آرایش الکترونی نوین

(The New Electron Configuration)

نگارنده: حمید

با دانستن آرایش الکترونی در اتم هر عنصر شیمیائی می توان ویژگی های فیزیکی و شیمیائی آن را پیش بینی نمود. به عبارت دیگر، ویژگی های یک عنصر به طور عمده توسط تعداد الکترون ها و نحوهٔ چیدمان یا آرایش آنها و نیز چگونگی دسته بندی آنها در ساختار اتمی آن عنصر تعیین می شود. بنابراین، در بدو امر لازم است در مورد سامانهٔ مُدل اتمی موجود که به گونه ای فراگیر توسط تمامی مجامع علمی، تحقیقاتی و دانشگاهی پذیرفته شده و آموزش داده می شود تدقیق نمائیم تا گشایشی باشد برای تأمّلی تازه.

مُدل کوانتومی اتم (یا مُدل ابر الکترونی) با همکاری بسیاری از دانشمندان پی ریزی شده است. از جمله دانشمندانی که در این مدل اتمی سهمی چشمگیر داشته اند می توان *هایزنبرگ* ، *پلانک* و *شرودینگر* را نام برد، البته *اینشتین* نیز توانست به شکل گیری این مدل اتمی کمک کند. بر اساس این مدل، اتم ها از هسته و الکترون تشکیل شده اند. هسته در مرکز اتم قرار دارد و الکترون ها در اطراف هسته در سطوح یا ترازهای انرژی مشخصی حرکت می کنند، امّا بر اساس "*اصل عدم قطعیّت هایزنبرگ*" تعیین مکان و سرعت الکترون ها به طور هم زمان و در یک لحظه امکان پذیر نیست! الکترون ها در اطراف هستهٔ اتم در فضایِ مشخصی حرکت می کنند که به آن ابر الکترونی نیز گفته می شود. به طور کلی، این ابر الکترونی در نزدیک هسته و خیلی دور از هسته تراکمی کم و بین این دو کرانه تراکمی بیشتر دارد. به این فضای واقع دراطراف هستهٔ اتم که دارای بیشترین احتمالِ وجود الکترون است اوربیتال(orbital) یا لایه (shell) می گویند. اوربیتال ها در واقع ترازِ انرژیِ (energy level) الکترون ها را مشخص می کنند. عدد کوانتومی اصلی، که با حرف "n" نشان داده می شود، عددی است که *نیلز بُور* برای مشخص کردن ترازهای انرژی یا همان لایه های الکترونی به کار برد. این ترازها را با اعداد صحیح **۱** تا **۷** و گاه با حروف K, L, M, N, O, P , Q نشان می دهند. عدد کوانتومی اصلی برای پایدارترین لایهٔ انرژی یک است. هر چقدر "n" بالاتر رود تراز انرژی لایه های الکترونی افزایش می یابد و فاصلهٔ آن لایه از هستهٔ اتم بیشتر می شود. هر یک از این اوربیتال ها به چند زیر لایه (sub-shell) تقسیم می شوند که دارای الکترون هائی هستند که انرژی آنها یکسان است! در مدل کوانتومیِ موجود، تجسّم اتم بسیار مشکل است، در نتیجه گویا تلاش شده است تا آن را بر اساس *معادلهٔ شرودینگر* (Schrödinger equation) با شکل های پیچیدهٔ سه بُعدی که یافتن منطق آنها ناشدنی است نشان دهند! به همین دلیل برای مطالعهٔ دگرگونی های اتم در یک واکنش معمولاً از *مدل اتمی بُور (Bohr Model)* استفاده می شود!

آنچه که در بالا به عنوان مدل کوانتومی موجود شرح داده شد بر اصول یا قواعد زیر بنا شده است:

۱) *اصل برپایی (به آلمانی: Aufbauprinzip)*

الکترون ها ابتدا و به ترتیب اوربیتال های موجودی که کمترین تراز انرژی را داشته باشند پُر می کنند.

۲) *اصل طرد پائولی (Pauli exclusion principle)*

هر زیر لایه حداکثر دو الکترون با اِسپین مخالف می تواند دریافت کند.

