
بسم الله الرحمن الرحيم

شرح جامع

شیمی معدنی

«شیمی»

مولف: سعیده حسینی

انتشارات ارشد

پیشگفتار ناشر

خداوند بزرگ را شاکریم که فرصتی عنایت فرمود تا بتوانیم قدمی در جهت گسترش علم و فرهنگ کشور عزیزمان برداریم و مسیری هموار را در اختیار مخاطبان و داوطلبان علاقمند به ادامه تحصیل قرار دهیم. از آنجائی که درحوزه کتاب‌های درسی و کمک درسی کارشناسی ارشد کتاب‌های زیادی به رشته تحریر در آمده است با این حال وجود یک مجموعه جامع، دقیق، کامل و دارای رفرنس(منابع) مستند احساس می‌شود.

همیشه دغدغه داشتیم که ای کاش می‌شد تمامی منابع پراکنده و گاهاً دست نایافتنی کنکور در یک مجموعه به گونه‌ای جذاب و شیوا آماده می‌شد و همچنین سوالات دوره‌های قبل کنکور نیز به گونه‌ای تشریحی پاسخ داده می شدند، که خدشه‌ای بر آنها وارد نشود و خیال داوطلبان عزیز آنقدر آسوده باشد که اطلاعات مندرج در پاسخنامه‌ها را برای بهره‌گیری در آزمون خود بکار گیرند. این کار با یاری خداوند بزرگ و همکاری نخبه‌ترین دانشجویان و اساتید کشور در انتشارات ارشد هماهنگ گردید و در تمامی مقاطع تحصیلی از کاردانی به کارشناسی، کارشناسی ارشد و دکتری در حوزهٔ آزمون‌های سراسری – آزاد و پیام نور بسته‌های آموزشی شامل کتاب‌های بانک سوالات و کتاب‌های شرح جامع درس آماده گردید. در تهیه مجموعه‌های فوق‌الذکر از فارغ‌التحصیلان کارشناسی ارشد و دکتری که حائز رتبه‌های تک رقمی کنکور می‌باشند، استفاده کرده‌ایم، تا شما عزیزان بتوانید در راستای افزایش توان علمی خود در جهت نیل به مقصود خویش نایل آیید. بدون تردید می‌توان گفت که برای اولین بار در نظام آموزشی کشور مجموعه‌ای به این سبک عرضه می‌شود که در کیفیت و کمیت بی‌نظیر بوده و تمامی نیازهای دانشجویان و داوطلبان عزیز را پوشش می‌دهد. امید است که استفاده از این مجموعه عزیزان را در جهت موفقیت در آزمون یاری رسانده باشد. در پایان لازم به ذکر است که بی نقصی محض از آن خداوند متعال می‌باشد، بنا براین از تمامی خوانندگان و داوطلبان عزیز خواهشمندیم نظرات سازنده خود را در مورد این کتاب به سایت انتشارات ارشد اعلام نمایند تا ما را در جهت هر چه بهتر آماده کردن این محصولات یاری رسانند.

با تشکر

ناشـــــر

www.arshadbook. ir

پیشگفتار مولف

با افزایش خیل مشتاقان شرکت در کنکور کارشناسی ارشد، نیاز مبرم به منبع مجموعه نکات و نمونه سؤالات سالهای گذشته جهت آمادگی هرچه بیشتر داوطلبین حس می‌گردد. تهیه مجموعه‌ای که بتواند با به همراه داشتن پاسخ‌های معتبر و توضیحات تشریحی این نیاز را پاسخگو باشد کاری بود بس دشوار و طاقت فرسا که با عنایت خداوند متعال میسر گردید. اما همچنانکه هیچ اثر علمی مصون از خطا نیست مشاهده این موضوع در مجموعه حاضر نیز دور از انتظار نخواهد بود. هر چند که حقیر، علت این امر را بضاعت علمی اندک خود می‌داند. در تهیه و تدوین کتاب حاضر سعی بر این بوده که اشکالات تا حد امکان مرتفع گردند. امید اینکه حاصل این تلاش بتواند در افزایش آمادگی خوانندگان محترم برای شرکت در آزمون مؤثر واقع شود.

در اینجا بر خود لازم می‌دانم که از مدیریت انتشارات ارشد که در تدوین این کتاب مرا یاری نموده‌اند، تشکر نمایم.

