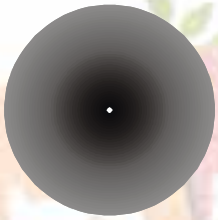
مقدمه

معادلهٔ شرودینگر، پایه مکانیک موجی است. معادله برحسب یک تابع موجی، y (سای)، برای الکترون نوشته می‌شود. وقتی معادله برای الکترون در اتم هیدروژن حل می‌شود، یک سلسله تابع موجی بدست می‌آید. (هر تابع موجی به یک حالت معین انرژی برای الکترون مربوط است و ناحیه‌ای در اطراف هسته را توضیح می‌دهد که در آن امکان یافتن الکترون وجود دارد.) تابع موجی یک الکترون آنچه را که یک اوربیتال نامیده می‌شود، توصیف می‌کند.

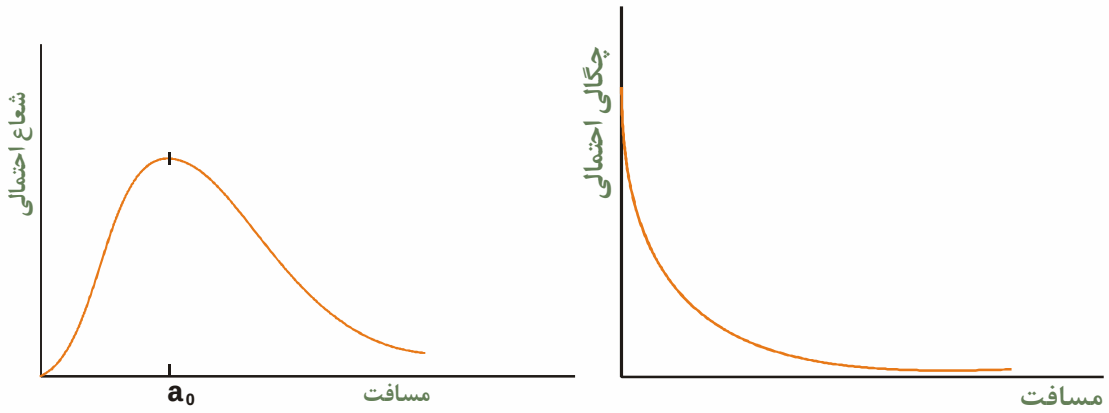
شدت هر موج، با مجذور دامنه آن متناسب است. تابع موجی، y ، تابع دامنه است. مقدار y^2 برای یک حجم کوچک در هر موقعیتی در فضا، متناسب با چگالی بار الکترونی در آن حجم است. می‌توان تصور کرد که بار الکترون به سبب حرکت سریع الکترون به صورت ابر باردار در فضای دور هسته گسترده شده است. این ابر در برخی نواحی غلیظتر از نواحی دیگر است. احتمال یافتن الکترون در هر ناحیه معین متناسب با چگالی ابر الکترونی در آن ناحیه است. این احتمال در ناحیه‌ای که ابر الکترونی غلیظتر است بیشتر خواهد بود. این تفسیر کوششی برای توصیف مسیر الکترون به عمل نمی‌آورد، بلکه فقط پیش بینی می‌کند که احتمال یافتن الکترون در کجا بیشتر است.

در مورد یک الکترون در حالت $n=1$ اتم هیدروژن، ابر باردار، بالاترین چگالی را در نزدیکی هسته دارد و به تدریج که فاصله از هسته افزایش می‌یابد، رقیقتر می‌شود.



مقطع ابر باردار یک الکترون در حالت $n=1$ اتم هیدروژن

www.ShimiPedia.ir



(الف) (ب)

منحنی‌های احتمال برای یک الکترون در حالت $n=1$ اتم هیدروژن. (الف) احتمال یافتن الکترون در واحد حجم بر حسب فاصله از هسته. (ب) احتمال یافتن الکترون در فاصله معین بر حسب فاصله از هسته.

