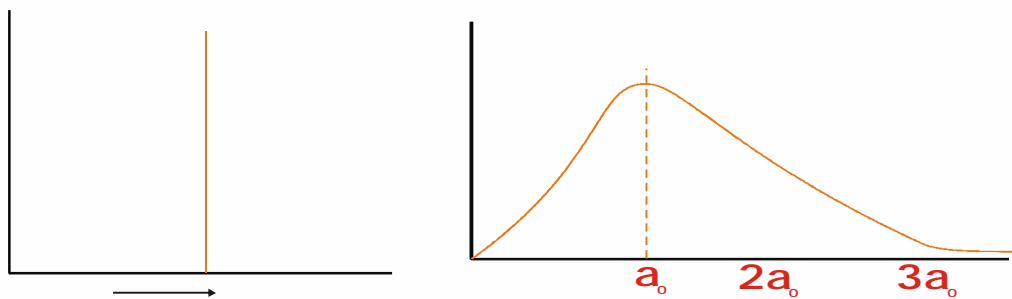


## مفهوم توزیع بار الکترونی:

با استفاده از مکانیک موجی و معادله شرودینگر توانسته‌اند که خواص اتم ئیدروژن را که تک الکترونی است دقیقاً بررسی کنند و ترازهای انرژی ممکن و شکل اوربیتالها را بدست آورند. نتایج حاصل با مشاهدات و آزمایش به خوبی سازگار است و قدرت خوبی در توجیه خواص یا انجام پیشگوییها نسبت به اتمهای بزرگتر و چند الکترونی نیز فراهم می‌نماید.

## توزیع ابر الکترونی در اوربیتال $1s$ :

توزیع ابر بار الکترونی حاصل از یک الکترون در اوربیتال  $1s$  وابسته به اتم ئیدروژن در شکل (الف) در زیر نشان داده شده است.



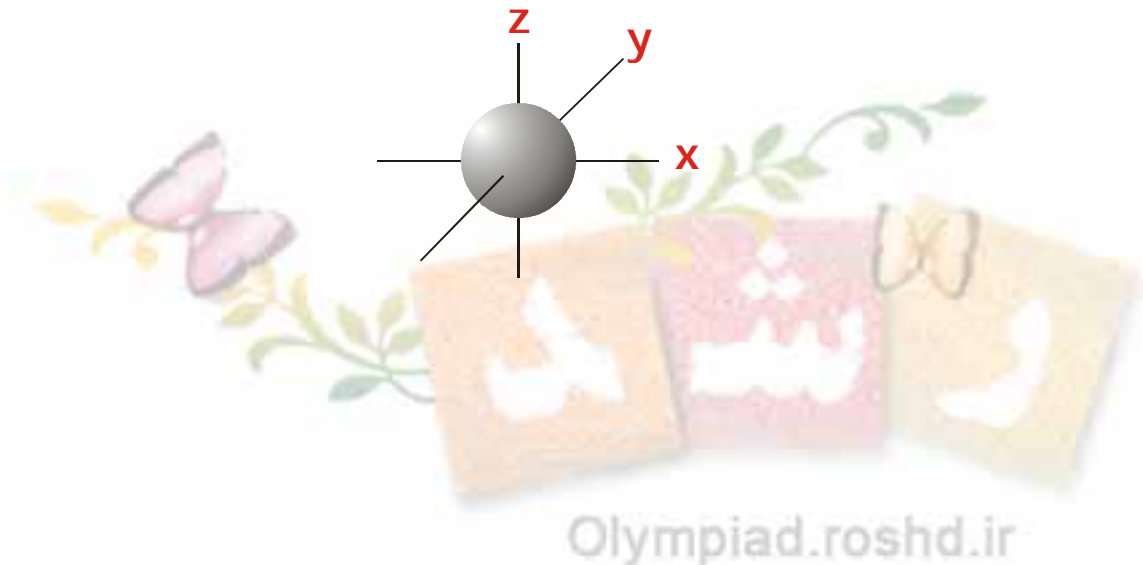
ب- اتم بوهر

الف- اتم مکانیک موجی

منحنی (الف)، توزیع احتمال را برحسب شعاع نشان می‌دهد. اتم را مرکب از لایه‌های کروی بسیار نازک شبیه پیاز که به طور متحدالمرکز در اطراف هسته قرار دارند، در نظر می‌گیریم. اگر احتمال کل یافتن