چهار نوع زیر لایه وجود دارد: **s, p, d, f** . تعداد آنها به شرح زیر است:

- یک زیر لایهٔ **s** ، بنابراین **s** دو الکترون دریافت می کند.
- سه زیر لایهٔ **p** ، بنابراین **p** شش الکترون دریافت می کند.
- پنج زیر لایهٔ **d** ، بنابراین **d** ده الکترون دریافت می کند.
- هفت زیر لایهٔ **f** ، بنابراین **f** چهارده الکترون دریافت می کند.

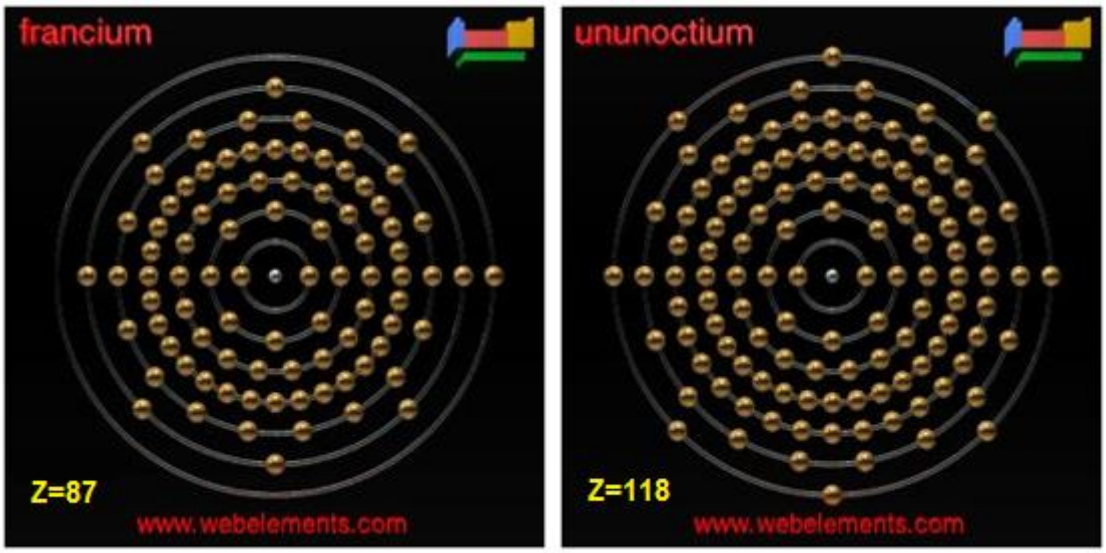
۳) *قاعدهٔ هوند (Hund's rule)*

تا در هر یک از زیر لایه ها یک الکترون جای نگیرد هیچ کدام از آنها دارای دو الکترون نمی شود .

در مدل کوانتومی موجود که در بالا چکیدهٔ آن شرح داده شد و در اینجا بیان جزئیات بیشتر در مورد آن ضرورتی ندارد، آنچه که بیش از همه به چشم می خورد مقولهٔ چگونگی هاست، از چرائی ها هیچ حرفی به میان نمی آید! افزون بر آن، در این مدل اگرچه گهگاه از احتمالات که زیر بنای مکانیک کوانتومی است صحبت می شود، امّا همه چیز حتّی تعداد لایه ها و زیر لایه ها و نیز تعداد الکترون در آنها بدون استدلال

علمی با یقین مطرح می شود! در نتیجه، باید پذیرفت که این مدل ساختاری مطلقاً تجربی (empirical) دارد که در فرآیندی طولانی مدّت و با آزمون و خطا و نیز اضافه کردن شماری از اصول و قواعد گام به گام *بهبود* یافته است. امّا از آنجا که همین مدل تا کنون توانسته است به نحو قابل قبولی شناخت ما را نسبت به ساختار اتمی عناصر گوناگون کامل تر کند و پیرو آن پیشرفت روز افزون در تکنولوژی را موجب شود، پس باید دست کم وجه کلی و تعیین کنندهٔ آن نزدیک به موازین علمی باشد. البتّه اگر به آن موازین علمی دست پیدا کنیم بی گمان نتایج منطقیِ بر آمده از آن قابل فهم تر و دقیق تر و آموزش آن نیز به مراتب ساده تر خواهد بود. با اطمینان می توان گفت که آن موازین علمی خود موجب کامل تر شدن شناخت ما در مورد ساختار اتم نیز می شود. در این مرحله باید برای یافتن آن وجه مشترک تلاش کنیم. در فرآیند این جستجو خود به خود به پیچیدگی ها و نارسائی های مدل اتمی موجود پی خواهیم برد.