با سپاس

سعیده حسینی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: ساختمان اتم

۱-۱- الگوهای اتمی ۱۱
۱-۲- اصل عدم قطعیت هایزنبرگ ۱۴
۱-۳- معادله انتشار موج ۱۴
۱-۴- معادله موجی شرودینگر ۱۴
۱-۴-۱ معادله شرودینگر در مختصات کروی- قطبی ۱۵
۱-۴-۲- توزیع شعاعی احتمال ۱۶
۱-۴-۳- قسمت زاویه‌ای تابع موج ۱۷
۱-۵- جمله‌های طیفی (ترم‌ها راسل- ساندرز) ۱۸
۱-۵-۱- قواعد هوند برای تعیین پایدارترین ترم طیفی ۲۱
۱-۵-۲- نحوه تعیین حالتهای ریز آرایش‌های الکترونی ۲۲
۱-۵-۳- تعیین طیف‌های الکترونی هم‌ارز ۲۳
۱-۵-۴- تعیین طیف‌های الکترونی ناهم‌ارز ۲۷
۱-۵-۵- تعیین تعداد ریز حالت‌های الکترون‌های ناهم‌ارز ۲۷
۱-۶- بررسی خواص تناوبی عناصر ۲۸
۱-۶-۱- بار مؤثر هسته ۲۸
۱-۶-۲- انرژی یونیزاسیون ۲۹
۱-۶-۳- الکترونخواهی ۳۰
۱-۶-۴- الکترونگاتیویته ۳۱

فصل دوم: پیوندهای شیمیایی

۲-۱- نظریه‌های پیوندی ۴۱
۲-۲- مولکولهای دو اتمی جور هسته ۴۶
۲-۳- مولکول‌های نا جور هسته ۵۲
۲-۴- مولکول‌های چند اتمی ۵۵
۲-۵- رزونانس ۵۸
۲-۶- پیشگویی شکل مولکول به کمک نظریه‌ی VSEPR ۶۰
۲-۷- عوامل مؤثر بر روی زاویه پیوند ۶۳
۲-۸- مولکول‌هایی که کمبود الکترون دارند ۷۰

عنوان **صفحه**

فصل سوم: طیف بینی فتو الکترون

فصل چهارم: بلورها

۴-۱- ویژگی‌های سلول واحد ۸۷

۴-۲- محاسبه نسبت شعاع کاتیون به شعاع آنیون $(\frac{r_c}{r_a})$ ۸۸

۴-۳- ساختار تنگچین کره‌ها ۹۰

۴-۴- طبقه‌بندی جامدات یونی ۹۱

۴-۵- ساختار بلوری اکسیدهای فلزی مختلط ۹۳

۴-۶- انواع نقص‌های بلوری ۹۵

۴-۷- انرژی شبکه ۹۷

۴-۸- رابطه بین اثر قطبی کنندگی کاتیون و میزان خصلت کووالانسی پیوند – قواعد فاجانس ۱۰۰

۴-۹- اثر قطبیت پذیری در خواص ترکیبات یونی ۱۰۰

۴-۱۰- نظریه اوربیتال مولکولی یا نظیر نوار ۱۰۲

۴-۱۱- نیم هادی‌ها ۱۰۳

۴-۱۲- جامدات کووالانسی ۱۰۴

۴-۱۳- ساختارهای لایه‌ای ۱۰۴

فصل پنجم: عناصر و اعمال تقارن

۵-۱- عنصرها و عمل‌های تقارن ۱۱۵

۵-۲- حاصلضرب عمل‌های تقارن ۱۱۷

۵-۳- تعریف گروه ۱۱۹

۵-۴- تعریف گروه نقطه‌ای و تعیین آن ۱۱۹

۵-۵- نمایش‌های ماتریسی گروه‌های تقارن ۱۲۶

فصل ششم: شیمی اسید و باز (دهنده و پذیرنده)

۶-۱- تعاریف مختلف اسید و باز ۱۳۷

۶-۲- قدرت اسید و باز ۱۴۰

۶-۳- اثرهای القایی ۱۴۱

۶-۴- اثرات فضایی ۱۴۲

۶-۵- اسیدها و بازهای سخت و نرم ۱۴۳

فصل هفتم: شیمی کئوردیناسیون

۷-۱- تقسیم‌بندی کمپلکس‌ها ۱۵۱

۷-۲- تئوری ورنر ۱۵۱

۷-۳- اعداد کئوردیناسیون ۱۵۲

۷-۴- لیگاندها ۱۵۵

۷-۵- نامگذاری ترکیبات کئوردیناسیون ۱۵۸

عنوان **صفحه**

فصل هشتم: ایزومری در ترکیبات کئوردیناسیون

۸-۱- ایزومرهای ساختاری ۱۶۹
۸-۲- ایزومرهای فضایی ۱۷۴
۸-۳- جداسازی و شناسایی عملی ایزومرها ۱۸۰

فصل نهم: بررسی ترکیبات کئوردیناسیون براساس نظریه پیوند ظرفیت و نظریه میدان بلور و تئوری اوربیتال مولکولی

