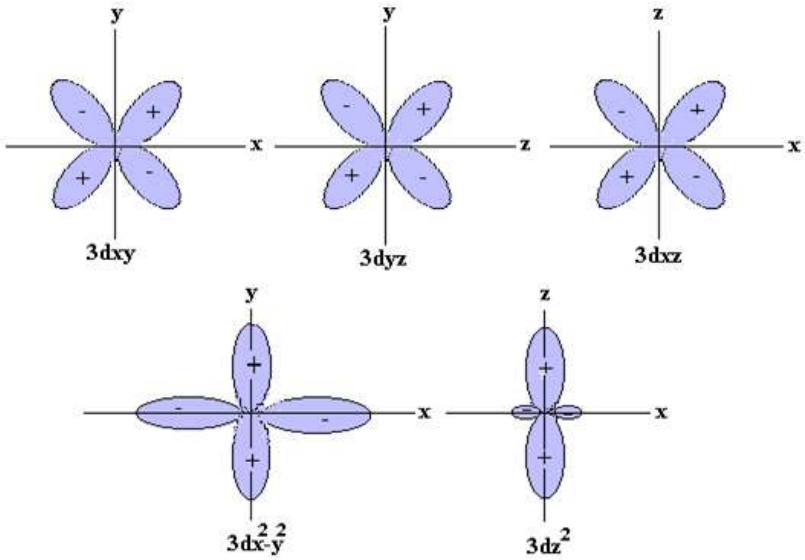
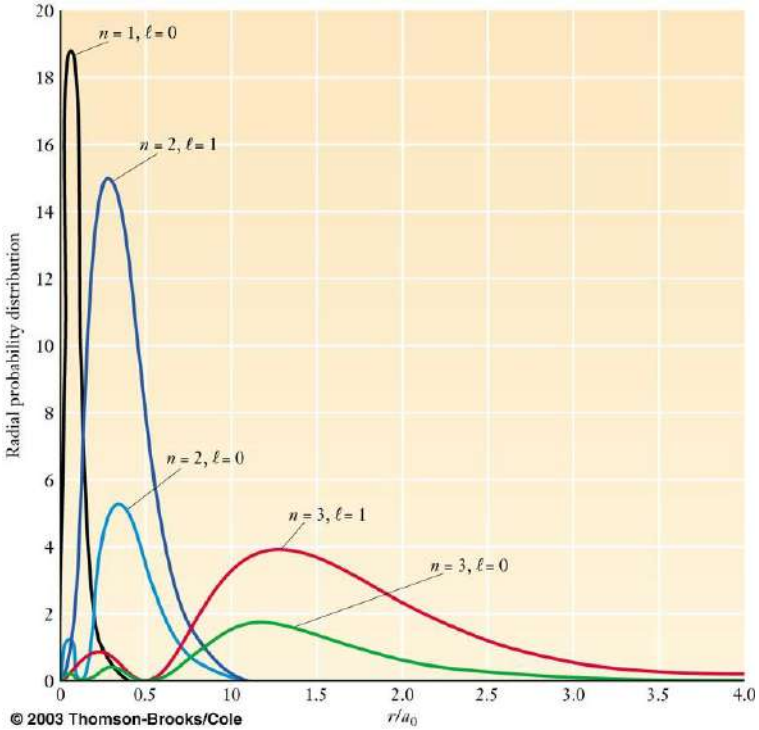
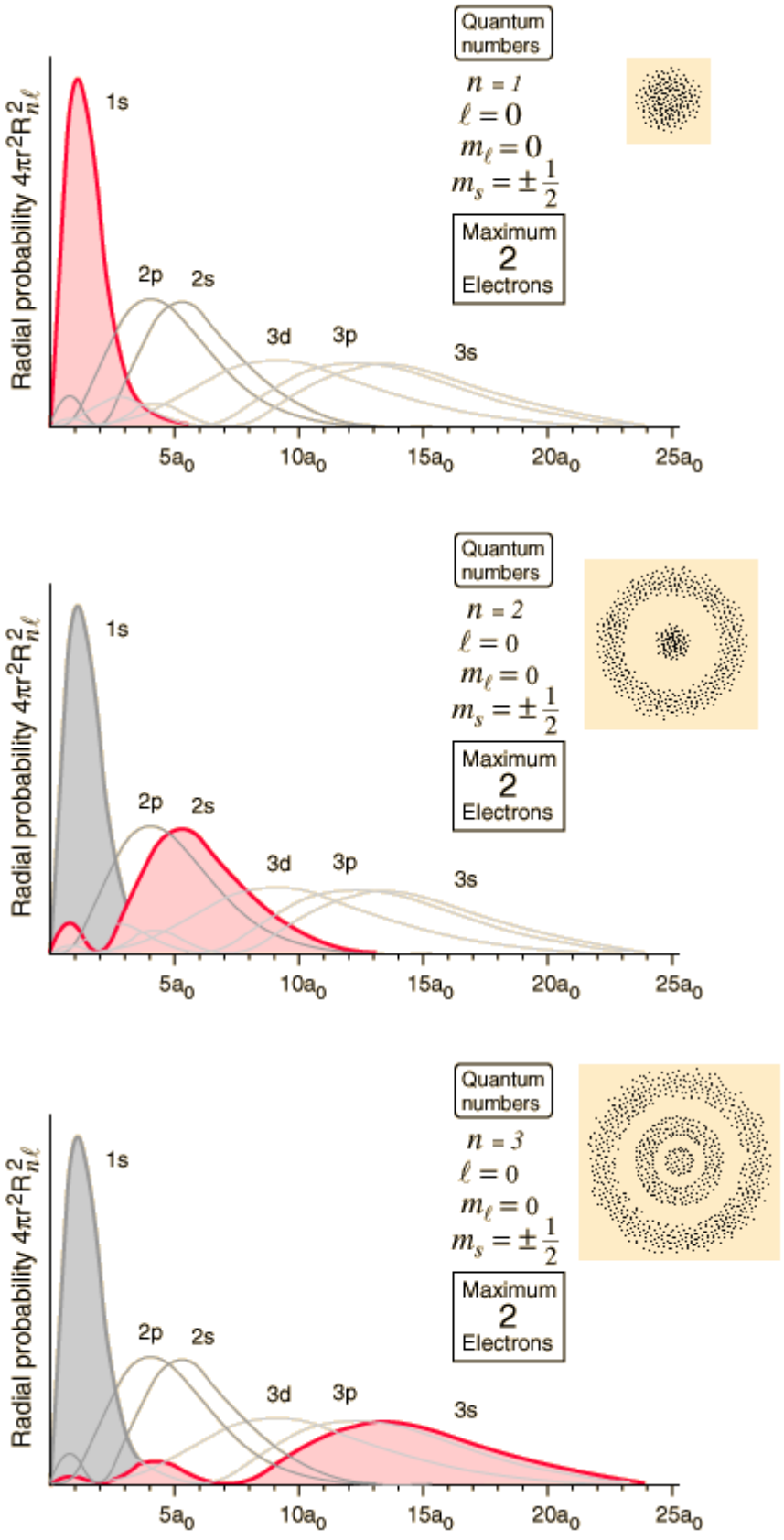