بر اساس اطلاعات موجود، در حال حاضر تعداد ۱۱۸ عنصر در *جدول تناوبی مندلیف* وجود دارد که از *هیدروژن* (Hydrogen, [H]) شروع شده و به *آن ان اکتیوم* (Ununoctium, [Uuo]) ختم می شود. از *هیدروژن* تا عنصر هشتاد و ششم یعنی *رادون* (Radon, [Rn]) تعداد اوربیتال ها یا لایه ها کمتر از هفت است. از عنصر هشتاد و هفتم یعنی *فرانسیُم* (Francium, [Fr]) به بعد تعداد هفت اوربیتال در ساختار اتمی عناصر وجود دارد که تصویری کلی تر و گویا تر از چگونگی آرایش الکترونی طبق ملاک های موجود ارائه می دهند. بنابراین ۳۲ عنصرِ واقع در انتهای جدول تناوبی عناصر موضوع بررسی ما خواهند بود. در **شکل ۱** طرح کلی ساختار لایه ها که برگرفته شده از *مدل اتمی بُور* می باشد برای *فرانسیُم* و *آن ان اکتیوم* نشان داده شده است.



شکل ۱- ساختار طرح کلی لایه های الکترونی در عناصر *فرانسیُم* و *آن ان اکتیوم*
http://www.webelements.com

شیوهٔ نگارشِ آرایش الکترونی در مدل کوانتومی موجود نیز پیچیدگی های مخصوص به خود را دارد و در نتیجه فراگیری آن برای دانشجویان بسیار مشکل و خسته کننده است. در ادامهٔ مطلب، با درج آرایش الکترونی برای دو عنصر نشان داده شده در بالا با روش کوتاه نویسیِ این مدل نیز آشنا می شویم:

Ununoctium, [Uuo]: [Rn] $5f^{14}$ $6d^{10}$ $7s^2$ $7p^6$
Francium, [Fr]: [Rn] $7s^1$
Radon, [Rn]: [Xe] $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^2$ $6p^6$
Xenon, [Xe]: [Kr] $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^6$
Krypton, [Kr]: [Ar] $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^6$
Argon, [Ar]: [Ne] $3s^2$ $3p^6$
Neon, [Ne]: [He] $2s^2$ $2p^6$
Helium, [He]: $1s^2$

به عبارت دیگر، برای نگارش کامل آرایش الکترونی *آن ان اکتیوم* باید تعداد ۶۳ نماد (کاراکتر) و برای *فرانسیُم* ۵۲ *نماد* در کنار هم قرار بگیرند!

تعداد الکترون ها در هفت لایه یا اوربیتالِ مربوط به آرایش الکترونی دو عنصر یاد شده در بالا در **جدول ۱** داده شده است.