۹-۱- نظریه پیوند والانسی ۱۷۶
۹-۲- تئوری میدان بلور ۱۸۲
۹-۳- شکافتگی اوربیتال‌های d در میدان هشت وجهی ۱۸۳
۹-۴- شکافتگی اوربیتالهای d در میدان بلور چهار وجهی ۱۸۳
۹-۵- شکافتگی اوربیتالهای d در میدان‌های دیگر: ۱۸۴
۹-۶- خصلتهای مغناطیسی و کمپلکس‌های کم اسپین و پراسپین هشت وجهی ۱۸۷
۹-۷- عوامل مؤثر در مقدار Δ_o یا loDq ۱۸۸
۹-۸- انرژی پایداری میدان بلور (CFSE) ۱۹۳
۹-۹- شواهد دال بر نظریه میدان بلور ۱۹۶
۹-۱۰- انحراف یان تلر ۲۰۴
۹-۱۱- نارسایی‌های نظریه میدان بلور ۲۰۹
۹-۱۲- تئوری اوربیتال مولکولی ۲۱۲
۹-۱۳- تشکیل پیوند π در کمپلکس‌های هشت وجهی ۲۱۳

فصل دهم: طیف‌های الکترونی کمپلکس‌های فلزات واسطه

۱۰-۱- روش تعیین ترم پایدار یک آرایش ۱۳۷
۱۰-۲- قواعد انتخاب ۲۳۸
۱۰-۳- شکافته شدن ترم‌ها در میدان بلور ۲۳۸
۱۰-۴- طیف‌های الکترونی مربوط به آرایش‌های الکترونی مختلف در سیستم هشت وجهی ۲۴۴
۱۰-۵- طیف جذبی کمپلکس‌های چهاروجهی ۲۴۵
۱۰-۶- طیف‌های انتقال بار ۲۴۹

فصل یازدهم: سینتیک و مکانیسم واکنش‌های ترکیبات کئوردیناسیون

۱۱-۱- مکانیسم‌های استخلافی ۲۴۵
۱۱-۲- عوامل مؤثر در تغییرپذیری کمپلکس‌های هشت وجهی ۲۴۶
۱۱-۳- مکانیسم واکنش‌های استخلافی کمپلکس‌های هشت وجهی ۲۴۷
۱۱-۴- واکنش‌های استخلافی کمپلکس‌های مسطح مربعی ۲۵۱
۱۱-۵- اثر ترانس ۲۵۲
۱۱-۶- سایر عوامل دخالت کننده در واکنش‌های استخلافی مربعی ۲۵۳
۱۱-۷- واکنش‌های اکسایش – کاهش ۲۵۵

فصل دوازدهم: قاعده ۱۸ الکترونی

فصل اول

ساختمان اتم

عناوین اصلی

- الگوهای اتمی
- معادله موجی
- جمله‌های طیفی
- بررسی خواص تناوبی عناصر

فصل اول

ساختمان اتم

توسعه نظریه کوانتوم در دو مرحله صورت گرفته است. در مرحله اول (۱۹۲۵-۱۹۰۰ میلادی) که امروزه به نام «نظریه کوانتومی قدیم» معروف است، الکترون به صورت ذره در نظر گرفته شده است. در مرحله دوم که از سال ۱۹۲۵ میلادی آغاز می‌شود الکترون را به صورت موج در نظر می‌گیرند.

پدیده‌های زیادی از قبیل تابش جسم سیاه، پدیده فتوالکتریک، تفسیر طیف‌های اتمی و نیز تعیین آرایشهای الکترونی و... به کمک نظریهٔ ذره‌ای نور و پدیده‌هایی از قبیل انرژی پیوندهای شیمیایی، تداخل، پراش، قطبش و .... به کمک نظریه موجی نور تفسیر می‌شوند.

در مکانیک کوانتمی، نور به صورت کوانتوم که همان فوتون است در نظر گرفته می‌شود و به آن یک ویژگی دوگانه نسبت داده می‌شود.

۱-۱- الگوهای اتمی

الف) مدل اتمی تامسون و رادرفورد

تامسون الگویی برای اتم پیشنهاد کرد که طبق آن، بار مثبت اتم در تمام اتم پراکنده بوده و فضای بین بارهای مثبت را الکترونهایی که جرمشان خیلی کم است اشغال می‌نمایند.

رادرفورد عقیده داشت که اتم از یک هسته کروی بسیار کوچک به شعاع حدود ۰/۱ میلی آنگستروم، با بار مثبت پروتونها ساخته شده است که قسمت اعظم اتم در آن قرار می‌گیرد و الکترونها به دور این هسته، روی مدارهای معینی در گردش هستند.

ایراد: زمانی که الکترون به دور هسته می‌چرخد، در نتیجه حرکت آن یک جریان الکترونی ایجاد می‌شود که دارای شتابی کند شونده می‌باشد در نتیجه با گذشت زمان سرعت الکترون کم شده و انرژی آن به طور پیوسته به صورت نور منتشر می‌شود و سرانجام الکترون روی هسته سقوط می‌کند.

ب) نظریه بوهر در مورد اتم هیدروژن

الگوی بوهر برای حرکت الکترون به دور هسته، براساس چهار فرض زیر بنا شده است:

۱-حرکت الکترون در مداری دایره‌ای شکل به دور هسته انجام می‌گیرد.

۲-الکترون در مدارهایی حرکت می‌کند که گشتاور زاویه‌ای آنها مضرب صحیحی از $\hbar(\frac{h}{2\pi})$ باشد.