الکترون در چنین لایه‌هایی را برحسب فاصله لایه از هسته رسم کنیم، این منحنی بدست می‌آید. همان طور که در شکل نشان داده شده است، منحنی دارای ماکزیممی در  $a_0 = 0.529A^0$  است. این بدان معنی است که احتمال کلی یافتن الکترون در تمام نقاطی که به فاصله  $r = a_0$  نسبت به هسته قرار دارند، حداکثر است. بیان این مطلب برحسب مفهوم ابر بار الکتریکی به این صورت است که قسمتی از بار کل الکترون که در لایه کروی با شعاع  $a_0$  یافت می‌شود بیش از بار الکتریکی هر لایه دیگر است.  $a_0$  شعاع کاملاً مشخص بوهر برای اتم هیدروژن در حالت پایه می‌باشد که در منحنی (ب) نشان داده شده است.

چون احتمال یافتن الکترون در هر فاصله معین از هسته وجود دارد، نمایش سه بعدی الکترون  $1s$  مواجه با اشکال می‌شود. ولی چنین نمایشی کمک مؤثری برای توجیه خواص اتم و پدیده‌های شیمیایی است. ترسیم یک شکل هندسی که شامل ناحیه‌ای از فضا با احتمال 100٪ باشد، امکان پذیر نیست. ولی می‌توان مطابق شکل زیر سطحی رسم کرد که بتواند نقاط با احتمال یکسان را به هم ببیوندد و در برگیرنده حجمی باشد که احتمال یافتن الکترون در آن زیاد است (مثلاً 90 درصد). چنین شکلی را می‌توان نمودار سطح مرزی نام نهاد.



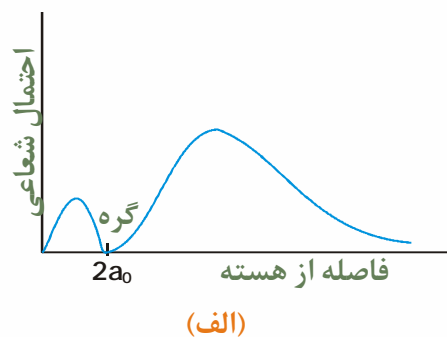
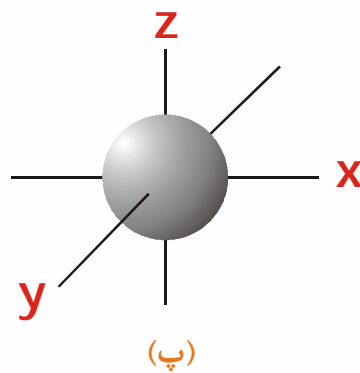
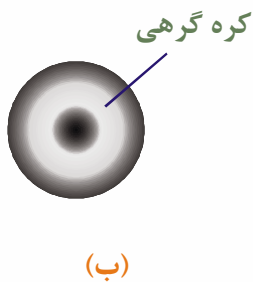
باید توجه داشت که اوربیتالها به سان ابر و مه بوده و حدود آنها مبهم است. اما همواره می توان سطح مرزی را که احتمال وجود الکترون در آن زیاد باشد (مثلاً بیش از 90 درصد)، به طور هندسی نشان داد و منظره بیرونی اوربیتال را بدست آورد. ولی نباید فراموش کرد که درون سطح مرزی، دانسیته های متفاوتی از الکترون وجود دارد. بدیهی است که چنین تصویری از اوربیتال با مسیر خطی الکترون و مدارهایی نظیر مدار سیارات فرق بسیار دارد. همواره به یاد داشته باشیم مطابق اصل عدم قطعیت، نمی توان برای حرکت الکترون یک مسیر معین در نظر گرفت. ولی طرح این سؤال، هر چند تصویری باشد، خالی از فایده نیست، که آیا نمی توان در مقابل مسیر دایره ای بوهر که برای الکترون فرض شده و ایرادها بر آن وارد است، مسیری شعاعی در جهت دور و نزدیک شدن به هسته تصور نمود؟ مسیری که می تواند بیانگر برخی از خواص موجی این الکترون باشد؟