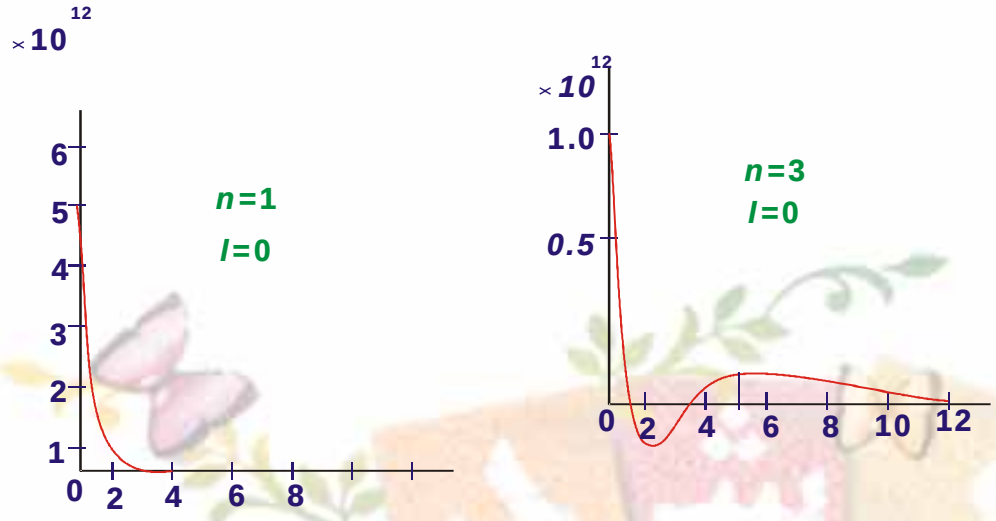
در منحنی (الف)، y^2 برحسب فاصله از هسته، ترسیم شده است. احتمال یافتن یک الکترون در قسمت کوچکی از حجم در فضا در نزدیکی هسته، بیشترین مقدار را دارد و با ا فزایش فاصله تا هسته به سمت صفر میل می‌کند. منحنی (ب) توزیع احتمال شعاعی را نشان می‌دهد. در آن احتمال کل یافتن الکترون در فاصله‌ای معین از هسته، برحسب فاصله ترسیم شده است. لایه‌های کروی بسیار نازکی را که یکی پس از دیگری بطور متحدالمرکز به دور هسته قرار دارند، تصور کنید. احتمال یافتن الکترون در هر یک از این لایه‌ها چه مقدار است؟ احتمال یافتن الکترون در واحد حجم فضای نزدیک به هسته بیشترین مقدار خود را دارد، ولی در عوض یک لایه نزدیک به هسته، در مقایسه با لایه‌های دورتر، تعداد کمتری واحد حجم را در بر می‌گیرد. احتمال شعاعی هر دو این عوامل را با هم به حساب می‌آورد.

شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران
www.ShimiPedia.ir

منحنی (ب) در فاصله a_0 دارای ماکزیممی است. یعنی احتمال کل یافتن الکترون در تمام نقاطی که از هسته به فاصله a_0 هستند بیشترین مقدار را دارد. مقدار a_0 برابر مقداری است که از طریق نظریهٔ بور برای شعاع لایه $n=1$ تعیین شده است.

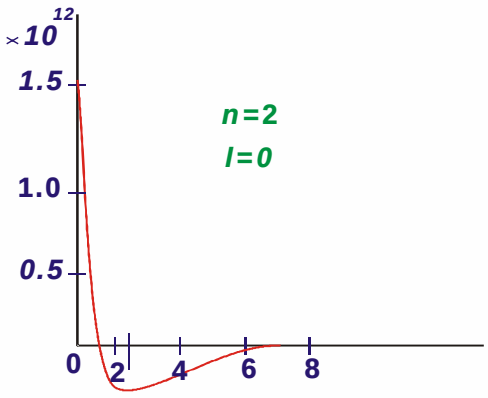
در نظریه بور، a_0 فاصله‌ای است که همواره الکترون لایه $n=1$ از هسته داراست. در مکانیک موجی a_0 فاصله‌ای از هسته است که الکترون در آن حضور بیشتری دارد.