۳-الکترونی که روی مدار قرار دارد دارای انرژی ثابتی است.

۴-تابش الکترومغناطیسی زمانی نشر یا جذب می‌شود که الکترون مدار خود را عوض کند.

$$E_{n_۲} - E_{n_۱} = hv$$

موفقیت‌های نظریه بوهر

۱- محاسبه شعاع حرکت الکترون:

$$r = \frac{n^۲h^۲}{۴\pi^۲me^۲} \qquad : \frac{h^۲}{۴\pi^۲me^۲} = a_۰ = ۰/۵۲۹$$

برای سایر مدارها در اتم هیدروژن $r = n^۲a_۰$

برای اتم هیدروژن مانند $r = \frac{n^۲}{z}a_۰$

سوال (۱-۱)

فاصله چهارمین تراز برانگیخته از سومین تراز کدام است؟

۱) $۷a_۰$ ۲) $۱۶a_۰$ ۳) $۱۴a_۰$ ۴) $۵a_۰$

حل: **گزینه «۲»**

$$r = n_۵^۲a_۰ - n_۳^۲a_۰ = ۲۵a_۰ - ۹a_۰ = ۱۶a_۰$$

نکته: تراز پایه دارای $n = ۱$ است و اولین تراز برانگیخته دارای $n = ۲$ و دومین تراز برانگیخته دارای $n = ۳$ و .... می‌باشند.

۲- محاسبه سرعت حرکت الکترون

$$V_e = \frac{nh}{۲\pi mr}$$

نکته: طبق این رابطه در لایه‌های بالاتر (r بیشتر) سرعت حرکت الکترون کم می‌شود.

۳- محاسبه انرژی الکترون

برای هیدروژن $E_n = -۱۳/۶(\frac{۱}{n^۲})e.v$

برای اتم هیدروژن مانند $E_n = -۱۳/۶(\frac{z^۲}{n^۲})\ e.v$

سؤال (۱-۲)

در صورتیکه الکترون از تراز سوم به دوم در اتم هیدروژن سقوط کند چه میزان انرژی برحسب الکترون ولت آزاد می‌شود؟

۱) ۲/۱ ۲) ۲/۱- ۳) ۱/۹ ۴) ۱/۹-

حل: گزینه «۴»

$$\Delta E = E_{n_۲} - E_{n_۳}$$

$$\Delta E = -۱۳/۶(\frac{۱}{۴}) + ۱۳/۶(\frac{۱}{۹}) = -۱/۹ev$$

۴- محاسبه ثابت رید برگ

$$\bar{\upsilon} = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c}\left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right]$$

$$\rightarrow R_H = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c} = 109737 cm^{-1}$$ برای اتم هیدروژن

$$R = z^2 R_H$$ برای اتم‌های هیدروژن مانند

ایرادهای نظریه بور

۱- در تمام محاسبات جرم الکترون را در نظر گرفته و از جرم هسته صرفنظر شده است. بهتر است از جرم کاهش یافته استفاده شود.

$$\mu = \frac{m_e + m_N}{m_e\, m_N}$$

۲- نظریه بور فقط برای هیدروژن و اتم‌های هیدروژن مانند که تک‌الکترونی هستند کاربرد دارد.

سوال (۱-۳)

فرکانس خط یونش He^+ مساویست با:

۱) نصف فرکانس یونش هیدروژن
۲) چهار برابر ثابت R_H هیدروژن
۳) دو برابر فرکانس یونش هیدروژن
۴) اختلاف ثابت R_H هیدروژن و هلیم

حل: گزینه «۲»

$$R_{He} = z^2 R_H = 4R_H \rightarrow \bar{\upsilon}_{He} = 4R_H\left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right] \qquad \bar{\upsilon}_H = R_H\left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right]$$

سوال (۱-٤)

در مدل اتمی بوهر به کدامیک از موارد زیر توجه شده است؟

۱) تأثیر میدان مغناطیسی ضعیف و طیف نشری اتم هیدروژن
۲) خصلت دوگانگی موجی و ذره‌ای اتم
۳) عمومیت مدل برای تمام اتم‌ها و یونها
۴) نظریه کوانتمی تابشهای الکترومغناطیسی

حل: گزینه «۴»

سوال (۱-۵)

کدام عبارت با توجه به انرژی خط طیفی بین ترازهای سوم و چهارم برای اتم هیدروژن درست است؟

۱) برابر مقدار انرژی بین ترازهای دوم و سوم است.
۲) بیش از مقدار انرژی بین ترازهای دوم و سوم است.
۳) کمتر از مقدار انرژی بین ترازهای اول و دوم است.
۴) همان مقدار انرژی بین ترازهای اول و دوم است.