### توزیع ابر الکترونی در اوربیتال $2s$ :

از آنجا که حل معادله شرودینگر برای اتمهای چند الکترونی مشکل است و نمی توان به آسانی به پاسخهای مطلوب رسید، لذا چنین بررسیهایی فقط مربوط به اتم ئیدروژن است که الکترون آن، در حالت های برانگیخته اوربیتالهای بالاتر  $4s, 2p, 2s, \dots$  را اشغال می کند.

توزیع احتمال شعاعی برای اوربیتال  $2s$  در شکل زیر (الف) نشان داده شده است.





نمایشهائی برای اوربیتال  $2s$

توجه شود که در نقطه  $r = 2a_0$  که به گره معروف است، احتمال شعاعی به صفر می‌رسد. به عبارت دیگر احتمال حضور الکترون در منطقه گره صفر است. اصولاً وجود یک یا چند گره سبب ایجاد ماکزیممهای کوچکی در دانسیته الکترونی بین هسته و بزرگترین ماکزیمم می‌شود.

در سطح مقطع دانسیته الکترونی این اوربیتال، شکل (ب)، نقطه مذکور به صورت یک کره "گرهی" پدیدار می‌شود که در آن دانسیته الکترون صفر است. سطح مرزی قراردادی اوربیتال  $2s$  که در شکل (پ) به خوبی نشان داده شده است. ظاهراً همان شکل اوربیتال  $1s$  را دارد، با این تفاوت که اندازه آن بزرگتر است. ممکن است این سؤال جالب مطرح شود که "چگونه الکترون از یک طرف گره به طرف دیگر می‌رود، در

حالی که هرگز نمی‌توان آن را دقیقاً در گره یافت؟". هرگاه از تعصب خود در مورد این که الکترون یک ذره است، بکاهیم و آن را از دیدگاه یک موج بنگریم، هیچ مشکلی ایجاد نمی‌شود، زیرا الکترون در هر لحظه می‌تواند مانند یک موج در هر دو طرف یک گره باشد. درست مانند ارتعاش سیم یک گیتار در لحظه‌ای که انگشت خود را روی نقطه‌ای معین از آن قرار دهیم که طول موج به نصف می‌رسد و نت آن بالا می‌رود! وجود گره‌ها با توجه به خواص موجی، کاملاً عادی است ولی وقتی درک مفهوم مشکل می‌شود که سعی کنیم الکترون را به عنوان یک ذره "سخت" در یک موقعیت معین در نظر بگیریم.

### توزیع ابر الکترونی در اوربیتال $3s$ :

تمام مطالبی که درباره اوربیتال  $2s$  گفته شد، می‌توان درباره اوربیتال  $3s$  نیز تکرار کرد. با این تفاوت که الکترون  $3s$  به طور متوسط نسبت به الکترونهای  $2s, 1s$  از هسته دورتر است. بدیهی است هر چه اندازه اوربیتال زیاد شود (وابسته به سطوح انرژی بالاتر باشد)، انرژی آن نیز بیشتر می‌شود. تعداد گره‌های شعاعی در  $3s$  برابر 2 بوده که بین 3 ماکزیمم قرار می‌گیرند. به طور کلی تعداد گره‌های اوربیتالهای  $s$  برابر  $n-1$  می‌باشد. پرواضح که در اینجا می‌توان گفت که هر چه تعداد گره‌ها بیشتر باشد، انرژی اوربیتال افزایش می‌یابد.