جدول ۱- تعداد الکترون ها در اوربیتال هایِ *فرانسیُم* و *آن ان اکتیوم*

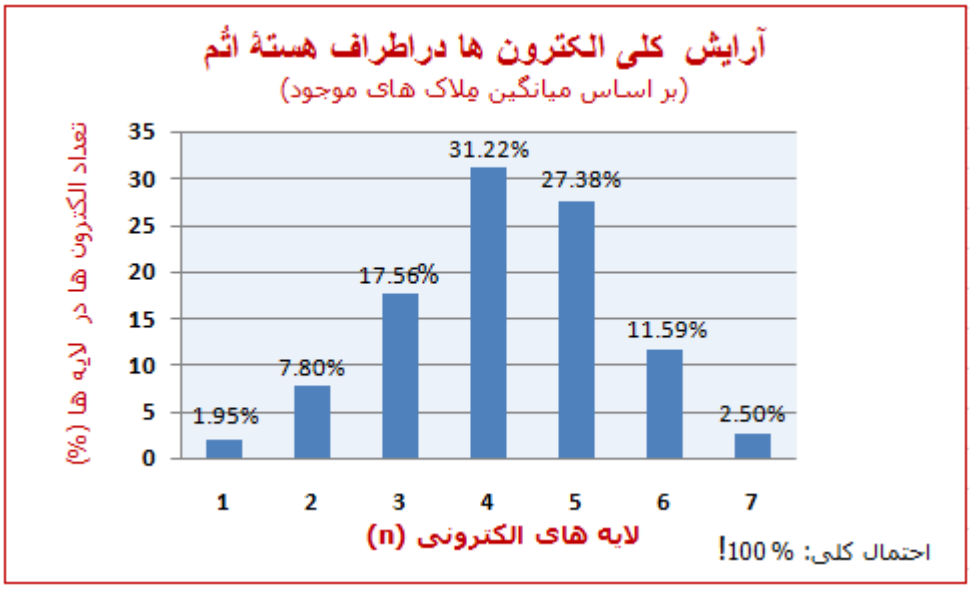
عنصر	لایه (اوربیتال)							عدد اتمی (Z)
	1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	
Francium, [Fr]	2	8	18	32	18	8	1	87
Ununoctium, [Uuo]	2	8	18	32	32	18	8	118

اگرچه آرایش های الکترونی نشان داده شده در جدول بالا میزان تراکمِ تعداد الکترون ها را در ساختار اتمی این دو عنصر نشان می دهند، امّا نباید فقط این دو آرایش را ملاک ارزیابی قرار داد. برای دست یافتن به تصویری جامع تر از مدل کوانتومی موجود، بهتر است **جدول ۱** را برای ۳۲ عنصر واقع در انتهای جدول تناوبی مندلیف پُر کرده و سپس میانگین تعداد الکترون ها را برای یکایک اوربیتال ها استخراج کنیم. نتیجه یک عنصر فرضی خواهد بود با عدد اتمی Z=102.5 که می توان از آن به عنوان عنصر "*میانگین*" یاد کرد. تعداد الکترون ها در اوربیتال های این عنصر فرضی و نیز دو عنصری که بیشترین شباهت را با آن دارند، یعنی *نوبلیُم* و *لارنسیُم*، در **جدول ۲** نشان داده شده است.

جدول ۲ - تعداد الکترون ها در اوربیتال هایِ عنصر *میانگین*

عنصر	لایه (اوربیتال)							عدد اتمی (Z)
	1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	
Miangin	2	8	18	32	28.1	11.9	2.5	102.5
Nobelium, [No]	2	8	18	32	32	8	2	102
Lawrencium, [Lr]	2	8	18	32	32	9	2	103

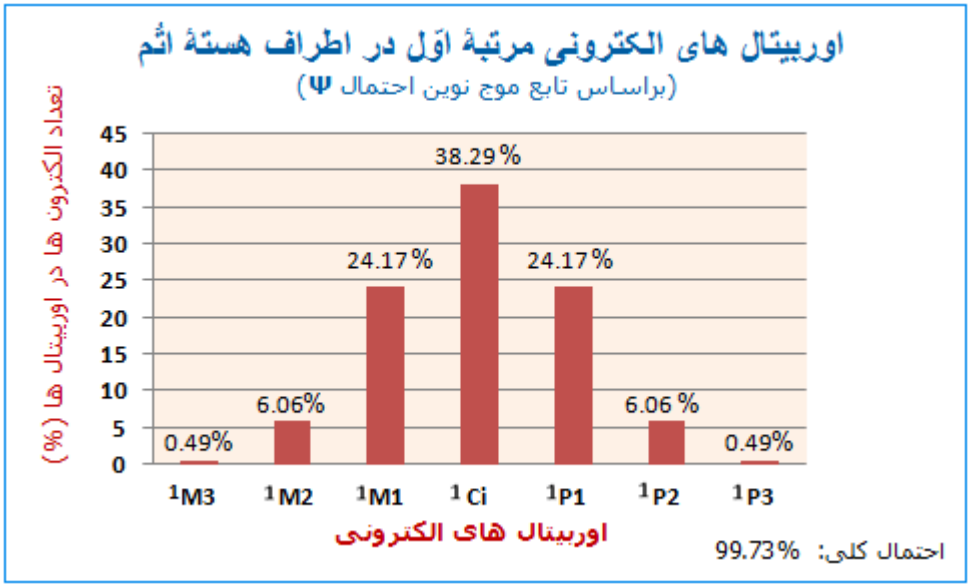
چگالی تعداد الکترون ها در اوربیتال ها یا لایه هایِ عنصر *میانگین* در **شکل ۲** نشان داده شده است.



