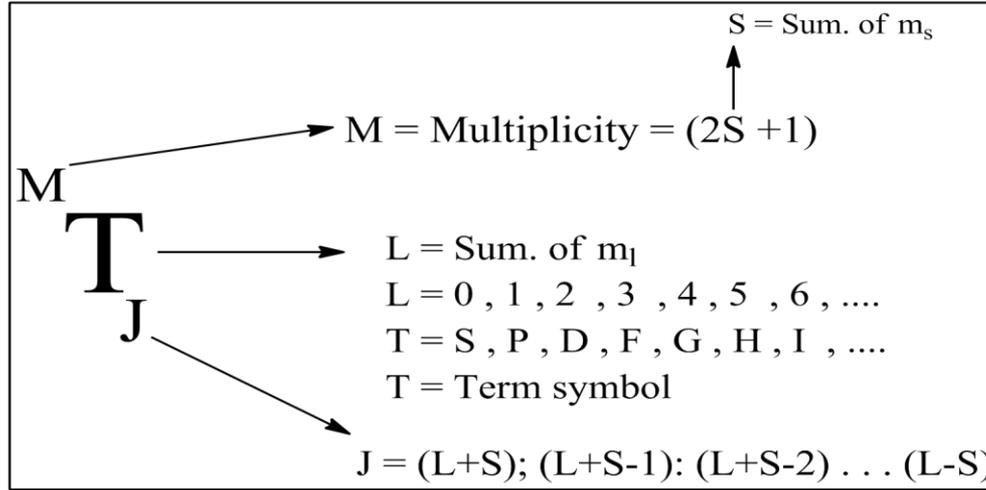


(Term Symbols)

رموز الحالة او التيرم

رمز الحالة هو مختصر يصف مستوى #الطاقة الكلية لذرة او ايون (متعددة الالكترونات) من خلال معرفة محصلة #العزم الزاوي و#تعددية البرم للالكترون في الذرة. تفترض رموز التيرم الذرية حصول اقتران للحركة الاوربيتالية مع الحركة البرمية (LS Coupling) او ما يعرف ب (ازدواج راسل-سونديرز).

#او بمعنى اخر يصف رمز التيرم طاقة ترتيب الكتروني معين، والصيغة العامة لرمز التيرم هي:-



*حرف ال (T) هو رمز التيرم ويعبر عنه احيانا ب (L) والذي يمثل عدد الكم الاوربيتالي الكلي للالكترونات والنتج من جمع العزوم الزاوية الاوربيتالية الفردية للالكترونات، مجموع ال (ml).

*حرف ال (M) الموجود في اعلى يسار رمز التيرم يمثل تعددية البرم (Multiplicity) وهي تساوي $(2S+1)$ ، حيث ان ال (S) يمثل عدد الكم البرمي الكلي، ويساوي مجموع ال (ms) .

*حرف ال (J) الموجود في اسفل يمين رمز التيرم يمثل عدد الكم الزاوي الكلي للذرة، ونتاج من اتحاد الحركة البرمية مع الحركة الاوربيتالية، واعلى قيمة له تساوي $(L+S)$ واكل قيمة له تساوي $(L-S)$

#رموز التيريم هي تعبر عن طبيعة الترتيب الالكتروني للذرات او الايونات، وعليه فالذرات او الايونات المتشابهة في تركيبها الالكتروني لها نفس رمز التيريم رغم اختلاف اعدادها الذرية. لاحظ #الجدول ادناه

