جامعة تكريت
كلية التربية للبنات
قسم الكيمياء

كيمياء الكم

المرحلة الرابعة

محاضرة

الدالة الموجية المقبولة

م .د.اسيا اكبر توفيق
asya.akbar@tu.edu.iq

الدالة الموجية المقبولة
Acceptable wave function

تعريف الدالة الموجية

هو مصطلحٌ يُستخدم في ميكانيك الكم ويدل على كميةٍ متغيرةٍ تُعبر رياضيًّا عن الصفات الموجية للجسيم وهذا يعني أن قيمة الدّالة الموجية لجسيمٍ ما موجودٌ في مكانٍ وزمانٍ محددين تتعلق باحتمالية تواجد ذلك الجسيم في تلك النقطة وفي وقتٍ محددٍ.

من خلال مقارنة الدالة الموجية بأمواجٍ أخرى كالأمواج الصوتية نجد أنها تُعبر عن سعة موجة الجسيم، مع أن السعة ليست ذات أهميةٍ كبيرةٍ فيزيائيًّا، بينما يُعتمد على مربع قيمة الدالة الموجية فيزيائيًّا لإيجاد جسيم في مكانٍ ووقتٍ محددين.

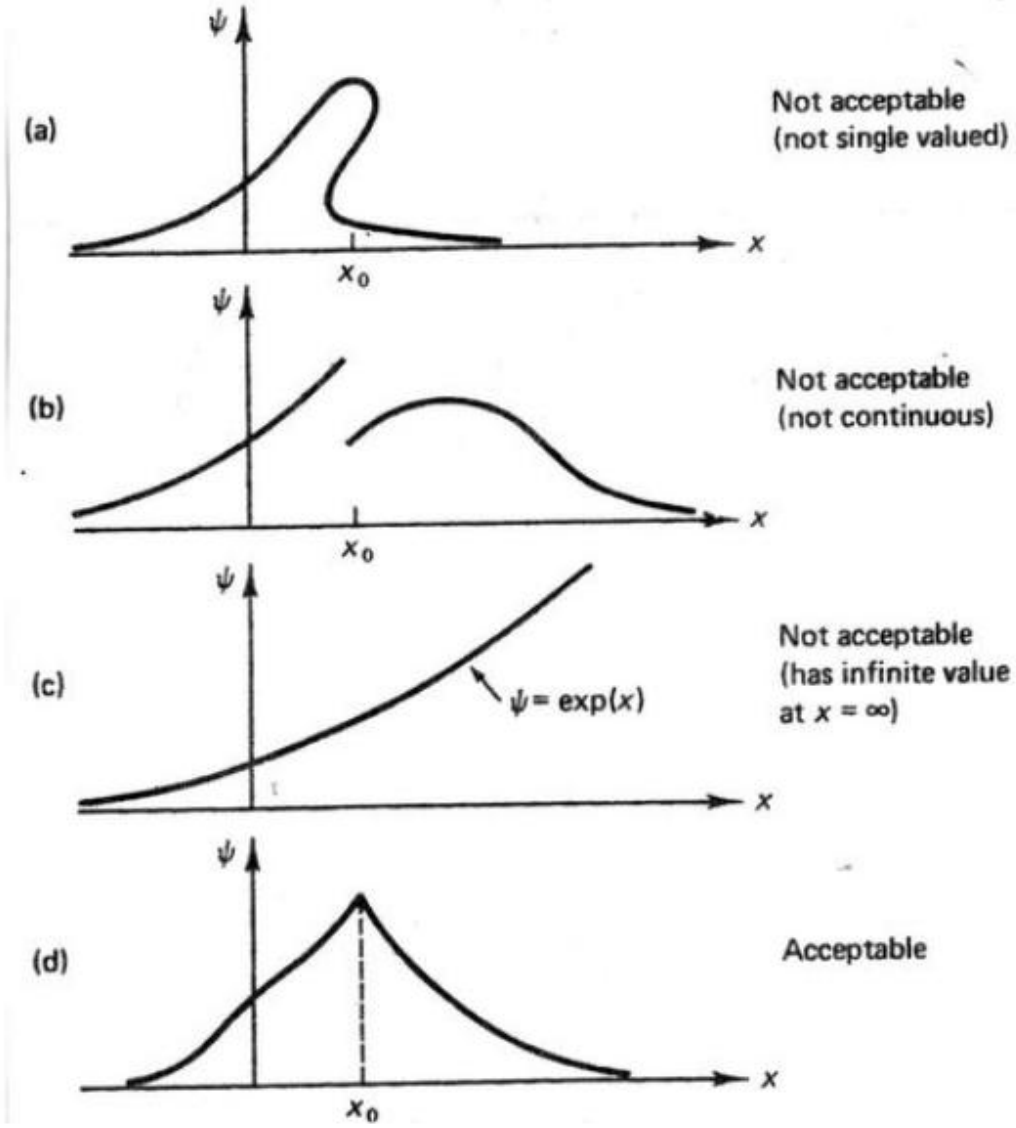
عند استخدام الميكانيكية الموجية فان النظام يمكن ان يوصف بواسطة دالة موجية ψ حيث ان هذه الدالة ليس لها معنى فيزيائي ولا تمثل احتمالية تواجد الالكترون في مكان ما حول النواة . لان قيمة الاحتمالية من الناحية الرياضية يجب ان يكون قيمة موجبة او صفر ولكن قيمة ψ يمكن ان تكون قيمة موجبة او صفر او قيمة سالبة او قد تكون دالة تخيلية لذلك رفض ماكس بورن Born Max تفسير شرودنجر عن ان الدالة ψ مقياس لاحتمال تواجد الالكترون لان ذلك يقيد الدالة لتصبح دالة حقيقية لذلك ادخل مربع الدالة Ψ أي ψ^2 مضروب في عنصر صغير من الحجم dx dy dz يتناسب مع احتمالية وجود الالكترون في هذا العنصر .