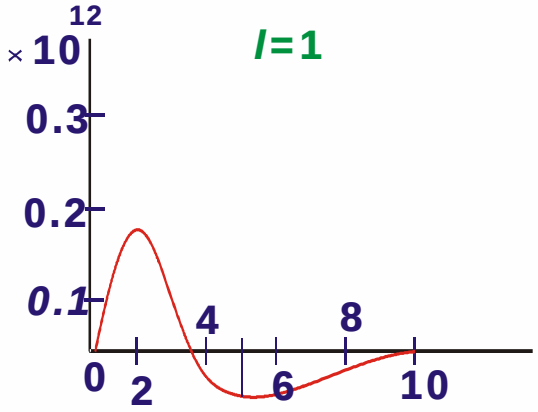
از آنجا که اصولاً در هر فاصله معین از هسته الکترون امکان حضور دارد، ترسیم ناحیه‌ای با مرز مشخص که احتمال 100 درصد وجود الکترون را در بر بگیرد، ناممکن است. اما می‌توان سطح مرزی را رسم کرد که بتواند نقاط با احتمال یکسان را به هم بپیوندد و در برگیرنده حجمی باشد که در آن احتمال یافتن الکترون زیاد (مثلاً 90 درصد) است. چنین شکلی نمودار سطح مرزی نامیده می‌شود، نمودار توابع موج شعاعی اوربیتالهای $3d,3p,3s,2p,2s,1s$ نسبت به فاصله الکترون از هسته (r) در شکل زیر نشان داده شده است.

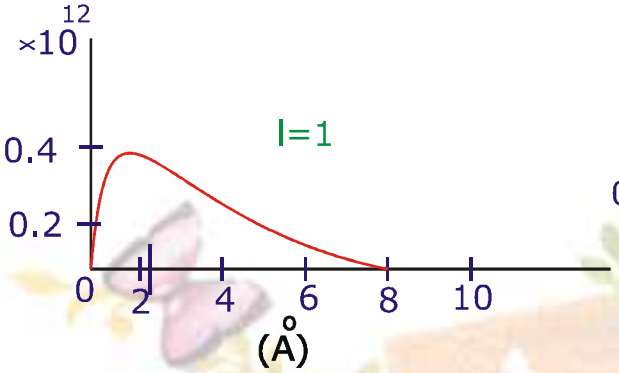


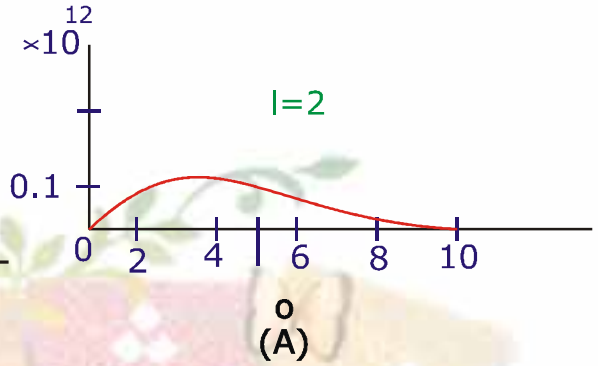
شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران
www.ShimiPedia.ir

شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران









نمودارهای تغییرات جزء شعاعی توابع خاص اتم هیدروژن نسبت به فاصله الکترون از هسته

www.ShimiPedia.ir

با توجه به نمـودارهای این شکل می‌توان دو ویژگی زیر را درباره نمـودارهای جزء شعاعی تابع مـوج الکتـرون، در نظر گرفت:

1. دامنه موج به طور نمایی با افزایش فاصله الکترون از هسته کاهش می‌یابد و هر چه عدد کوانتومی اصلی بزرگتر باشد، این کاهش با تندی کمتری صورت می‌گیرد (یعنی با $e^{-\frac{zr}{na_0}}$ متناسب است). بـر همـین اساس است که با افزایش عدد کوآنتومی اصلی، شعاع و اوربیتالهای اتمی، بزرگتر می‌شود.