شکل ۲- چگالی تعداد الکترون ها در لایه ها، بر اساس میانگین ملاک های موجود

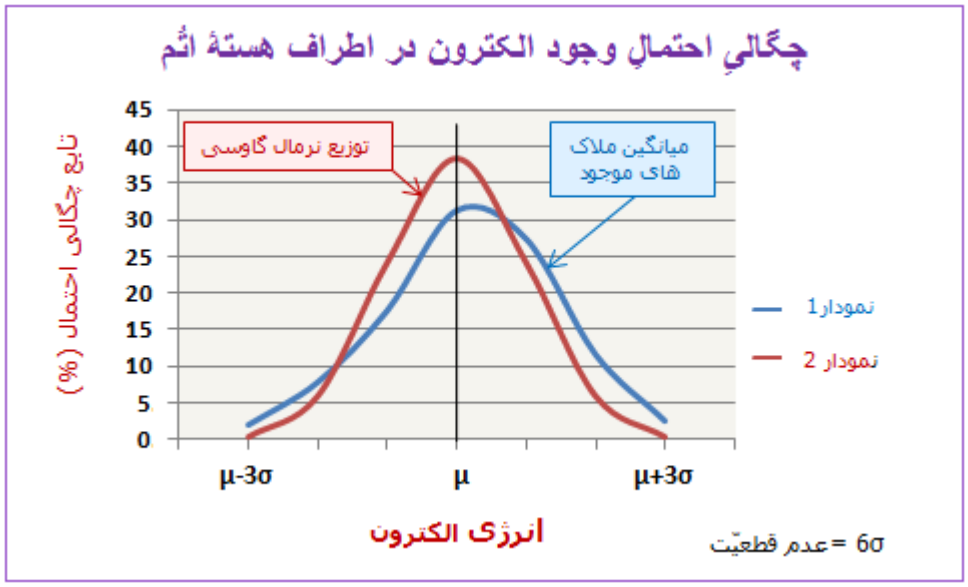
بر اساس تابع موج نوین احتمال (Ψ) که برای اوّلین بار در مقالهٔ "***تابع موج، توزیع گاوُسی پیشرفته***" معرفی شده و در مقالهٔ "***طول دقیق پلانک گرانش کوانتومی را آشکار می کند***" به جزئیات بیشتری در مورد آن پرداخته شده است، دست یابی به احتمال 100% یا یقین مطلق، که مترادف با عدم قطعیتی برابر با صفر می باشد، در فضای کوانتومی عملاً غیر ممکن است.

برای دست یافتن به آن موازین علمی که قبلاً به آن اشاره شد، لازم است در این مرحله به تابع موج نوین احتمال رجوع کرده و نتایج به دست آمده از آن را با میانگینِ ملاک های مدل کوانتومی موجود مقایسه کنیم. تابع Ψ مبتنی بر احتمال کلی 99.73% یا عدم قطعیتی برابر با 6σ است. در این تابع الکترون های موجود در هر اوربیتال نیز بر اساس *تابع چگالی احتمال* خاص خود توزیع می شوند. به عبارت دیگر، هم در اوربیتال های مرتبهٔ اوّل و هم در زیر اوربیتال ها، که همان اوربیتال های مرتبهٔ بالا تر هستند، مقولهٔ ابر الکترونی به راستی و به گونه ای ریاضی وار محقق می شود. در **شکل ۳** چگالی تعداد الکترون ها در اوربیتال های مرتبهٔ اوّل بر اساس تابع موج نوین احتمال نشان داده شده است.