الشروط الرياضية للدالة الموجية المقبولة

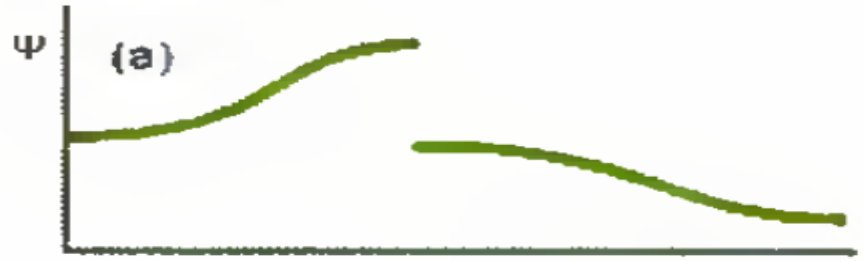
أن تكون الدالة الموجية أحادية القيمة أي أن كل قيمة محددة للموضع يقابلها قيمة وحيدة للدالة الموجية فقط وليس أكثر، وهذا شرط أساسي لان الدالة أحادية القيمة تعطي احتمال واحد لتواجد الجسيم بينما المتعددة القيمة تعطي أكثر من احتمال لتواجد الجسيم وهذا مرفوض لان الجسيم لايمكن أن يتواجد في أكثر من مكان في نفس اللحظة والعكس أيضا لايمكن لجسيم أن يكون له دالتان مختلفتان في نفس المكان ،

أن تكون الدالة الموجية متصلة وكذلك مشتقاتها متصلة ، لأن كون الدالة غير متصلة (عندها انقطاع في الدالة في مكان ما) يصبح الجسيم غير في معرف في منطقة الانقطاع

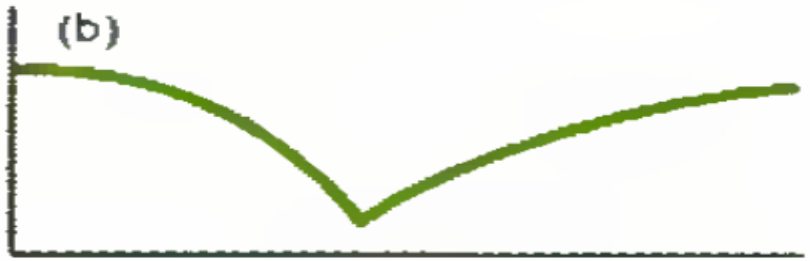
يجب على الدالة أن تكون معرفة في كل نقطة ولا يجوز ان تكون قيمتها مالانهاية لان احتمال تواجد الجسيم يصبح مالانهاية وهو أمر غير مقبل فيزيائيا



(a)غير مقبولة (ليست أحادية القيمة).
(b) غير مقبولة (غير مستمرة).
(c) غير مقبولة (قيمة لانهائية حيث $x=\infty$).
(d)مقبولة.



غير مقبولة لكونها غير متصلة



غير مقبولة لأن ميلها غير متـــصل

غير مقبولة لكونها غير أحادية القيمة

غير مقبولـــة لكونها غير محددة لنطاق محدد.