حل: گزینه «۳»

$$\Delta E = E_4 - E_3 = -13/6\,(\frac{1}{16}) + 13/6(\frac{1}{9}) = 0/047 \times 13/6$$

$$\Delta E = E_3 - E_2 = -13/6\,(\frac{1}{9}) + 13/6(\frac{1}{4}) = 0/14 \times 13/6$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = -13/6\,(\frac{1}{4}) + 13/6 = 0/75 \times 13/6$$

۱-۲- اصل عدم قطعیت هایزنبرگ

برای ذرات ریزی مانند الکترون و پروتون که ماهیت دوگانگی موجی- ذره‌ای دارند اندازه‌گیری همزمان مکان و اندازه حرکت امکان‌پذیر نمی‌باشد.

$$\Delta(mv)\Delta x \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta E \quad \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta \nu \quad \Delta T \geq \frac{1}{4\pi}$$

۱-۳- معادله انتشار موج

از آنجایی که الکترون دارای خواص موجی است می‌توان آن را با یک معادله موج تفسیر کرد.

$$\varphi_1 = a \sin 2\pi(\frac{x}{\lambda} - \nu t)$$

وقتی که موجی با یک مانعی برخورد می‌کند در جهت مخالف تابش، با دامنه φ_2 بر می‌گردد.

$$\varphi_2 = a \sin 2\pi(\frac{x}{\lambda} + \nu t)$$

در اثر ترکیب امواج تابش و بازتابش امواج ساکن بوجود می‌آیند یعنی بعضی از نقاط همواره ساکن می‌مانند که به این نقاط «گره» می‌گویند.

$$\varphi_{total} = \varphi_1 + \varphi_2 = 2a \sin \frac{2\pi x}{\lambda} \cos 2\pi \nu t$$

در نقاط گره φ_{total} برابر صفر است.

$$\varphi_{total} = 0$$

$$\sin 2\pi \frac{x}{\lambda} = 0 \rightarrow x = n\frac{\lambda}{2}$$

چون n یک عدد صحیح است، نقاط گرهی مضرب صحیحی از $\frac{\lambda}{2}$ می‌باشند.

از آنجایی که حرکت به دور هسته ایجاد امواج ساکن می‌کند، از این معادلات می‌توان برای بیان حرکت الکترون به دور هسته استفاده کرد. معادله سه بعدی انتشار موج به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\nabla^2\psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = 0 \qquad , \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

۱-۴- معادله موجی شرودینگر

در سال ۱۹۲۶ میلادی، شرودینگر معادله‌ای ارائه کرد که ارتباط بین انرژی یک سیستم و تابع موجی حرکت آن را نشان می‌داد.

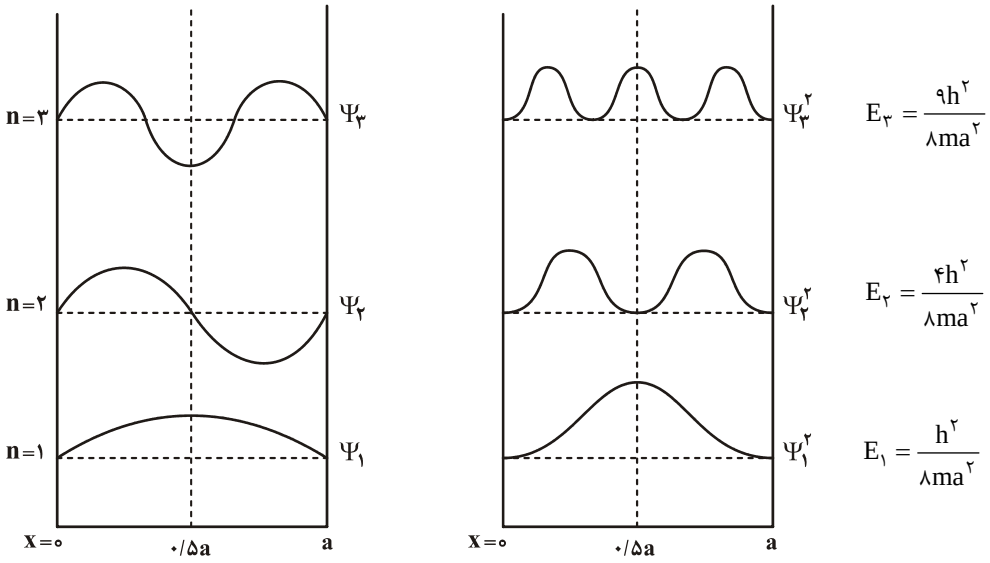
$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E_t - V)\psi = 0$$

که تابع موجی = ψ، جرم = m ، ثابت پلانگ = h ، انرژی کل= E و انرژی پتانسیل = V می‌باشند.

از حل این معادله موجی، تابع موجی ψ به دست می‌آید. همانگونه که شدت یک موج نور به وسیله توان دوم دامنه داده می‌شود، به همان نحوه احتمال یافتن یک ذره با مربع تابع موجی آن متناسب است.