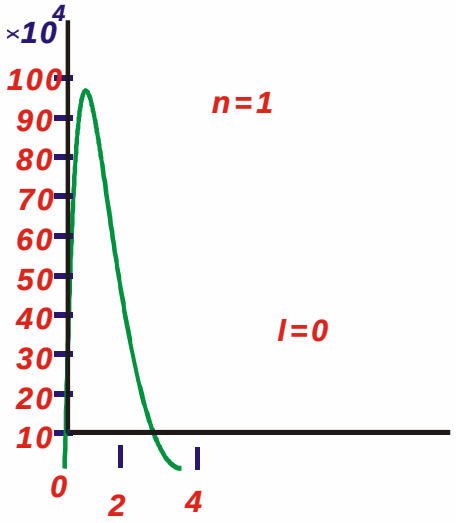
2. در مورد اوربیتال $2s$ به ازای $r=\frac{2a_0}{Z}$ مقدار تابع $R=0$ می‌شـود کـه ایـن نقطـه را اصـطلاحاً گـره می‌نامند. علامت تابع موج که قبل از رسیدن به این نقطه، مثبت است، بعد از این نقطه تغییر مـی‌کنـد (منفی می‌شود). این روند در مورد اوربیتالهای $3s,4s,...$ و $3p,4p,4d,5d...$نیز مشاهده می‌شـود. بـه طوری که تعداد گره ها در مورد اوربیتالهای s برابر $n-1$، در مورد اوربیتالهای p برابر $n-2$و در مـورد اوربیتالهای d برابر $n-3$ است: مثلاً در نمودار مربوط بـه اوربیتـال $3s$، دو گـره $(3-1=2)$، اوربیتـال $3p$، یک گره $(3-2=1)$وجود دارد در صورتی که در نمـودار مربـوط بـه اوربیتـال $3d$ ، گـره دیـده نمی‌شود. $(3-3=0)$.

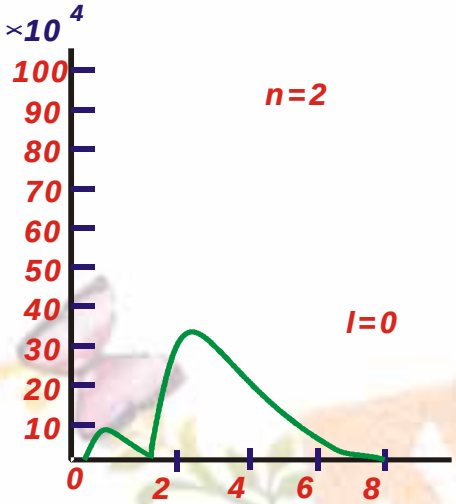
با توجه به اینکه احتمال یافتن الکترون در نقاط مختلف فضای اطراف هسته که با مجذور دامنـه مـوج الکتـرون متناسب است مورد توجه می‌باشد از این رو به جای روند تغییرات تابع موج بهتر است کـه مجـذور دامنـه تـابع مـوج شعاعی (R_r^2) در نظر گرفته شود تا بتوان از روی آن تغییرات تابع احتمال شعاعی (P_r) را نسبت بـه فاصـله از هـسته (r)مورد بررسی قرار داد.