شکل ۳- چگالی تعداد الکترون ها در اوربیتال های مرتبهٔ اوّل، بر اساس **Ψ**

اگر چه با یک نگاه کلی به نمودار های ارائه شده در شکل های ۲ و ۳ مشابهت هائی بین آنها دیده می شود، امّا امکان مقایسهٔ دقیق تر آنها نیز وجود دارد. نمودار مندرج در شکل ۳ مبتنی بر *توزیع نرمال گاوُسی* است. در حالی که برای نمودار نشان داده شده در شکل ۲ هیچ نظم ریاضی واری وجود ندارد، چرا که مبنای آن مطلقاً تجربی است. با وجود این برای میانگین ملاک های موجود نیز می توان منحنیِ فرضیِ تابع چگالی احتمال را از طریق نقطه یابی ترسیم نمود. این مقایسه را می توانید در **شکل ۴** ببینید.



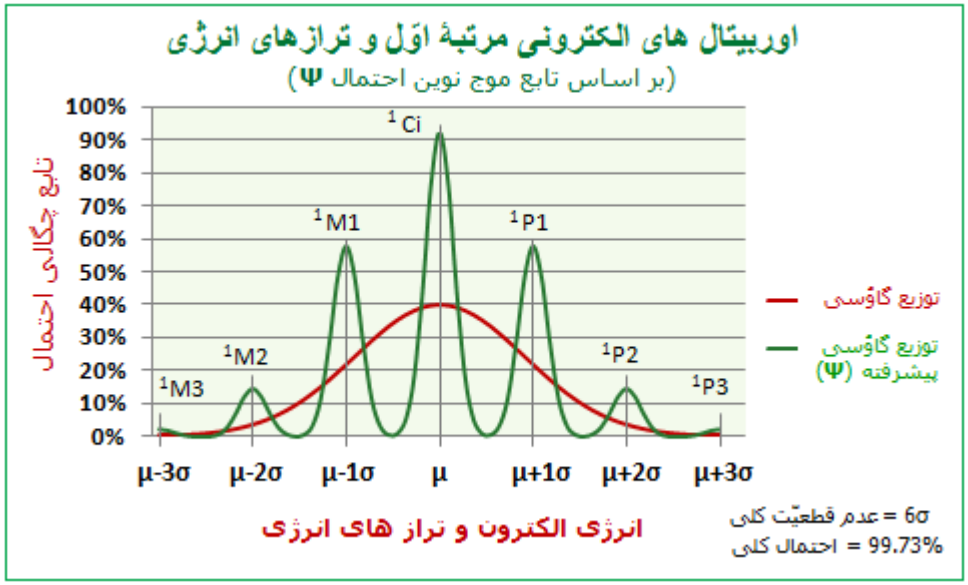
شکل ۴- مقایسهٔ چگالی احتمال میانگینِ ملاک های موجود با چگالی احتمال توزیع گاوُسی

با توجّه به اینکه بین μ-3σ و μ+3σ سطح زیر منحنیِ توزیعِ نرمال، **نمودار ۲**، برابر با 0.9973 است (P_N=99.73%)، می توان حدس زد که سطح زیر منحنیِ مر بوط به میانگینِ ملاک های مو جود در همین

فاصله ، **نمودار ۱**، تا حدودی کمتر از مقدار مذکور است (P_M<99.73%). محاسبهٔ انجام شده با تقریبی بسیار خوب سطح بیشینهٔ 0.9790 را نشان می دهد (P_M=97.90%). با واژگانی دیگر، یقینی که در مدل کوانتومی موجود برای آرایش الکترونی وجود دارد (P=100%) نه تنها از دیدگاه ریاضی درست نیست بلکه احتمال کلی در میانگین این مدل عملاً حدود 1.83% کمتر از احتمال کلی مطرح شده در تابع موج نوین احتمال است.این بدان مفهوم است که به عنوان نمونه، شُمار کل الکترون هائی که در عنصر *آن ان اکتیوم* وجود دارد در حقیقت حدود 2 واحد بیشتر از آن چیزی است که در مدل اتمی موجود با یقین مطرح می شود. بنابراین، با روشی ریاضی وار می توان پیش بینی نمود که در ساختار اتمیِ عنصر *آن ان اکتیوم* تعداد کل الکترون ها با تقریب خوب حدود 120 است، و نه 118! افزون بر آن، نمودار ۱ در مقایسه با نمودار ۲ که متقارن است انحرافی قابل توجّه به سمت راست دارد.

