

مفهوم اوربیتال

تابع موجی Ψ وابسته به یک الکترون را که به تعریف دانسیته احتمال توزیع الکترون در فضای پیرامون هسته، منجر می‌گردد، " اوربیتال *orbital* " می‌گویند، در صورتی که برای الکترون مطابق نظریه بوهر، مدار مشخصی به نام *orbit* در نظر گرفته شده بود.

تابع موجی Ψ در حقیقت تابعی از دامنه است ولی معنی فیزیکی آن با مثال ما در مورد فشار هوا یا شدت میدان الکتریک و مغناطیسی تفاوت دارد. می‌دانیم که در امواج نوری یا صوتی، شدت موج متناسب با مجذور دامنه است. چون در نظریه کوانتومی یا ذره‌ای بودن نور، شدت متناسب با تعداد فوتونها باید باشد، پس به طور عمومی‌تر، می‌توان به جای شدت موج، تعداد ذره‌های موجود در ناحیه‌ای از فضا را گرفت و گفت که " تعداد ذره‌های موجود در ناحیه‌ای از فضا بستگی به مجذور دامنه موج یا $|\psi|^2$ دارد.

در واقع مجذور تابع موج $|\psi|^2$ برای مطالعه چگونگی آرایش الکترونی در اتم اهمیت بسزائی دارد. زیرا، این مقدار نمایشگر احتمالات حضور یک الکترون وابسته به یک سطح انرژی معین در واحد حجم از فضای پیرامون هسته است. به عبارت دیگر، $|\psi|^2$ دانسیته بار الکترون در واحد حجم مزبور را در آن ناحیه از فضا نشان می‌دهد.

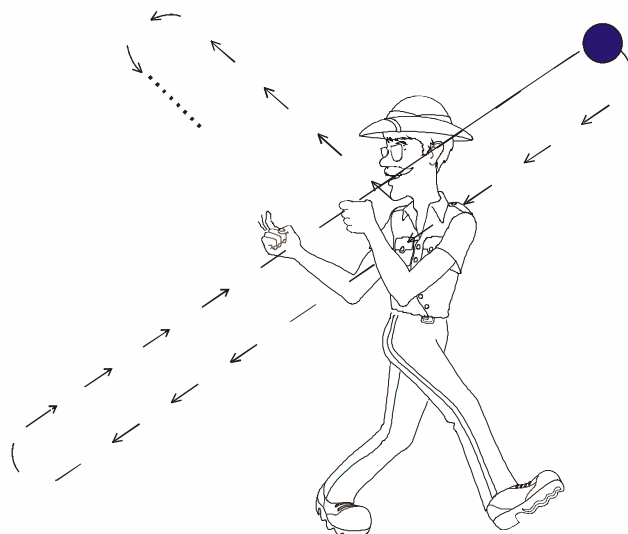
واقعیت آن است که تصویر الکترون چرخان در مدارهایی به دور هسته را که گاه و بیگاه روی صفحه تلویزیون و در مجله‌ها و کتابها می‌بینیم، نوعی میراث ادبیات علمی را منعکس می‌کند. خود بوهر نیز بر این امر واقف شد که نمی‌توان از مکانیک نیوتنی برای تفسیر و پیش بینی حرکت ذرات ریزی چون الکترون

استفاده نمود. اتم بوهر مدل خوبی برای ربط دادن تغییرات انرژی در اتم با طول موج و انرژیهای نشر شده یا جذب شده در طیفهای مشهود عناصر، به شمار می‌رود ولی این مدل مطلب با ارزشی درباره چگونگی توزیع الکترونی در فضا به ما نمی‌دهد. در صورتیکه مقدار $|y|^2$ قادر است احتمال پیدا کردن الکترون را در هر نقطه در اطراف هسته در اختیار قرار دهد ولی از بیان چگونگی رسیدن یک الکترون از یک نقطه به نقطه دیگر عاجز است.

بنابراین و به طور کلی $|y|^2$ نحوه توزیع یا احتمال یافتن الکترون را پیرامون هسته نشان می‌دهد و از روی آن می‌توان توزیع احتمال ماکزیمم الکترون را در ناحیه‌های معینی پیرامون هسته بدست آورد و این خود ارزش فراوانی دارد. معمولاً حجمی از فضا را که الکترون در حدود 90 درصد وقت خود را در آن می‌گذراند "اوربیتال" می‌نامند.

شاید بتوان از نوعی تمثیل برای ایجاد تصویری ساده از چگونگی حرکت الکترون در اتم و بویژه در اوربیتال s، استفاده کرد. هرگاه یک توپ کوچک را مانند شکل زیر، به سر یک رشته کش ببندیم و سر دیگر را بدست گرفته و با وارد کردن مقدار نسبتاً ثابت نیرو، توپ را در اطراف دست خود به چپ و راست، بالا و پایین و اینجا و آنجا برانیم و بکشیم، به برخی موارد تشابه زیر در مورد حرکت الکترون دور هسته می‌رسیم:





1. توپ همواره در جریان یک حرکت تصادفی بوده و مسیر مشخصی را تعقیب نمی‌کند. گاهی از

دست دور است و زمانی به آن نزدیک می‌شود، ولی اغلب و به طور میانگین، فاصله نسبتاً

مشخصی نسبت به آن دارد.

2. توپ در همه جهات، بالا و پایین، چپ و راست، جلو و عقب و غیره در حرکت است.

حال اگر مقدار نیروی مؤثر دست را به مقدار مشخصی بالا ببریم (سطح انرژی را بالا ببریم)، شعاع

حرکت توپ بیشتر شده و فضای "کروی" بزرگتری اشغال می‌کند. در اینجا می‌توان مسئله برانگیخته شدن

الکترون و رسیدن به سطح انرژی بالاتر را به نحوی مطرح کرد.

بدیهی است که موارد تفاوت متعددی بین این تمثیل و واقعیت ساختمان الکترونی اتم وجود دارد. از

جمله آنکه، الکترون انرژی ذاتی و حرکت جاودانه‌ای در یک فضای خالی و بدون اصطکاک دارد ولی در این

تمثیل، برای حرکت توپ از نیروی دست استفاده کردیم. همچنین در این تمثیل به یک فضای کروی می‌رسیم

که با یک نوع تراز انرژی در اتم مطابقت می‌کند.

اوربیتالهای با شکلهای متفاوت وجود دارند که ترازهای انرژی خاصی داشته و معمولاً آنها را با مشخصه‌هایی به نام اعداد کوانتایی توصیف می‌کنند. برحسب قرار داد، از حروف ویژه‌ای نیز برای نشان دادن انواع ترازهای "فرعی" انرژی استفاده می‌شود که قبلاً برای توصیف خطوط طیفی به کار می‌رفتند. این حروف عبارتند از s از $sharp$ یا تیز، p از $principal$ یا اصلی، d از $diffuse$ یا پراکنده و f از $fundamental$ یا بنیادی.