قاعدة البناء التركيب

هنالك نقطتان مهمتان التي تعمل كاساس لهذه القاعدة وهي

1- الترتيب التي تملئ فيه مستويات الطاقة المختلفة بالكترونات مثال

$1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6$

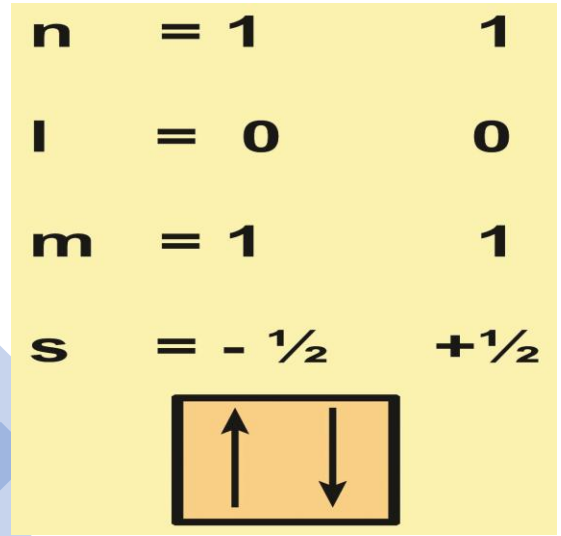
2- الإلكترونات التي توضع في كل مستوى طاقة من الغلاف الأول2 للثاني 8 والثالث 16 والرابع 32

قاعدة باولي

انه يجب ان تحتل جميع الاكترونات اوطأ مستوى من الطاقة

ينص على أنه لا يمكن أن تتساوى الأعداد الكمية الأربعة لأي إلكترونين في ذرة واحدة

اقصى عدد للإلكترونات التي قد توجد في أي مدار ذري هو اثنان و أن الإلكترونين الذين يوجدان في نفس المدار يغزلان باتجاهين متضادين



أعداد الكم

الأعداد الكمية

Quantum Numbers كما يتحدد موضع الجسم في الفراغ من خلال ثلاثة إحداثيات (x,y,z) فإنه أربعة أعداد كمية هي (n , ℓ , m, m_s)من أجل الوصف الموجي للإلكترون في الذرة .

n = عدد الكم الرئيسي

ℓ = عدد الكم الثانوي

m = عدد الكم المغناطيسي

m_s =عدد الكم البرم

قاعدة هوند

تنص قاعدة هوند على أن : -

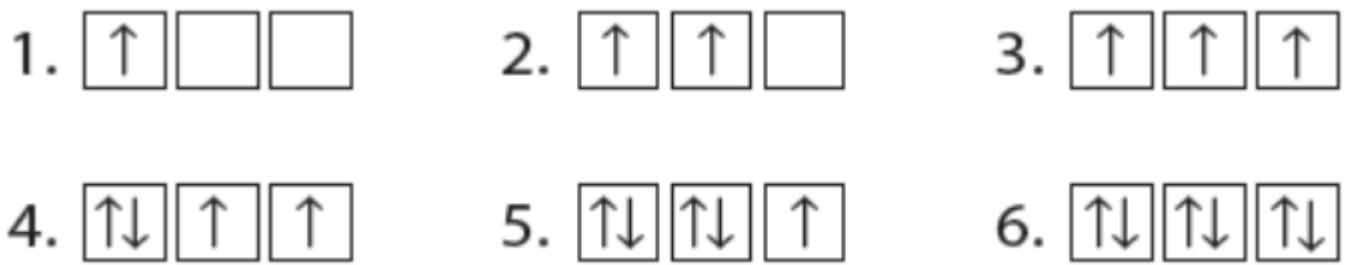
" لا يحدث ازدواج بين إلكترونين في مستوى فرعي معين إلا بعد أن تشغل أوربيتالاته فرادي أولاً"

- إن حقيقة تنافر الإلكترونات المشحونة بشحنة سالبة لها تأثير كبير في توزيع الإلكترونات في مستويات فرعية متساوية الطاقة.

- وتنص قاعدة هوند على أن الألكترونات تتوزع في المستويات الفرعية المتساوية الطاقة بحيث تحافظ على أن يكون لها الاتجاه نفسه من حيث الدوران، قبل ان تشغل الإلكترونات الإضافية ذات اتجاه الدوران المعاكس المستويات نفسها.

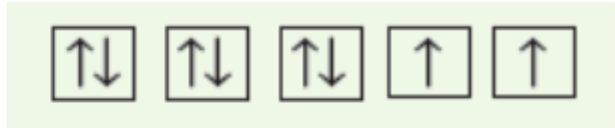
- على سبيل المثال: تُملأ مستويات (2p) الفرعية الثلاثة بإلكترونات منفردة ، ثم يحدث الأزدواج.

