما ازداد التعقيد وازدادت الاحتماليات لذلك لابد من وجود تعبير آخر غير اعداد الكم الاربعة للتعبير عن حالة الالكترونات لذلك فأن طريقة التعبير باستخدام رمز التيرم أو رمز الحالة يكون أفضل بالتعبير عن حالة الالكترونات.

توجد طريقتان تستعملان لوصف المحصلة (J) (التي هي محصلة جميع الحركات المغزلية للالكترونات والزخم الزاوي لها) هما:-

- **الطريقة الاولى:- LS Coupling أو يمكن تسميتها (Russell-Saunders) .**
- **الطريقة الثانية:- jj Coupling .**

تستعمل الطريقة الاولى عندما تكون الحركة المغزلية لا تزدوج كثيراً مع الزخم الزاوي الاوربيتالي حيث يزدوج فقط الزخم الزاوي للاوربيتال لكل الكترون مع البقية وينتج عن ذلك محصلة واحدة يرمز لها بالرمز الكمي (L) لتلك الحالة. كذلك يزدوج زخم الحركة المغزلية لكل الكترون مع البقية لينتج عنه محصلة زخم الحركات المغزلية لجميع الالكترونات والتي يرمز لها بالحرف الكمي (S) .

إن قيم (L) و (S) تحدد قيمة (J) التي تساوي:-

$$J = |L+S|,.....,|L-S|$$

فمثلاً اذا كانت $L=3$ و $S=1$ فتكون قيم J هي

$$J = |L+S|,.....,|L-S|$$
$$J = |3+1|,.....,|3-1|$$
$$J = 4,\ 3,\ 2$$

نلاحظ ان ناتج جمع وطرح كل من L و S رقمين هما أربعة واثنان ثم نكمل الارقام مابين الاربعة والاثنان وهو رقم ثلاثة كما نلاحظ ان J يأخذ قيم موجبة فقط والصفر أيضاً لأن عملية طرح وجمع كل من L و S يكون بالصيغة المطلقة . ومن الجدير بالذكر ان هذه الطريقة تستخدم لجميع الذرات التي اعدادها الذرية أقل من ثلاثين .

تستعمل الطريقة الثانية JJ-Coupling عندما تزدوج الحركة المغزلية للالكترون مع الزخم الزاوي للاوربيتال بدرجة كبيرة في هذه الطريقة يزدوج الزخم الزاوي للحركة المغزلية للالكترون مع زخم الاوربيتال ليعطي قيم واحدة لـ J لكل الكترون ثم تزدوج قيم J لجميع الالكترونات لتعطي قيمة واحدة فقط.

في الحالة المستقرة أو الهادئة للذرة يمكن اتباع قواعد هوند في تعيين رمز الحالة الذرية لأي عنصر من العناصر ويمكن اجمال قواعد هوند بالتالي:-

1) تتوزع الالكترونات في اوربيتالات متساوية الطاقة قدر المستطاع لكي تصبح قيم S وكذلك قيمة التعددية (2S+1) أكبر ما يمكن.
2) نرتب الالكترونات في الاوربيتالات بحيث يتم البدء بالاوربيتال الذي له أعلى قيمة لعدد الكم المغناطيسي m_l ثم الاقل ثم الاقل وهكذا ..... وبهذه الطريقة نحصل على أكبر قيمة للزخم الزاوي الاوربيتالي وأقل قيمة للطاقة.
3) في حالة احتواء الغلاف الثانوي (الاوربيتال) على الكترونات أكثر من نصف مشبع عند ذلك نعتمد أعلى قيمة لـ J أي نعتمد القيمة $|L+S|$ فقط. أما في حالة احتواء الغلاف الثانوي (الاوربيتال) على الكترونات أقل من نصف مشبع ففي هذه الحالة نعتمد أقل قيمة لـ J ولاتي هي $|L-S|$. وفي حالة كون الغلاف الثانوي مشبع أو نصف مشبع ففي هذه الحالة سوف نحصل على قيمة واحدة لـ J سواء كانت $|L+S|$ أو $|L-S|$.

ولتوضيح هذه القواعد الثلاثة سوف نأخذ أمثلة متعددة :-

مثال(1):- ذرة الكاربون التي عددها الذري يساوي ستة.