ذره‌ای را در یک جعبه در نظر بگیرید. انرژی پتانسیل در دو طرف جعبه بی‌نهایت و در داخل جعبه صفر است پس ذره از جعبه نمی‌تواند خارج شود. در این صورت انرژی ذره در یک جعبه سه بعدی عبارت است از: $E = \frac{h^2}{8m}(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2})$

در این رابطه n عدد صحیحی می‌باشد در نتیجه انرژی ذره پیوسته نبوده و به صورت کوانتیده تغییر می‌کند.
نمودار تابع موجی (ψ) و تابع احتمال یک ذره در یک جعبه در شکل (۱-۱) آورده شده است:



شکل (۱-۱): توابع موجی (ψ) توابع احتمال یک ذره در یک جعبه ($\psi^۲$)

نتایج محاسبهٔ ذره در یک جعبه

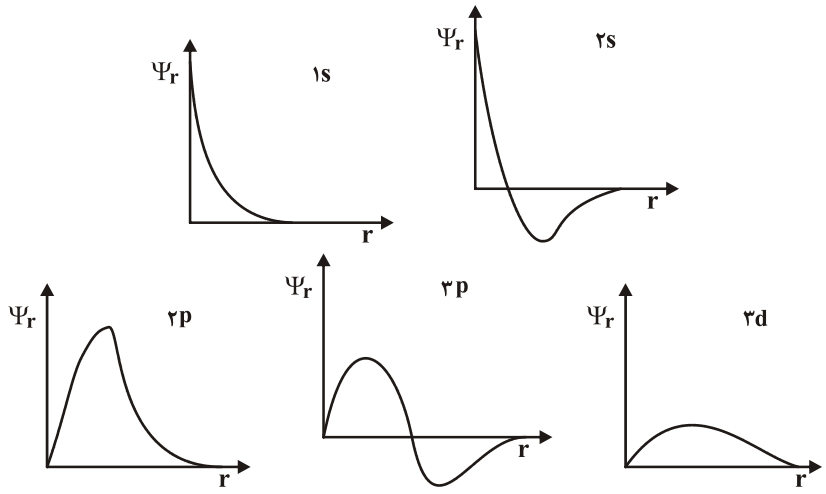
۱- با توجه به شکل (۱-۱) ذره حتی در پایین‌ترین تراز ($\psi_۱$) دارای حداقل انرژی $E_۱$ است و این انرژی به انرژی در صفر مطلق موسوم است. یعنی الکترون در پایین‌ترین حالت انرژی هم در حال حرکت است.
۲- برای جعبه‌ای با طول ثابت a و مقدار n یکسان، هر چه m بزرگتر باشد اختلاف بین سطوح انرژی ذره کمتر می‌شود.
۳- هر چه طول جعبه بزرگتر باشد، اختلاف سطوح انرژی کمتر می‌شود.
با توجه به بندهای ۲و ۳ می‌توان نتیجه گرفت که در صورتی که $ma^۲ = h^۲$ باشد انرژی ذره کوانتیده است و اگر $ma^۲ \gg h^۲$ باشد انرژی ذره پیوسته است.
۴- برخلاف پیش‌بینی کلاسیک احتمال یافتن ذره ثابت نیست بلکه تابعی از x است و احتمال یافتن ذره در بخش خاصی از جعبه به انرژی ذره بستگی دارد.

۱-۴-۱ معادله شرودینگر در مختصات کروی- قطبی

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,Q) = R_{n,l}(r).\ \theta_{l,m}(\theta).\ \varnothing_{m(\varnothing)}$$

در این معادله $R(r)$ تابع موجی شعاعی و $\theta(\theta)$ و $\varnothing_{(\varnothing)}$ تابع موجی زاویه‌ای می‌باشند.
n:عدد کوانتمی اصلی است که بیان کننده انرژی تابع موج و فاصله الکترون از هسته است و هر چه n بزرگتر باشد فاصله الکترون از هسته بیشتر می‌شود. $(n = ۱,۲,۳,....)$
l: عدد کوانتمی سمتی (زاویه‌ای) است که بیان کننده شکل اوربیتال می‌باشد. $(l = ۰,۱,۲,...(n-۱))$
m_l : عدد کوانتمی مغناطیسی است که جهت‌گیری اوربیتال‌ها در فضا را مشخص می‌کند و به ازاء هر مقدار l می‌توان $۲l+۱$ مقدار m_l داشته باشیم . $(m_l = ۰ , \pm۱, \pm۲,....)$
برای نامگذاری اوربیتال‌ها از اعداد کوانتمی n و l استفاده می‌شود. نامگذاری این اوربیتال‌ها برحسب l به ترتیب زیر است:
l = ۰ ۱ ۲ ۳ ۴ .....
اوربیتال: s p d f g

تغییرات تابع موج شعاعی برحسب r در شکل (۱-۲) نشان داده شده است.



شکل(۱-۲): تغییرات تابع موجی شعاعی (ψ_r) برحسب r

نتایج

۱-معادله اوربیتال‌های s وابسته به r و مستقل از θ و Q است زیرا اوربیتال s کروی است.