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|------------------|--------------|------------------|--------------|-------------------|---------------|-------------------|--------------|------------------|--------------|------------------|--------------|------------------|--------------|------------------|--------------|------------------|--------------|-----------------|-------------|------------------|--------------|
| H $2s_{1/2}$ | | | | | | | | | | | | | | | | | He $1s_0$ | | | | |
| Li $2s_{1/2}$ | Be $1s_0$ | | | | | | | | | | | | | | | B $2p_{1/2}$ | C $3p_0$ | N $4s_{3/2}$ | O $3p_2$ | F $2p_{3/2}$ | Ne $1s_0$ |
| Na $2s_{1/2}$ | Mg $1s_0$ | | | | | | | | | | | | | | | Al $2p_{1/2}$ | Si $3p_0$ | P $4s_{3/2}$ | S $3p_2$ | Cl $2p_{3/2}$ | Ar $1s_0$ |
| K $2s_{1/2}$ | Ca $1s_0$ | Sc $2D_{3/2}$ | Ti $3F_2$ | V $4F_{3/2}$ | Cr $7S_3$ | Mn $6S_{5/2}$ | Fe $5D_4$ | Co $4F_{9/2}$ | Ni $3F_4$ | Cu $2s_{1/2}$ | Zn $1s_0$ | Ga $2p_{1/2}$ | Ge $3p_0$ | As $4s_{3/2}$ | Se $3p_2$ | Br $2p_{3/2}$ | Kr $1s_0$ | | | | |
| Rb $2s_{1/2}$ | Sr $1s_0$ | Y $2D_{3/2}$ | Zr $3F_2$ | Nb $6D_{1/2}$ | Mo $7S_3$ | Tc $6S_{5/2}$ | Ru $5F_5$ | Rh $4F_{9/2}$ | Pd $1s_0$ | Ag $2s_{1/2}$ | Cd $1s_0$ | In $2p_{1/2}$ | Sn $3p_0$ | Sb $4s_{3/2}$ | Te $3p_2$ | I $2p_{3/2}$ | Xe $1s_0$ | | | | |
| Cs $2s_{1/2}$ | Ba $1s_0$ | La $2D_{3/2}$ | Hf $3F_2$ | Ta $4F_{3/2}$ | W $5D_0$ | Re $6S_{5/2}$ | Os $5D_4$ | Ir $4F_{9/2}$ | Pt $3D_3$ | Au $2s_{1/2}$ | Hg $1s_0$ | Tl $2p_{1/2}$ | Pb $3p_0$ | Bi $4s_{3/2}$ | Po $3p_2$ | At $2p_{3/2}$ | Rn $1s_0$ | | | | |
| Fr $2s_{1/2}$ | Ra $1s_0$ | Ac $2D_{3/2}$ | Rf $3F_2$ | Db $4F_{3/2}?$ | Sg $5D_0?$ | Bh $6S_{5/2}?$ | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og | | | | |

| | | | | | | | | | | | | | |
|--------------|-------------------|--------------|-------------------|--------------|------------------|--------------|-------------------|--------------|-------------------|--------------|------------------|--------------|-------------------|
| Ce $1G_4$ | Pr $4I_{9/2}$ | Nd $5I_4$ | Pm $6H_{5/2}$ | Sm $7F_0$ | Eu $8S_{7/2}$ | Gd $9D_2$ | Tb $6H_{15/2}$ | Dy $5I_8$ | Ho $4I_{15/2}$ | Er $3H_6$ | Tm $2F_{7/2}$ | Yb $1s_0$ | Lu $2D_{3/2}$ |
| Th $3F_2$ | Pa $4K_{11/2}$ | U $5L_6$ | Np $6L_{11/2}$ | Pu $7F_0$ | Am $8S_{7/2}$ | Cm $9D_2$ | Bk $6H_{15/2}$ | Cf $5I_8$ | Es $4I_{15/2}$ | Fm $3H_6$ | Md $2F_{7/2}$ | No $1s_0$ | Lr $2P_{1/2}?$ |

Dr. Basim Hatim Al-Zaidi, Mustansiriyah University, College of Science

❖ إذا **الترتيب الالكتروني** هو من يحدد **رمز التيرم** للذرة او الايون المعني.

❖ هنا يتبادر الى اذهاننا سؤال وهو: هل ان الترتيب الالكتروني الذي تعلمناه هو **الترتيب الوحيد** الممكن للذرة او الايون؟؟

❖ الجواب: **كلا**... فهناك عدة احتمال لتوزيع الكترونات الغلاف الخارجي (**التكافؤي**)، (بمعنى اخر هناك طرق مختلفة **لترتيب او توزيع** الالكترونات داخل اوربيتالات الغلاف الثانوي)، وتسمى هذه الطرق **#احتمالات التوزيع (Microstates)** ، حيث ان **كل توزيع** يمثل **حالة طاقة معينة**، ويمكن معرفة عدد هذه الحالات من خلال القانون الاتي:-

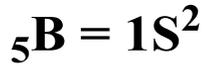
❖ حيث $(e!)$ ، مفكوك او مضروب عدد الالكترونات التكافؤية

❖ و (L) يمثل عدد كم العزم الزاوي الاوربيتالي

$$Microstates = \frac{(2(2l+1))!}{e!(2(2l+1)-e)!}$$

#مثال: جد عدد احتمالات التوزيع الالكتروني لذرة البورون.

