

## پر شدن اوربیتال و قاعده هوند

چگونگی قرارگیری الکترونها در یک اتم آرایش الکترونی اتم خوانده می‌شود. برای 18 عنصر اول،

آرایش الکترونی حالت پایه را می‌توان با این فرض به دست آورد که الکترونها، پوسته‌های اصلی را به

ترتیب افزایش مقدار  $n$  و در درون یک پوسته اصلی بر پایه افزایش مقدار  $l$ ، اشغال می‌کنند. وضعیت

عناصر دارای عدد اتمی بیش از 18، کمی پیچیده‌تر است.

	نمودار اوربیتال					نمادهای الکترونی
	1s	2s	2p			
${}^1_1\text{H}$	$\underline{\uparrow}$	—	—	—	—	$1s^1$
${}^2_2\text{He}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	—	—	—	—	$1s^2$
${}^3_3\text{Li}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow}$	—	—	—	$1s^2 2s^1$
${}^4_4\text{Be}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	—	—	—	$1s^2 2s^2$
${}^5_5\text{B}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow}$	—	—	$1s^2 2s^2 2p^1$
${}^6_6\text{C}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow}$	$\underline{\uparrow}$	—	$1s^2 2s^2 2p^2$
${}^7_7\text{N}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow}$	$\underline{\uparrow}$	$\underline{\uparrow}$	$1s^2 2s^2 2p^3$
${}^8_8\text{O}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow}$	$\underline{\uparrow}$	$1s^2 2s^2 2p^4$
${}^9_9\text{F}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow}$	$1s^2 2s^2 2p^5$
${}^{10}_{10}\text{Ne}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$\underline{\uparrow\downarrow}$	$1s^2 2s^2 2p^6$

در جدول بالا دو روش برای نشان دادن آرایش الکترونی آورده شده است. در نمودارهای

اوربیتالی، هر اوربیتال با یک خط کوتاه و هر الکترون با یک پیکان نشان داده می‌شود که یا سوی

بالاست  $\uparrow$  به نشانه یک جهت اسپین الکترونی و یا به سمت پایین  $\downarrow$  به نشانه اسپین با جهت مخالف

( $m_s$  می‌تواند  $+\frac{1}{2}$  یا  $-\frac{1}{2}$  باشد). در نمادهای الکترونی، آرایش الکترونی یک اتم به صورت کمی

متفاوت نشان داده می‌شود. نمادهای  $1s$ ،  $2s$ ،  $2p$  و غیره برای نشان دادن پوسته‌های فرعی، مورد

استفاده قرار می‌گیرند و برای نشان دادن تعداد الکترون در هر پوسته فرعی از بالانویس استفاده می‌شود.

الکترون تنهای اتم هیدروژن یک اوربیتال  $1s$  را اشغال می کند ( $m_l = 0, l = 0, n = 1$ ) در نمودار اوربیتالی که در جدول 4-6 آورده شده است، یک پیکان در جای خالی اوربیتال  $1s$  نشان داده شده است. نماد الکترونی برای اتم  $H$ ،  $1s^1$  است.

اتم هلیم دارای دو الکترون با اسپینهای مخالف در اوربیتال  $1s$  است و دو پیکان در جهت‌های مخالف، در جای خالی اوربیتال  $1s$  در نمودار اوربیتالی نشان داده شده است. نماد الکترونی اتم  $He$ ،  $1s^2$  است. توجه کنید که پوسته  $n=1$  اتم هلیم پر شده است.

اتم لیتیم، یک جفت الکترون در اوربیتال  $1s$  به اضافه یک الکترون در اوربیتال  $2s$  ( $m_l = 0, l = 0, n = 2$ ) دارد. نماد الکترونی برای اتم  $Li$ ،  $1s^2 2s^1$  است. اتم بعدی، بریلیم، در هر دو اوربیتال  $1s$  و  $2s$  یک جفت الکترون دارد. نماد الکترونی برای  $Be$ ،  $1s^2 2s^2$  است.

اتم بور پنج الکترون دارد. دو الکترون با اسپینهای جفت شده، اوربیتال  $1s$  را اشغال می کنند. جفت دیگر در اوربیتال  $2s$ ، جای می گیرند و پنجمین الکترون در یک اوربیتال  $2p$  قرار می گیرد. پوسته فرعی ( $l=1, n=2$ ) متشکل از سه اوربیتال (با مقادیر  $m_l$  برابر  $+1$ ،  $0$  و  $-1$ ) است. از آنجا که سه اوربیتال  $2p$  انرژی مساوی دارند، پنجمین الکترون می تواند در هر یک از این سه، قرار گیرد. در نمودار اوربیتالی بور که در جدول آورده شده است یک پیکان در یکی از اوربیتالهای  $2p$  قرار می گیرد. اما این اوربیتالها با مقادیر  $m_l$  مشخص نشده اند. نماد الکترونی اتم  $B$ ،  $1s^2 2s^2 2p^1$  است.