الترتيب الالكتروني للكاربون هو $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ واوربيتال 2p يكون ترتيب الالكترونات فيه

$2p^2$		
+1	0	−1
↑	↑	

نحسب قيمة L :- $L=((+1)\times1)+((0)\times1)+((-1)\times0)=1$

نحسب قيمة S :- $S=\left(+\frac{1}{2}\right)+\left(+\frac{1}{2}\right)=1$

نحسب قيمة التعددية $(2S+1)$:- $(2S+1)=((2\times1)+1)=3$

وبالتعويض عن قيمتي L و S في معادلة حساب J نحصل على :-

$$J=|L+S|,.....|L-S|$$
$$J=|1+1|,.....|1-1|$$
$$J=2,.....,0$$
$$J=2\ ,\ 1\ ,\ 0$$

بما أن الاوربيتال 2p أقل من نصف مشبع فسوف نعتمد أقل قيمة لـ J وهي الصفر (0)
من قيمة L يتم اعطاء حروف للتعبير عن رمز الحالة وسحب التالي:-

قيمة L	0	1	2	3	4	5	6
الرمز	S	P	D	F	G	H	I

والرمز يكون بالصيغة التالية:- $\boxed{^{(2S+1)}\text{الرمز}_{J}}$ أي يكون رمز الحالة للكاربون $\boxed{^3P_0}$.

مثال(2):- ماهو رمز التيرم (رمز الحالة) لذرة النتروجين التي عددها الذري يساوي سبعة؟

الترتيب الالكتروني للنتروجين هو $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$ واوربيتال 2p يكون ترتيب الالكترونات فيه

$2p^3$		
+1	0	−1
↑	↑	↑

نحسب قيمة L :- $L=((+1)\times1)+((0)\times1)+((-1)\times1)=0$

نحسب قيمة S :- $S=\left(+\frac{1}{2}\right)+\left(+\frac{1}{2}\right)+\left(+\frac{1}{2}\right)=\frac{3}{2}$

نحسب قيمة التعددية $(2S+1)$:- $(2S+1)=\left(\left(2\times\frac{3}{2}\right)+1\right)=4$

وبالتعويض عن قيمتي L و S في معادلة حساب J نحصل على :-

$$J=|L+S|,.....|L-S|$$

$$J=\left|0+\frac{3}{2}\right|,.....,\left|0-\frac{3}{2}\right|$$

$$J=\left|\frac{3}{2}\right|,.....,\left|-\frac{3}{2}\right|$$

$$J=\frac{3}{2},.....,\frac{3}{2}$$

$$J=\frac{3}{2}$$

بما أن الاوربيتال 2p نصف مشبع فقد حصلنا على قيمة واحدة فقط لـ J

بما ان قيمة L تساوي صفر (0) فالرمز هو S

وبذلك يكون رمز الحالة للنتروجين $\boxed{{}^{4}S_{\frac{3}{2}}}$.

مثال(3):- ماهو رمز التيرم (رمز الحالة) لأيون الفناديوم V^{+3} ؟

الترتيب الالكتروني لأيون الفناديوم V^{+3} هو $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^2$

$3d^2$				
+2	+1	0	−1	−2
↑	↑			

نحسب قيمة L :- $L=((+2)\times1)+((+1)\times1)+((0)\times0)+((-1)\times0)+((-2)\times0)=3$

نحسب قيمة S :- $S=\left(+\frac{1}{2}\right)+\left(+\frac{1}{2}\right)=1$

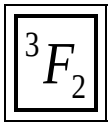
نحسب قيمة التعددية $(2S+1)$:- $(2S+1)=((2\times1)+1=3$

وبالتعويض عن قيمتي L و S في معادلة حساب J نحصل على :-

$$J=|L+S|,.....|L-S|$$
$$J=|3+1|,.....,|3-1|$$
$$J=|4|,.....,|2|$$
$$J=4,.....,2$$
$$J=4\ ,\ 3\ ,\ 2$$

بما أن الاوربيتال 3d اقل من نصف مشبع فسوف نعتمد على أقل قيمة لـ J وهي (2)

بما ان قيمة L تساوي صفر (3) فالرمز هو F

وبذلك يكون رمز الحالة لأيون الفناديوم V^{+3}  .

تمرين:- ماهي رمز الحالة (رمز التيرم) لكل من (الكلور ، السيليكون ، التيتانيوم ، الكروم ، النيكل ، النحاس ، الزنك ، أيون الفلور F^-) في الحالة المستقرة؟