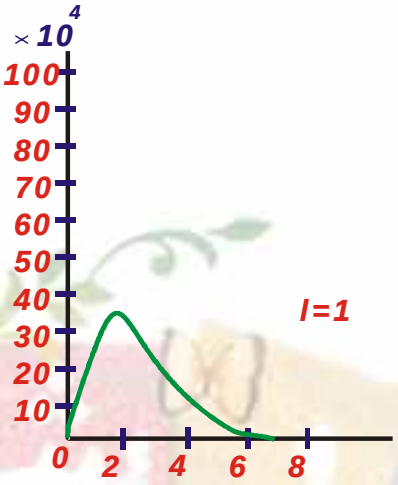
نمودار تغییرات تابع احتمال شعاعی برای اوربیتالهای $1s,2s,2p,3s,3p,3d$ اتم هیـدروژن نـسبت بـه فاصـلهٔ

www.ShimiPedia.ir

الکترون از هسته، در شکل زیر نشان داده شده‌اند.

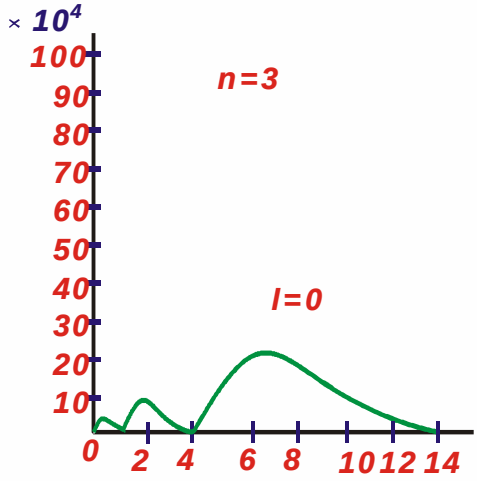


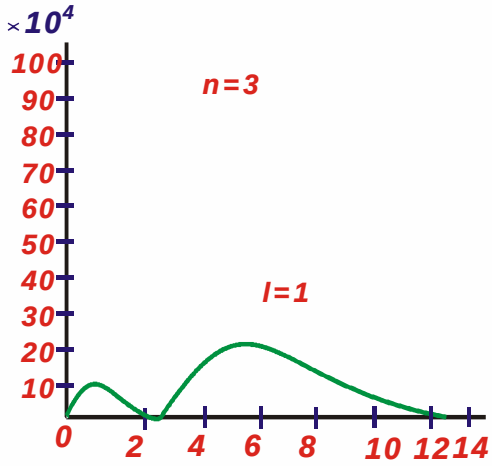


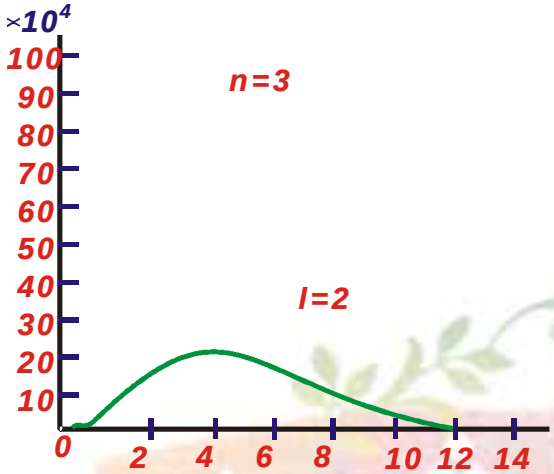


شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران
www.ShimiPedia.ir

شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران







نمودار تغییرات تابع احتمال شعاعی اوربیتالهای اتم هیدروژن

www.ShimiPedia.ir

از مقایسهٔ شکلهای بالا می‌توان دریافت که وضعیت گرهها در هر دو دسته از نمودارها مشابه و تعداد آنها برابر است.

همانطور که قبلاً اشاره شد، تابع موج الکترون پیوسته است، در مورد اوربیتالهای $1s, 2p, 3d, \ldots$ **به ازای** $r = 0, r = \infty$ **مقدار تابع احتمال شعاعی برابر صفر است. از این رو، این تابع دارای ماکزیممی خواهد بود که مثلاً در مورد اوربیتال** $1s$ **به فاصله** $r = 0/529$ **آنگستروم یعنی همان شعاع اتم هیدروژن در حالت ایستاده، مربوط است.**

شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران
www.ShimiPedia.ir