

الذرات المتعددة الالكترونات وقاعدة الاستثناء لباولي :-
(polyelectronic Atoms and the pauli principle)

By

Dr. Iekaa K. Abdul Kareem

بالنسبة للبنيات الالكترونية للذرات المتعددة الالكترونيات سوف يكون

اعداد الكم ($n, \ell, m\ell, ms$) لكل الكترون

- وحسب قاعدة باولي للاستبعاد :- لا يوجد هنالك الكترونات في ذرة واحدة لهما نفس مجموعة اعداد الكم الاربعة ونتيجة لهذه القاعدة نجد انه لا ($n, \ell, m\ell, ms$) يمكن لكثر من الكترونين ان يشغلا اورياً واحداً .

- وبذلك يجب ان يحمل الكترونا ذرة الهليوم ($Z=2$) في الحالة الهادئة (ground state) اعداد الكم الآتية :-

$$\text{He} = 1s^2 \quad 1\downarrow$$

$$n = 1, \ell = 0, m\ell = 0, ms = +\frac{1}{2} \quad \bullet$$

$$n = 1, \ell = 0, m\ell = 0, ms = -\frac{1}{2} \quad \bullet$$

- وبتعبير اخر يوضع الكترونا ذرة الهيليوم في اوربيتال (1s) بحالتي برم مختلفتين ليكونا ضمن ما تطلبه قاعدة باولي :-
- وفيها 1 يعني $ms = +\frac{1}{2}$ او يرمز له α
- و β يعني $ms = -\frac{1}{2}$ او يرمز له β
- واذا ما أردنا مناقشة الذرات متعددة – الكترونات مثل He فمن المستحسن التطرق الى مفهوم الشحنة المؤثرة للنواة (nuclear charge) (Z_{eff}) effective)
- فالشحنة الفعلية للنواة الهيليوم $(2+)$ ، الا أن القوة الكلية لهذه الشحنتين تبعثر جزئياً بالتناثر المتبادل بين الالكترونين وبالتالي فإن Z_{eff} تكون أقل من $(2+)$.
- وذلك بسبب الحجب shielding الذي يوفره الالكترون الثاني .

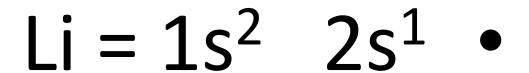
- ان احدى خواص الذرة التي تعكس ان z_{eff} اقل من +2 هي **طاقة التأين IE** للهيليوم التي هي 24.59ev (الكثرون فولت) فاذا لم يكن هناك تنافر الكثرون – الكثرون سوف يحسب عند ذلك كل الكثرون بكامل الشحنة (+2) .
- وعندها تكون **IE** مساوية لذلك القيمة للذرات المشابهة للهيدروجين اي ($Z= +2$)
- الكثرون فولت $IE = 13.6 \times 2^2 = 54.4 \text{ ev}$
- وبالتالي اختزال تنافر الكثرونيين بصورة كبيرة من طاقة تأين الهيليوم وبذلك ادخلنا استخدام مفهوم Z_{eff} .

- ولتمثيل ذلك نأخذ اوريتالات $2s, 2p$ في ذرة الليثيوم Li حيث ان كلا الاوربتالين محجوبان عن شحنة النواة $+3$ بالكترونا $1s$ ولكن بسبب كثافة الاحتمالية العليا بالقرب من النواة .

- لا يكون اوريتال $2p$ محجوباً بقوة مثل اوريتال $2s$.

- اوريتال $2s$ ينفذ الغلاف الالكتروني ($1s$) أكثر من اوريتال ($2p$) تسلسل الطاقة يصبح $2s < 2p$

- حيث يحتل الالكترون الثالث لليثيوم اوريتال $2s$ في الحالة الهادئة .



• لنأخذ الآن الليثيوم $Li \rightarrow Z = +3$

• ان اوريتال ممتلىء بالكترונים ولا مجال لاشغال ثالث

• الاوريتالات يجب ان يذهب الالكترون الثالث الى احد
ذات

• $n=2$ $[2s, 2p]$ لهما نفس الطاقة في الذرات المتشابهة

للهدروجين ذهاب الالكترون الثالث الى $2s$ او $2p$ ليس مهم

لانه $2p, 2s$ لهما نفس الطاقة . اما في الذرة المتعددة

الالكترونات فالحجب يعتمد على شحنة النواة وعلى عدد الكم

الثانوي للالكترون المعني .