- يوضح الشكل التالي طريقة تسلسل دخول ستة إلكترونات في مستويات (p) الفرعية:



- يكون التوزيع الألكتروني كالتالي:

$$O_8 : 1S^2 , 2S^2 , 2p^4$$



شرح التوزيع:

- نجد أن المستوى الفرعي (2p) به أربعة إلكترونات تتوزع ثلاثة منها أولاً على الثلاثة أوربتالات (2p) وذلك حسب قاعدة هوند.

- أما الألكترون الرابع فأمامه احتمالين:

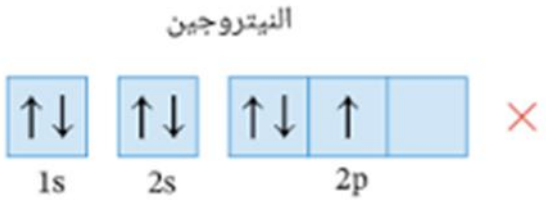
الأحتمال الأول: أن يدخل أحد الأوربتالات الثلاثة السابقة ويزدوج مع أى إلكترون موجود فيها وهناك سيعاني من التنافر مع الألكترون الموجود أصلاً.

الأحتمال الثاني: أن يصعد إلى المستاوى الفرعي التالي وهو (3s) ذو الطاقة الأعلى من (2p).

إلا أنه لا يزال الأفضل من جهة الطاقة لأى إلكترونين لهما غزل متضاد أن يزدوجا في نفس الأوربتال عن أن ينتقل أحدهما إلى المستوى الفرعي التالي الأعلى فى الطاقة.

يكون التوزيع الألكترونى كالتالي:

$$N_7 : 1S^2 , 2S^2 , 2p^3$$



شرح التوزيع:

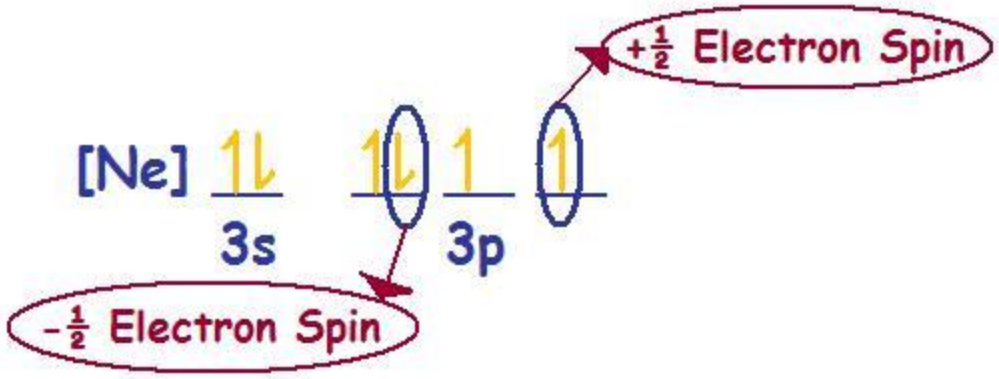
- عند التوزيع الألكتروني لذرة النيتروجين نجد ان المستوى الفرعي (2p) يحتوى على ثلاث إلكترونات.

- وكما نعلم أن المستوى الفرعي (2p) يحتوى على ثلاث أوربتالات p_x , p_y , p_z وهى متساوية فى الطاقة. فكيف تتوزع الألكترونات الثلاثة بين الأوروبتالات الثلاثة؟

- تبعاً لقاعدة هوند نجد أن كل ألكترون يشغل أوربتالاً مستقلاً لأن ذلك أفضل له من جهة الطاقة. لأنه عند ازدواج إلكترونين في أوربتال واحد وبالرغم من أن غزلهما معاكس إلا أن هناك قوى تنافر بينهما تعمل على تقليل استقرار الذرة (زيادة طاقتها).

يلاحظ أن الحركة المغزلية المفردة تكون فى اتجاه واحد وهذا الوضع يعطي الذرة أكبر قدر من الاستقرار.

Sulfur - S (16 electrons)
Electronic Configuration:
$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^4$ **OR** [Ne] $3s^2\ 3p^4$
As shown in the following image, this is a demonstration of a -1\2 and a +1\2 Electron Spin.



How many electrons can have n = 4 and L = 1?
This problem includes both -1\2 , +1\2 , therefore the answer is **6** electrons based on the m_L.

n	L	m_L	m_s
4	1	±± 1	-1\2 , + 1\2
		0	