اشكال واتجاهات مدارات 3d الخمسة

في الرسم البياني للاحتمالية ( $4\pi r^2R^2$ ) بمثابة دالة لـ r . تظهر هذه النقطة القصوى عند $r = a_0$، والتي هي قيمة نصف قطر بور . كما يبين الشكل التالي دالات احتمالية مماثلة ( بضمنها العامل $4\pi r^2$ ) للاغلفة الثانوية 2s, 2p, 3s, 3p, 3d . ان وجود عقدة ( node ) في دالة الموجة يعني أن هنالك نقطة في الفضاء يكون احتمال وجود الالكترون فيها صفراً . من الواضح في الشكل ١ ـ ١٩ ان عدد العقد في اوربتالات s هي( n – 1 )وفياوربتالات p هي ( n – 2 )وفي d, ( n – 3 )




Quantum numbers
n = 1
ℓ = 0
m_ℓ = 0
m_s = ±1/2
Maximum 2 Electrons
Radial probability 4πr²R²nℓ
1s
2p
2s
3d
3p
3s
5a0
10a0
15a0
20a0
25a0
Quantum numbers
n = 2
ℓ = 0
m_ℓ = 0
m_s = ±1/2
Maximum 2 Electrons
Radial probability 4πr²R²nℓ
1s
2p
2s
3d
3p
3s
5a0
10a0
15a0
20a0
25a0
Quantum numbers
n = 3
ℓ = 0
m_ℓ = 0
m_s = ±1/2
Maximum 2 Electrons
Radial probability 4πr²R²nℓ
1s
2p
2s
3d
3p
3s
5a0
10a0
15a0
20a0
25a0