آرایش الکترونی عنصر ششم، کربن، با افزودن یک الکترون به آرایش بور به دست می آید. اما در اینجا این پرسش پیش می آید که آیا الکترون ششم کربن در اوربیتال  $2p$  که دارای یک الکترون است قرار می گیرد یا در یکی از دو اوربیتال  $2p$  خالی جای می گیرد؟ وضعیت اسپین این الکترون چیست؟

قاعده حداکثر چندگانگی هوند به این پرسش و پرسشهای مشابه پاسخ می‌دهد. قاعده هوند بیان

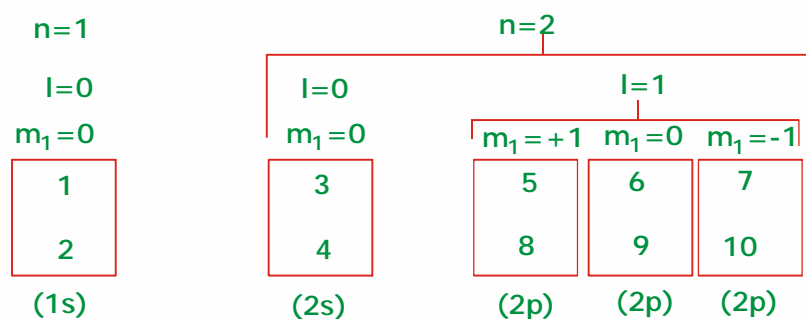
می‌کند که: الکترونها در اوربیتالهای یک پوسته فرعی به گونه‌ای توزیع می‌شوند که تعداد الکترونهای جفت نشده با اسپین موازی به حداکثر برسد. اصطلاح اسپین موازی به معنای آن است که تمام الکترونهای جفت نشده، اسپین هم‌جهت دارند. یعنی مقادیر  $m_s$  آنها علامت یکسان دارد.

بنابراین در کربن، هر یک از الکترونهای  $2p$ ، اوربیتال جداگانه‌ای را اشغال می‌کند و این دو الکترون جهت اسپین یکسان دارند. دو الکترون جفت نشده مزبور به روشنی در نمودار اوربیتالی کربن، در جدول دیده می‌شوند. اما تمایز این دو الکترون در نماد الکترونی  $1s^2 2s^2 2p^2$  چندان واضح نیست، زیرا مرسوم است که نماد الکترونی بر حسب پوسته فرعی و نه بر حسب اوربیتال نوشته می‌شود. اما با به کار بردن نماد الکترونی برای هر اوربیتال می‌توان الکترونهای جفت نشده را به خوبی نشان داد. این نماد برای کربن  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$  است.

استفاده از نماد الکترونی برای هر اوربیتال ضروری نیست، زیرا می‌توان همیشه به خاطر داشت که سه اوربیتال  $2p$  در پوسته فرعی مزبور وجود دارد و نیز به قاعده هوند توجه داشت که تنها هنگامی یکی از این اوربیتالها می‌تواند دو الکترون جفت شده در خود جای دهد که هر سه اوربیتال حداقل یک الکترون جفت نشده داشته باشند.

شکل زیر قاعده هوند را نشان می‌دهد. در این شکل، اوربیتالها به صورت مربع نشان داده شده‌اند. ترتیب پر شدن اوربیتالها، با شماره الکترونیایی که مربعهای مزبور را پر می‌کنند بیان شده است. چون الکترونها بار منفی دارند و یکدیگر را دفع می‌کنند، ابتدا با جاگیر شدن تکی در سه اوربیتال  $2p$  مجزا حداکثر فاصله را با هم حفظ می‌کنند تا آنکه از عنصر اکسیژن به بعد جفت شدن در اوربیتالهای  $2p$

شروع شود. آرایش الکترونی  $B, C, N, O, F$  و  $Ne$  که در جدول آورده شده‌اند، عملکرد قانون هوند را نشان می‌دهد. پنج اوربیتال پوسته فرعی  $d$  و هفت اوربیتال پوسته فرعی  $f$  به همین ترتیب پر می‌شوند. تک الکترونها، اوربیتالها را یکی پس از دیگری اشغال می‌کنند و تنها پس از آنکه هر اوربیتال پوسته فرعی دارای یک الکترون شد، جفت شدن الکترونها آغاز می‌شود. قاعده هوند، به وسیله اندازه‌گیریهای مغناطیسی مورد تایید قرار گرفته است.



شکل ترتیب پر شدن اوربیتالها در پوسته‌های  $n=1$  و  $n=2$

تعداد الکترونهاى جفت نشده در یک اتم، یون یا مولکول را می‌توان توسط اندازه‌گیریهای

مغناطیسی تعیین کرد. مواد پارامغناطیس به درون میدان مغناطیس جذب می‌شوند (شکل)

موادی که حاوی الکترونهاى جفت نشده هستند، پارامغناطیس‌اند.

گشتاور مغناطیسی به تعداد الکترونهاى جفت نشده ماده بستگی دارد.

دو عامل در خاصیت پارامغناطیسی یک اتم سهیم‌اند: اسپین الکترون جفت نشده و حرکت

اوربیتالی این نوع الکترونها. بین این دو، تاثیر اسپین الکترون، بیشتر است و در بسیاری از موارد تاثیر

حرکت اوربیتالی ناچیز است.

مواد دیامغناطیس، از طرف میدان مغناطیسی، به طور ضعیفی، دفع می‌شوند (شکل). ماده‌ای

دیامغناطیسی است که تمام الکترونهای آن جفت شده باشند. دیامغناطیس بودن خاصیت تمام مواد

است، اما اگر ماده دارای الکترون جفت نشده هم باشد خاصیت دیامغناطیس به علت ضعیف بودن آن در

برابر اثر قوی پارامغناطیسی پوشیده می‌ماند.

پس بیان ساده این قاعده در مورد توزیع الکترونها بین اوربیتالهای یک تراز چنین است: هر گاه

الکترونها، چند اوربیتال هم‌تراز در اختیار داشته باشند، ابتدا به طور منفرد آن اوربیتالها را اشغال

می‌کنند و تا آن تراز نیم‌پر نشود، الکترونها در هیچ یک از آن اوربیتالها جفت نمی‌شوند.



شکل: تعیین خواص مغناطیسی (الف) ماده در غیاب میدان مغناطیسی توزین می‌شود (میدان خاموش است). (ب)

نمونه دیامغناطیسی توسط میدان دفع می‌شود. (ج) پارامغناطیس به درون میدان مغناطیسی جذب می‌شود.