#الجواب: نكتب الترتيب الالكتروني للبورون



| m_l | | |
|-------|---|----|
| +1 | 0 | -1 |
| ↑ | | |

• والان نطبق القانون اعلاه لمعرفة..احتمالات التوزيع

$$Microstates = \frac{(2(2l+1))!}{e!(2(2l+1)-e)!} = \frac{6!}{1! \times 5!} = 6$$

✓ اتضح ان هناك **#ستة** احتمالات للتوزيع **الالكترون المفرد** في الغلاف الثانوي (p) لذرة البورون يوضحها الجدول الاتي:

| $m_l = +1$ | $m_l = 0$ | $m_l = -1$ |
|------------|-----------|------------|
| ↑ | | |
| | ↑ | |
| | | ↑ |
| | | ↓ |
| | ↓ | |
| | | ↓ |

✓ **ملاحظة** اي غلاف ثانوي ضمن طبقة التكافؤ اذا كان ممتلئ بالالكترونات يهمل.. لان كل الكترون يلغي تأثير العزم الزاوي الاوربييتالي والبرمي للالكترون الاخر، في مثالنا هذا لم نأخذ الكتروني الغلاف الثانوي (2S) في حساباتنا.

✓ لو رجعنا لجدول رموز التيرم لوجدنا ان رمز التيرم للبورون وباقي عناصر زممرته والتي **تنتهي بذات الترتيب الالكتروني** هو نفسه ($^2P_{1/2}$).

✓ رغم ان احتمالات التوزيع الالكتروني ممكن ان تعطينا اكثر من رمز تيرم محتمل، وهما ($^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$)، ولكن تم اختيار **احدهما** بناء على **قواعد هوند** والتي

سنشرحها لاحقا.

➤ الآن لتعرف على احتمالات التوزيع (او احتمالات الترتيب) الالكتروني للكاربون:

➤ نكتب الترتيب الالكتروني للكاربون: ${}_6\text{C} = 1\text{S}^2 \quad 2\text{S}^2 \quad 2\text{P}^2$

| m_l | | |
|-------|---|----|
| +1 | 0 | -1 |
| ↑ | ↑ | |

➤ الان نطبق قانون ال (Microstates) لمعرفة عدد الاحتمالات، وايضا نلغي مساهمة الكتروني الغلاف الثانوي (2S):

$$\text{Microstates} = \frac{(2(2l+1))!}{e!(2(2l+1)-e)!} = \frac{6!}{2! \times 4!} = 15$$