## مبدأ باولي للاستثناء Pauli Exclusion Principle

ان وجود الالكترون في اوربتال معين يمكن وصفه بذكر الاعداد الكمية الاربعة السالفة الذكر. وينص مبدأ باولي للاستثناء الى **انه لا يمكن ان يكون لالكترونين في ذرة ما نفس الاعداد الكمية الاربعة.** فأذا احتل الكترونان نفس المدار كما في ذرة الهيليوم، حيث يتواجد الكترونان في مدار 1s، فعلى الرغم من تشابههم في الاعداد الكمية الثلاثة الاولى، الا انهم يختلفان في قيمة $m_s$ حيث يكون لاحدهما $m_s = +1/2$ وللاخر $m_s = -1/2$.

## قاعدة هوند Hund's Rule

تنص قاعدة هوند **على ان الالكترونات عند اشغالها للمدارات المختلفة، تميل الى عدم الازدواج، اي تميل الى الابتعاد عن بعضها.** ولكن عندما تمتلئ المدارات بالكترونات مفردة، فأنها تزدوج بالرغم من تنافرها وذلك لاختلاف اتجاه برمها حول نفسها مع اتجاه برمها حول النواة، حيث يتولد مجال مغناطيسي يقلل تنافرها مع بعضها. فلو اخذنا ذرة الكربون التي تحتوي على الكترونين في مدار 2p، فأن هنالك ثلاثة طرق لاشغال هذين الالكترونين للمدار وكمايلي:

[ ↑ ][ ↑ ][ ] A
[ ↑ ][ ↓ ][ ] B
[ ↑↓][ ][ ] C

أشرنا بسهم الى الاعلى ↑ للعدد الكمي المغزلي +1/2 ، وسهم الى الاسفل ↓ للعدد الكمي المغزلي −1/2. وطبقا لقاعدة هوند، فأن الشكل الاكثر استقرارا هو الذي تشغل فيه الالكترونات ذات البرم المتوازي في المدارات المختلفة وباقل تنافر بينها، وبذلك يكون بالطبع الشكل A له برم متوازي واقل تنافر.

## الترتيب الالكتروني للعناصر Electronic Configuration of Elements

ان الترتيب الالكتروني للذرات في حالة السكون يتم حسب زيادة العدد الذري، ويجب ان نأخذ بالاعتبار مبدأ باولي للاستثناء وقاعدة هوند وفي الجدول التالي الترتيب الالكتروني للعناصر.

فلذرة الهيدروجين H في حالة السكون الكترون واحد ولذرة الهيليوم He الكترونان، لذلك فعدد الكم الرئيسي المتوفر هو n=1، حيث يدخل الكترون ذرة الهيدروجين والكترونا ذرة الهيليوم في المدار 1s، لانه هو المدار الادنى طاقة. ويكون الترتيب الالكتروني لهما كالاتي:

H: $1s^1$ [↑] ، [↑↓] He: $1s^2$

يلي ذلك عنصر الليثيوم Li والبريليوم Be، حيث يبدأ اشغال مدار 2s ويكون لهما الترتيب الالكتروني التالي:

Be: [He] $2s^2$ [↑↓] ، Li: [He] $2s^1$ [↑]

ان الالكترونات المرسومة داخل الاقواس ( والتي تمثل المدارات ) هي الكترونات التكافؤ وتسمى مداراتها مدارات التكافؤ ، وهي التي تكون مسؤولة عن الصفات الكيمياوية للمركبات. بعد ذلك يمتلئ مدار 2p من البورون B الى النيون Ne حيث يكون الترتيب الالكتروني للنيون كالاتي:

Ne: [He] $2s^2$ $2p^6$ [↑↓] [↑↓][↑↓][↑↓]

في هذه المرحلة يكون الغلاف الذي له n=2 قد امتلأ ، ويبدأ الان امتلاء مدارات 3s و 3p بدءا من الصوديوم Na الى الاركون Ar ، لذلك يكون الترتيب الالكتروني للاركون كالاتي:

Ne: [He] $3s^2$ $3p^6$ [↑↓] [↑↓][↑↓][↑↓]

بدءا من البوتاسيوم K فأن الالكترونات تدخل في المدار 4s ويكون الترتيب الالكتروني للكالسيوم Ca الذي يأتي بعد البوتاسيوم كالاتي: [↑↓] Ca : [Ar] $4s^2$. ومن السكانديوم Sc الى الزنك Zn يمتلئ المدار 3d ويكون الترتيب الالكتروني للزنك كالاتي:

Zn: [Ar] $3d^{10}$ $4s^2$ [↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓] [↑↓]

ان مدار 4s يمتلئ قبل 3d لان الاول اقل طاقة. ان الترتيب الالكتروني للكروم Cr هو في الحقيقة [Ar] $3d^5$ $4s^1$ وليس [Ar] $3d^4$ $4s^2$ وللنحاس Cu يكون الترتيب [Ar] $3d^{10}$ $4s^1$ وليس [Ar] $3d^9$ $4s^2$. ان هذا الشذوذ يحدث بسبب ان الغلاف النصف ممتلئ او الممتلئ كليا له ثبات اضافي.

ان امتلاء المدارات يتم حسب السلسلة التالية والتي تسمى ترتيب اوفباو Aufbau order:

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

## جدول يوضح الترتيب الالكتروني للعناصر

| Z | العنصر | الترتيب الالكتروني | Z | العنصر | الترتيب الالكتروني |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | H | $1s^1$ | 27 | Co | $[Ar]\ 3d^7\ 4s^2$ |
| 2 | He | $1s^2$ | 28 | Ni | $[Ar]\ 3d^8\ 4s^2$ |
| 3 | Li | $[He]\ 2s^1$ | 29 | Cu | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^1$ |
| 4 | Be | $[He]\ 2s^2$ | 30 | Zn | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^2$ |
| 5 | B | $[He]\ 2s^2\ 2p^1$ | 31 | Ga | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^1$ |
| 6 | C | $[He]\ 2s^2\ 2p^2$ | 32 | Ge | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^2$ |
| 7 | N | $[He]\ 2s^2\ 2p^3$ | 33 | As | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^3$ |
| 8 | O | $[He]\ 2s^2\ 2p^4$ | 34 | Se | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^4$ |
| 9 | F | $[He]\ 2s^2\ 2p^5$ | 35 | Br | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^5$ |
| 10 | Ne | $[He]\ 2s^2\ 2p^6$ | 36 | Kr | $[Ar]\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^6$ |
| 11 | Na | $[Ne]\ 3s^1$ | 37 | Rb | $[Kr]\ 5s^1$ |
| 12 | Mg | $[Ne]\ 3s^2$ | 38 | Sr | $[Kr]\ 5s^2$ |
| 13 | Al | $[Ne]\ 3s^2\ 3p^1$ | 39 | Y | $[Kr]\ 4d^1\ 5s^2$ |
| 14 | Si | $[Ne]\ 3s^2\ 3p^2$ | 40 | Zr | $[Kr]\ 4d^2\ 5s^2$ |
| 15 | P | $[Ne]\ 3s^2\ 3p^3$ | 41 | Nb | $[Kr]\ 4d^3\ 5s^2$ |
| 16 | S | $[Ne]\ 3s^2\ 3p^4$ | 42 | Mo | $[Kr]\ 4d^5\ 5s^1$ |
| 17 | Cl | $[Ne]\ 3s^2\ 3p^5$ | 43 | Tc | $[Kr]\ 4d^5\ 5s^2$ |
| 18 | Ar | $[Ne]\ 3s^2\ 3p^6$ | 44 | Ru | $[Kr]\ 4d^7\ 5s^1$ |
| 19 | K | $[Ar]\ 4s^1$ | 45 | Rh | $[Kr]\ 4d^8\ 5s^1$ |
| 20 | Ca | $[Ar]\ 4s^2$ | 46 | Pd | $[Kr]\ 4d^{10}$ |
| 21 | Sc | $[Ar]\ 3d^1\ 4s^2$ | 47 | Ag | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^1$ |
| 22 | Ti | $[Ar]\ 3d^2\ 4s^2$ | 48 | Cd | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^2$ |
| 23 | V | $[Ar]\ 3d^3\ 4s^2$ | 49 | In | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^1$ |
| 24 | Cr | $[Ar]\ 3d^5\ 4s^1$ | 50 | Sn | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^2$ |
| 25 | Mn | $[Ar]\ 3d^5\ 4s^2$ | 51 | Sb | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^3$ |
| 26 | Fe | $[Ar]\ 3d^6\ 4s^2$ | 52 | Te | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^4$ |