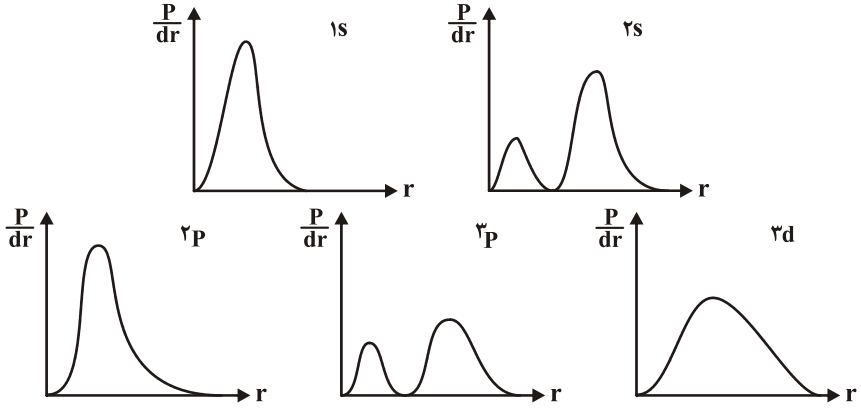
۲-هر چه تعداد گره‌ها بیشتر باشد اوربیتال ناپایدارتر می‌شود.

نکته: تعداد گره‌ها از رابطه $n-l-1$ محاسبه می‌شود.

۱-۴-۲- توزیع شعاعی احتمال

توزیع شعاعی احتمال $(\frac{p}{dr})$ به صورت زیر بیان می‌شود: $\frac{p}{dr} = 4\pi r^2 \psi_r^2 dr$

نمودار توزیع شعاعی احتمال $(\frac{p}{dr})$ برحسب r در شکل (۱-۳) نمایش داده شده است.



شکل (۱-۳) نمودار توابع توزیع شعاعی احتمال

نتایج

۱-همه این مدارها از مبدأ شروع می‌شود و مبدأ هسته است یعنی احتمال حضور الکترون در هسته صفر است.

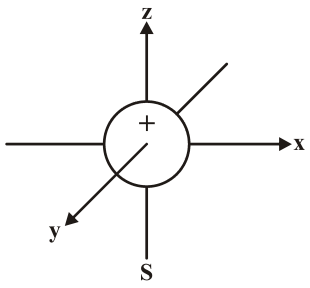
۲-احتمال پیدا کردن الکترون در فواصل بسیار دور از هسته کاهش یافته به طوریکه در بی‌نهایت این احتمال به صفر می‌رسد.

۱-۴-۳- قسمت زاویه‌ای تابع موج

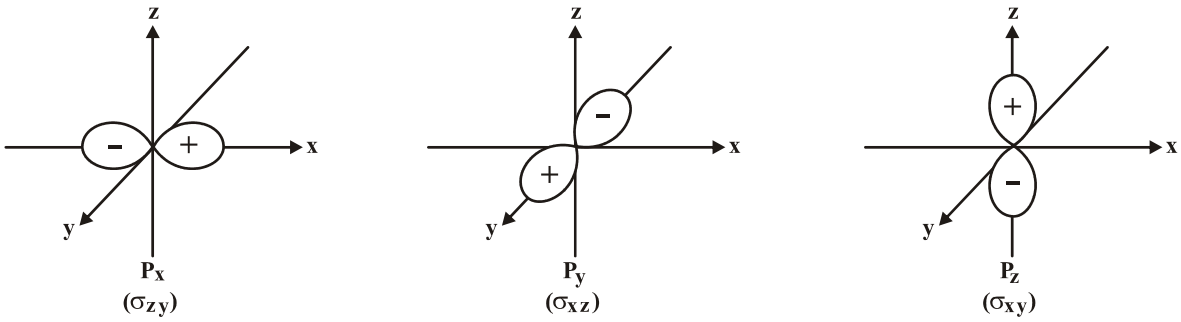
برای رسم شکل اوربیتال‌ها از بخش زاویه‌ای استفاده می‌شود.

اوربیتال s: اوربیتال s دارای ابر الکترونی کروی و متقارن است پس قسمت زاویه‌ای ندارد.