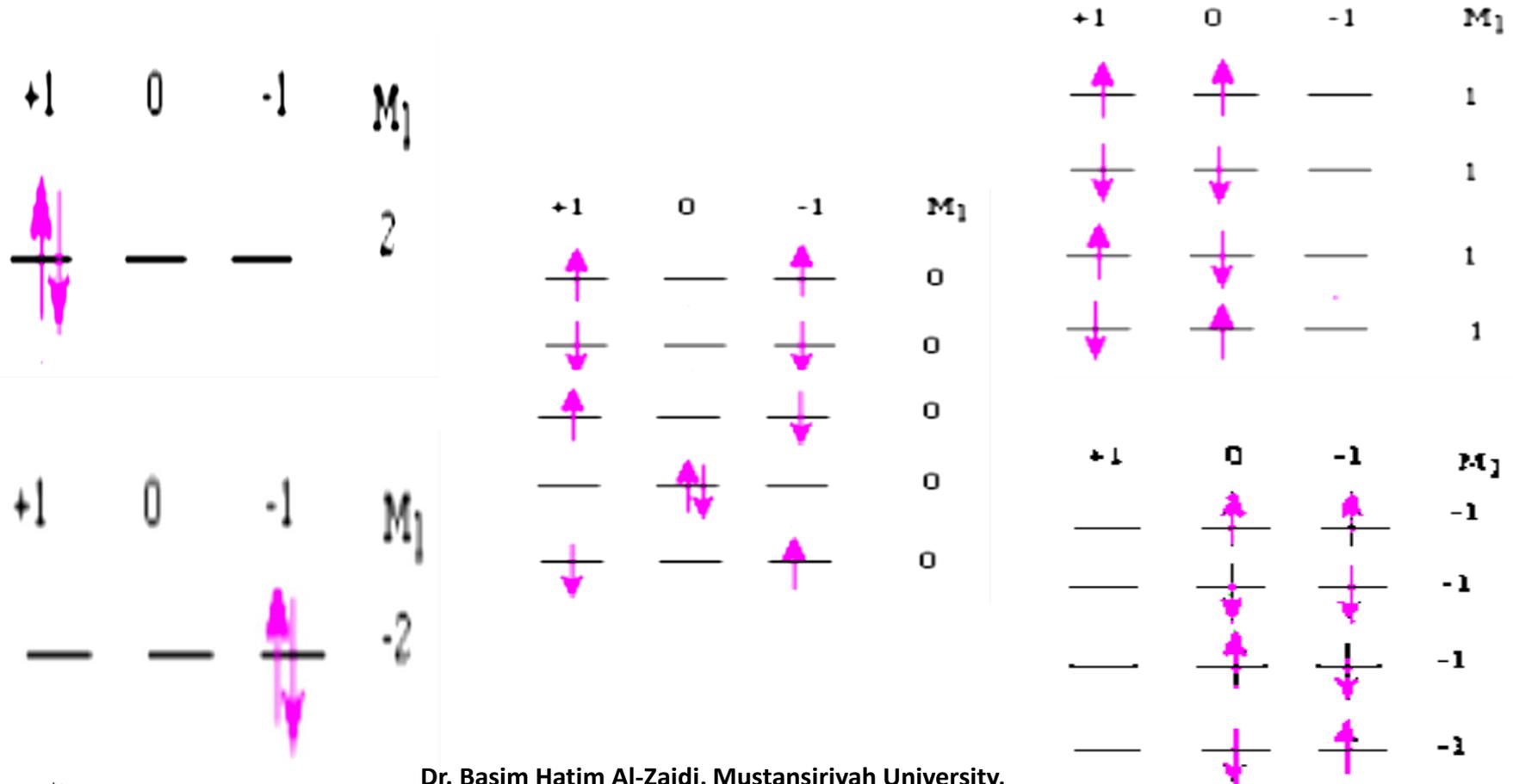
➤ هذا يعني هناك (15) احتمال لتوزيع الالكترونين في الغلاف الثانوي (p)، واحد منها هو اكثر استقرارا لانه يتطلب اقل مستوى من الطاقة اما البقية فهي حالات ممكنه لكنها اقل استقرارا وتتطلب طاقة اعلى.

➤ احتمالات التوزيع بالنسبة لعدد الكم البرمي هي (15)، وفيه ثلاث احتمالات لها (ms=+1) و#ثلاثة لها (ms=-1) و#تسعة لها (ms=0)

| +1 | 0 | -1 | M_s | +1 | 0 | -1 | M_s | +1 | 0 | -1 | M_s | +1 | 0 | -1 | M_s |
|----|---|----|-------|----|---|----|-------|----|---|----|-------|----|----|----|-------|
| ↑ | ↑ | — | 1 | ↓ | ↓ | — | -1 | ↑↑ | — | — | 0 | ↓ | — | ↑ | 0 |
| ↑ | — | ↑ | 1 | ↓ | — | ↓ | -1 | ↑ | ↓ | — | 0 | — | ↑↓ | — | 0 |
| — | ↑ | ↑ | 1 | — | ↓ | ↓ | -1 | ↑ | — | ↓ | 0 | — | — | ↑↓ | 0 |

➤ كذلك الاحتمالات بالنسبة لعدد الكم اللوربيتالي (ml)، ايضا (15).

➤ احتمال #واحد له ($ml=+2$)، و#اربعة لها ($ml=+1$)، و#خمسة لها ($ml=0$)، و#اربعة احتمالات لها ($ml=-1$)، و#واحد له ($ml=-2$)، وكما موضح في الاشكال الاتية:



✓ عند ايجاد رموز التيريم لهذه الاحتمالات سنحصل على الرموز الاتية :



✓ رمز واحد فقط يمثل حالة الاستقرار، وهو الرمز (3P_0).

✓ اختيار هذا الرمز اعتمادا على قواعد هوند (Hund Rules) الثلاثة والتي تنص على:

■ **الاولى:** الترتيب الالكتروني الاكثر استقرارا هو ذاك الترتيب الذي يمتلك اكبر تعددية برم (الترتيب الذي له اكبر عدد من الالكترونات المنفردة).