| Z | العنصر | الترتيب الالكتروني | Z | العنصر | الترتيب الالكتروني |
|---|---|---|---|---|---|
| 53 | I | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^5$ | 79 | Au | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^1$ |
| 54 | Xe | $[Kr]\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^6$ | 80 | Hg | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^2$ |
| 55 | Cs | $[Xe]\ 6s^1$ | 81 | Tl | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^2\ 6p^1$ |
| 56 | Ba | $[Xe]\ 6s^2$ | 82 | Pb | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^2\ 6p^2$ |
| 57 | La | $[Xe]\ 5d^1\ 6s^2$ | 83 | Bi | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^2\ 6p^3$ |
| 58 | Ce | $[Xe]\ 4f^1\ 5d^1\ 6s^2$ | 84 | Po | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^2\ 6p^4$ |
| 59 | Pr | $[Xe]\ 4f^3\ 6s^2$ | 85 | At | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^2\ 6p^5$ |
| 60 | Nd | $[Xe]\ 4f^4\ 6s^2$ | 86 | Rn | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^2\ 6p^6$ |
| 61 | Pm | $[Xe]\ 4f^5\ 6s^2$ | 87 | Fr | $[Rn]\ 7s^1$ |
| 62 | Sm | $[Xe]\ 4f^6\ 6s^2$ | 88 | Ra | $[Rn]\ 7s^2$ |
| 63 | Eu | $[Xe]\ 4f^7\ 6s^2$ | 89 | Ac | $[Rn]\ 6d^1\ 7s^2$ |
| 64 | Gd | $[Xe]\ 4f^7\ 5d^1\ 6s^2$ | 90 | Th | $[Rn]\ 6d^2\ 7s^2$ |
| 65 | Tb | $[Xe]\ 4f^9\ 6s^2$ | 91 | Pa | $[Rn]\ 5f^2\ 6d^1\ 7s^2$ |
| 66 | Dy | $[Xe]\ 4f^{10}\ 6s^2$ | 92 | U | $[Rn]\ 5f^3\ 6d^1\ 7s^2$ |
| 67 | Ho | $[Xe]\ 4f^{11}\ 6s^2$ | 93 | Np | $[Rn]\ 5f^4\ 6d^1\ 7s^2$ |
| 68 | Er | $[Xe]\ 4f^{12}\ 6s^2$ | 94 | Pu | $[Rn]\ 5f^6\ 7s^2$ |
| 69 | Tm | $[Xe]\ 4f^{13}\ 6s^2$ | 95 | Am | $[Rn]\ 5f^7\ 7s^2$ |
| 70 | Yb | $[Xe]\ 4f^{14}\ 6s^2$ | 96 | Cm | $[Rn]\ 5f^7\ 6d^1\ 7s^2$ |
| 71 | Lu | $[Xe]\ 4f^{14}\ 4d^1\ 6s^2$ | 97 | Bk | $[Rn]\ 5f^9\ 7s^2$ |
| 72 | Hf | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^2\ 6s^2$ | 98 | Cf | $[Rn]\ 5d^{10}\ 7s^2$ |
| 73 | Ta | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^3\ 6s^2$ | 99 | Es | $[Rn]\ 5f^{11}\ 7s^2$ |
| 74 | W | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^4\ 6s^2$ | 100 | Fm | $[Rn]\ 5f^{12}\ 7s^2$ |
| 75 | Re | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^5\ 6s^2$ | 101 | Md | $[Rn]\ 5f^{13}\ 7s^2$ |
| 76 | Os | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^6\ 6s^2$ | 102 | No | $[Rn]\ 5f^{14}\ 7s^2$ |
| 77 | Ir | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^7\ 6s^2$ | 103 | Lr | $[Rn]\ 5f^{14}\ 6d^1\ 7s^2$ |
| 78 | Pt | $[Xe]\ 4f^{14}\ 5d^9\ 6s^1$ | 104 | Rf | $[Rn]\ 5f^{14}\ 6d^2\ 7s^2$ |