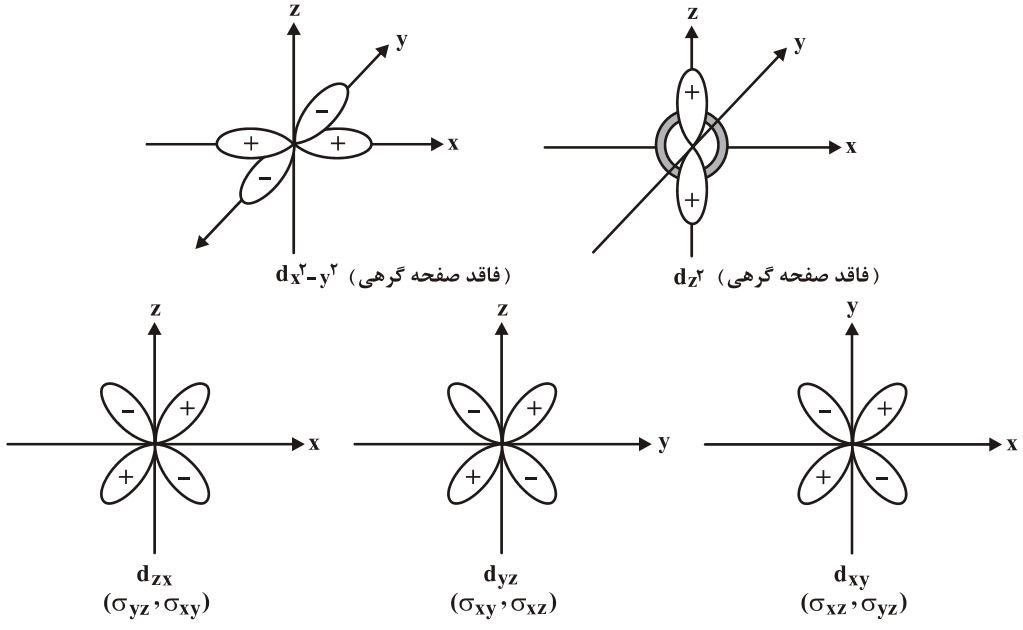
نکته: اوربیتال s درون اتم‌ها فاقد صفحه گره‌ای زاویه‌ای است.



اوربیتال p: هر یک از اوربیتال‌های p دارای یک صفحه گرهی هستند که در مبدأ مختصات از هسته عبور کرده، بطوریکه قسمت مثبت تابع موج را از قسمت منفی آن جدا می‌کند. شکل زیر اوربیتال‌های p و صفحات گرهی آنها را نشان می‌دهد.



اوربیتال d: اوربیتال‌های d به دو دسته اوربیتال‌های روی محوری $(d_{x^2-y^2}, d_{z^2})$ و اوربیتال‌های بین محوری (d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}) تقسیم می‌شوند. اوربیتال‌های روی محوری فاقد صفحه گرهی هستند در حالیکه هر یک از اوربیتالهای بین محوری دو صفحه گرهی دارند. شکل زیر اوربیتال‌های d و صفحات گرهی آنها را نشان می‌دهد.



سوال (۱-۶)

تعداد گره‌ها در نمودار تابع موج احتمالی شعاعی برای ترازهای $3d, 4p$ به ترتیب از راست به چپ کدام است؟ **(آزاد ۸۲)**

۱) ۰،۲ ۲) ۳و۴ ۳) ۳و۳ ۴) ۱و۲

حل گزینه «۱»

تعداد گره‌ها از فرمول $n-l-1$ محاسبه می‌شود.

$3d\,(n=3, l=2): 3-2-1=0$ $\qquad$ $4p(n=4,\ l=1): 4-1-1=2$

سوال (۱-۷)

کدام اوربیتال اتمی نسبت به صفحه *xz* ضد متقارن است؟ **(سراسری ۷۹)**

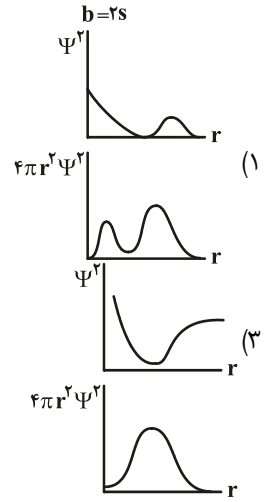
۱) d_{xz} ۲) d_{xy} ۳) d_{z^2} ۴) p_z

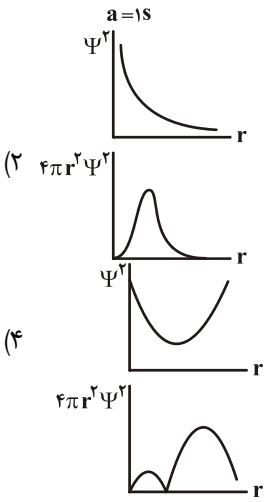
حل: گزینه «۲»

سوال (۱-۸)

منحنی تابع ψ^2 را برای اوربیتال $b=2s$ و $a=1s$ و منحنی توزیع شعاعی $4\pi r^2\psi^2$ را برای آنها نسبت به $r(A^\circ)$ ارائه نمائید.

(آزاد ۸۴)

۱)


۲)


۳)

۴)

حل: گزینه «۱»

اوربیتال ۱s فاقد صفحه گرهی $(n-l-1: 1-0-1=0)$ و اوربیتال ۲s دارای یک صفحه گرهی $(n-l-1: 2-0-1=1)$ می‌باشد. از این نمودارها گزینه (۱) با این دو اوربیتال هم‌خوانی دارد.

۱-۵- جمله‌های طیفی (ترم‌ها راسل- ساندرز)

در یون آزاد هر الکترون به وسیله چهار عدد کوانتایی شناسایی می‌شود:

- عدد کوانتومی اصلی (n)
- عدد کوانتوم سمتی (l)