- من مثال ذرة الليثيوم الذي يسمح لنا بتعريف مصطلح **الكترونات اللب (core)** و**الالكترونات التكافؤية (Valence)**
- **الكترون اللب :-** هي تلك الالكترونات التي تعود للتوزيع الالكتروني للعنصر النبيل في الجدول الدوري الذي يسبق العنصر المعني في المسألة.
- **العناصر النبيلة :-** (He ,Ne ,Ar, Kr , Xe , Rn)
- لليثيوم يكون العنصر النبيل الذي يسبق هو He والذي له التوزيع الالكتروني $1s^2$
- $Li = [He]_2 2s^1$
- **الكترونات التكافؤ :-** وتعرف بأنها جميع الالكترونات التي لاتعود الى الالكترونات اللب اي ان لذرة الليثيوم الكترون واحد تكافؤي في $2s^1$.
-

• ذرة Be $Z=4$

1s 2s

• يكون اوريتال 2s مملوءة بالالكترونات

• $\text{Be}_4 = 1s^2 2s^2 \quad 1\downarrow 1\downarrow$

• ذرة B $Z=5$

• يكون الالكترون الخامس في ذرة البورون يشغل اوريتال

$1s$ $2s$ $2p$ •

$B_5 = 1s^2 2s^2 2p^1$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ •

• ذرة الكربون $Z=6$

• لدينا اختيار لموقع الالكترون الاخير لان هنالك عدة احتمالات للتوزيع وكنا يلي :-

1- $2s^2 \quad 2p^2 \quad 1\downarrow$ •

2- $2s^2 \quad 2p^2 \quad 1 \quad 1$ •

3- $2s^2 \quad 2p^2 \quad 1 \quad \downarrow$ •

• جميع هذه الاحتمالات تمتثل لقاعدة باولي لاستبعاد .

• وعند طرح السؤال التالي اي من هذه الترتيب السابقة هي اكثر استقراراً واقل طاقة لتعبر عن الحالة الهادئة لذرة الكربون ؟

• الجواب :- ان هذه الاختيار ينتهي بأدخال شرط قاعدة هوند

• قاعدة هوند :-

- ان الالكترونات تتوزع بأسلوب منفرد في الاوريتالات المتساوية الطاقة ولا تتزدوج الا اذا اضطرت لذلك .
- ظهرت قاعدة نتيجة للنتافرات التي تحصل بين الالكترونات بسبب تشابه الشحنات .
- لذلك يكون التوزيع الالكتروني للحالة الهادئة في ذرة الكربون هي رقم (2).

•

• في الذرات المتعددة الالكترونات يكون التسلسل الطاقي هو كالآتي :-

$$1s < 2s < 3s < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 5d \simeq 4f < 6p < 7s < 5f$$

• ولغرض استخراج هذه التسلسل تستخدم المخطط التالي :-

n=1	1s					
2	2s	2p				
3	3s	3p	3d			
	4s	4p	4d	4f		
	5s	5p	5d	5f	5g	
	6s	6p	6d	6f	6g	
	7s	7p	7d	7f		
	8s	8p				

• وتكون البداية من نهاية السهم والنهائية عند رأسه .

- يطلق على قاعدة ايجاد الترتيب الالكتروني للعناصر تباعاً باضافة بروتون الى نواة العنصر والالكترون خارج النواة باسم البناء (Aufbau principles)



• الترتيب الالكتروني وتسلسل مستويات الطاقة للعناصر الانتقالية

• في هذا الجزء يهمننا ان نبين ان تنافر الالكترونات فيما بينها يكون مهماً في تعيين اشغال الالكترون للاوريتالات 4s,3d لذرات العناصر الانتقالية .