■ **الثانية:** اذا كان هناك رمزين او اكثر مختلفين ولكن لهم نفس تعددية البرم، نختار الرمز الذي له اعلى قيمة ل (L)، فمثلا لو كان لدينا (${}^3P, {}^3F$)، نختار (3F) لان قيمة (L) له اعلى.

■ **الثالثة:** نختار قيمة ثابت الازدواج (J)، وله الاحتمالات الاتية:

- اذا كان الغلاف الثانوي اقل من نصف مشبع، نختار اقل قيمة ل (J) وهي (L-S).
- واذا كان الغلاف الثانوي اكثر من نصف مشبع، نختار اعلى قيمة ل (J) وهي (L+S).
- اذا كان الغلاف الثانوي نصف مشبع فهناك قيمة واحدة ل (J).

❖ تطبيق لقواعد هوند لذرة الكربون لاختيار رمز تيرم الحالة المستقرة



✓ القاعدة الاولى (تعددية البرم): واضح من الرموز اعلاه هناك حالتين برميتين الاولى **ثلاثية (Triplet State)** تتضمن وجود **الالكترونين منفردين** في اوربيتالين **مختلفين**، والثانية **احادية (Singlet State)** تشير الى وجود **الالكترونين مزدوجين** في ذات الاوربيتال. لذا نختار الثلاثية كونها اكثر استقرارا.

✓ القاعدة الثانية (قيمة L or T): لدينا ثلاث حالات ثلاثية البرم، كلها لنفس الرمز (p).

✓ القاعدة الثالثة (قيمة J): بما انه وحسب الترتيب الالكتروني للكربون فان الغلاف الثانوي (p) فيه فقط الكترونين (**اقل من نصف مشبع**) و فعليه نختار **اقل قيمة ل (J)** ، وعليه تم اختيار رمز تيرم الاستقرار للكربون



الجدول ادناه يمثل الترتيب الالكتروني وما يقابله من رموز الحالة العامة المتوقعة له.

Configuration

Terms

p^1, p^5

2P

p^2, p^4

$^3P, ^1D, ^1S$

p^3

$^4S, ^2P, ^2D$

d^1, d^9

2D

d^2, d^8

$^3P, ^3F, ^1S, ^1D, ^1G$

d^3, d^7

$^2P, ^2D, ^2D, ^2F, ^2G, ^2H, ^4P, ^4F$

d^4, d^6

$^1S, ^1S, ^1D, ^1D, ^1F, ^1G, ^1G, ^1I, ^3P, ^3P, ^3D, ^3F, ^3F, ^3G, ^3H, ^5D$

d^5

$^2S, ^2P, ^2D, ^2D, ^2D, ^2F, ^2F, ^2G, ^2G, ^2H, ^2I, ^4P, ^4D, ^4F, ^4G, ^6S$

➤ **مثال:** جد رمز تيرم الحالة المستقرة للنايتروجين

➤ **الجواب:** نكتب الترتيب الالكتروني للنايتروجين

$$7N = 1S^2 \quad 2S^2 \quad 2P^3$$

| m_l | | |
|-------|---|----|
| +1 | 0 | -1 |
| ↑ | ↑ | ↑ |

➤ **نحسب** قيمة (L) لنحدد رمز التيرم (T)، وكما مبين:

$$L = 1*(+1) + 1*(0) + 1*(-1) = 0$$

$$T = S$$

➤ **نحسب** قيمة ال (S) ومنها تعددية البرم (M):

$$S = 1*(+1/2) + 1*(+1/2) + 1*(+1/2) = 3/2$$

$$M = (2*S + 1) = 2*(3/2) + 1 = 4$$

➤ **نحسب** قيمة ثابت الازدواج (J)، مع ملاحظة ان الغلاف الثانوي نصف مشبع: (نأخذ قيمة **واحدة**

ل (J) لانه من غير الممكن ان تكون قيمته سالبة ($J \neq \text{negative value}$)، وعلية فان رمز تيرم الاستقرار هو لذرة النايتروجين $4S_{3/2}$

➤ **ملاحظة:** عند تطبيق قانون ال (**Microstate**) لذرة النايتروجين فان هناك (**20**) احتمالية

متوقعة لتوزيع الالكترونات في الغلاف الثانوي الخارجي للنايتروجين، ولكن الرمز الذي يمثل التوزيع الاكثر استقرارا هو المذكور اعلاه.