• الجدول (١-٢) ص^{٤٧} يبين ان اوريتال 4s يملئ قبل اوريتال 3d الا ان للكروم Cr والنحاس وعناصر انتقالية اخرى غيرها توزيعاً الكترونياً مخالفاً للخطط اعلاه وكما يلي :-

• 1- Sc

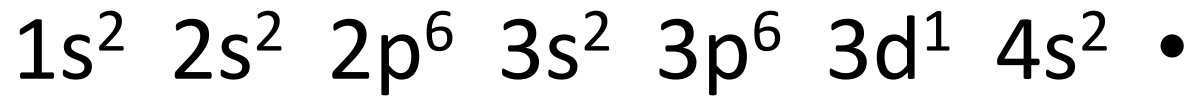
• تسلسل طاقي

• $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 2d^1$

•

الالكترونات اللب [Ar]

• ترتيب الكتروني اعتيادي



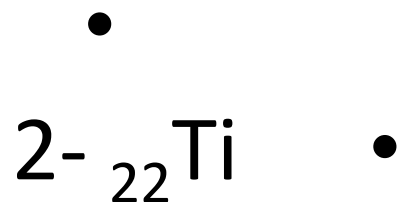
• وعليه



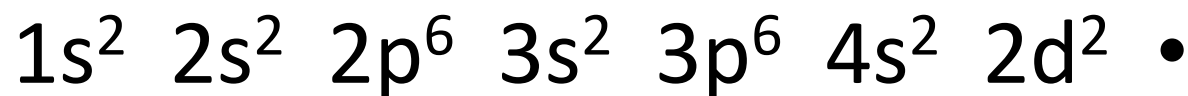
الترتيب

الالكتروني المختصر

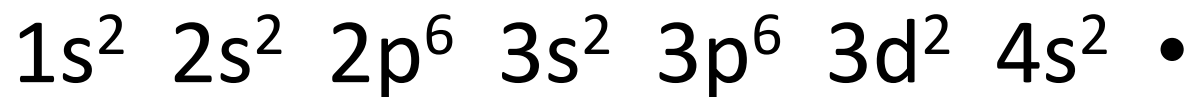
•



• تسلسل طاقي



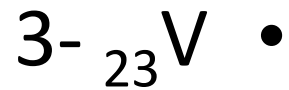
• ترتيب الكتروني



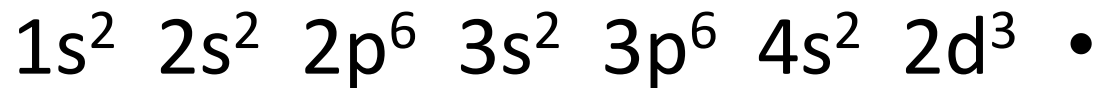
• الترتيب الالكتروني المختصر



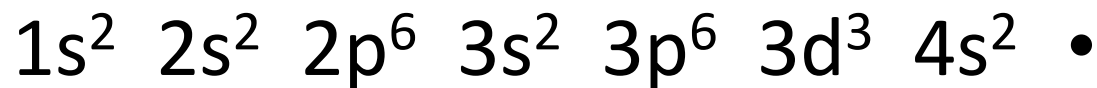
•



• تسلسل طاقي



• ترتيب الكتروني



• الترتيب الالكتروني المختصر



•

4- ${}_{24}\text{Cr}$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 2d^5$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ •

•

• $[\text{Ar}]_{18} 3d^5 4s^1$

-

5- ${}_{25}\text{Mn}$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 2d^5$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$ •

- $[\text{Ar}]_{18} 3d^5 4s^2$

6- $_{26}\text{Fe}$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 2d^6$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ •

• $[\text{Ar}]_{18} 3d^6 4s^2$

7- $_{27}\text{Co}$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 2d^7$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$ •

• $[\text{Ar}]_{18} 3d^7 4s^2$

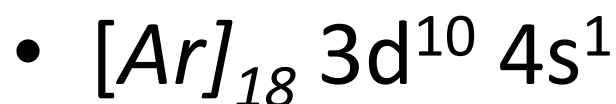
8- $_{28}\text{Ni}$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 2d^8$ •

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$ •

• $[\text{Ar}]_{18} 3d^8 4s^2$

- $9- {}_{29}\text{Cu} =$



- السبب في ذلك هو كون اوريتال d المشبع يكون اكثر استقراراً

- كما يتوقع ازاحة الالكترونات بصورة عكسية لبناء الترتيب الالكتروني وهناك العديد من الاستثناءات

- مثال :- ما أعداد الكم الأربعة للإلكترون الأخير في ذرة
- $_{21}\text{Sc}$ وماهي أعداد الكم للإلكترون الأخير Sc^{2+} ؟



$$n=3 \quad , \quad \ell = 2 \quad , \quad m\ell = +2 \quad , \quad ms = +\frac{1}{2}$$



- له نفس أعداد الكم السابقة للإلكترون الأخير $\therefore$