این تجزیه و تحلیل به درستی نشان می دهد که ملاک های موجود در مورد آرایش الکترونی اگرچه تجربی است امّا با چشم پوشی از جزئیات گیج کنندهٔ آن میانگینی نزدیک به موازین علمی دارد. همین امر موجب شده است که مدل اتمی موجود تا کنون کاربُرد پذیر باشد.

جهت آشنا شدن خواننده با آرایش الکترونیِ قابل استنتاج از تابع موج نوین احتمال (Ψ)، اوربیتال های مرتبهٔ اوّل و نیز تراز های انرژیِ مبتنی بر این تابع در **شکل ۵** نشان داده شده است.



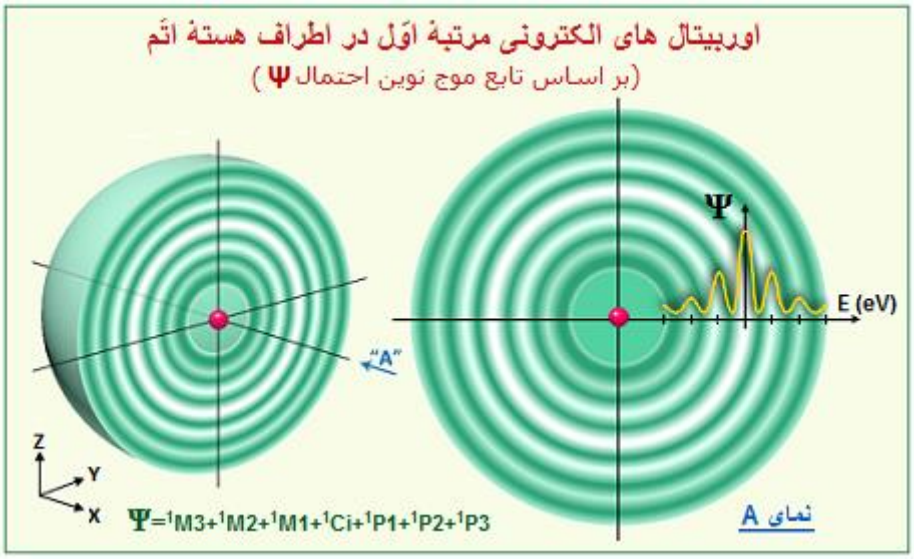
شکل ۵- اوربیتال های الکترونی مرتبهٔ اوّل و تراز های انرژی بر اساس تابع موج نوین احتمال **Ψ**

در مقالهٔ "***علیه مفهوم دوگانگی موج- ذرّه***" توضیحات بیشتری در مورد اوربیتال ها، زیر اوربیتال ها، پوسته ها (shells)، تراز های انرژی و همچنین شیوهٔ نامگذاری آنها بر اساس تابع **Ψ** ارائه شده است.

پیشتر در مقالهٔ "**تابع موج، توزیع گاوسی پیشرفته**" شرح داده شد که قانون توزیع نُرمال (توزیع گاوُسی) با روشی شگفت آور و غیر قابل تردید چگونگی رفتار کوانتومی طبیعت را در يك فورمول رياضی خلاصه مي كند. ***تابع موج***، از سوی دیگر، نمایانگر ساختار یا ساختار های زیر کوانتومی این رفتار در تمام مقیاس ها است، از کوچکترین ذرّات زیر اتمی و اتمی گرفته تا تمام عالَم هستی.

در **شکل ۶**، بدون هر گونه پیش فرض یا اصول و قواعد غیر منطقی، *تابع موج نوین* احتمال یا همان توزیع گاوُسی پیشرفته برای نشان دادن مدلِ کوانتومی و ریاضی وارِ ساختار اتُم و چگونگی آرایش الکترون ها به کار بُرده شده است.

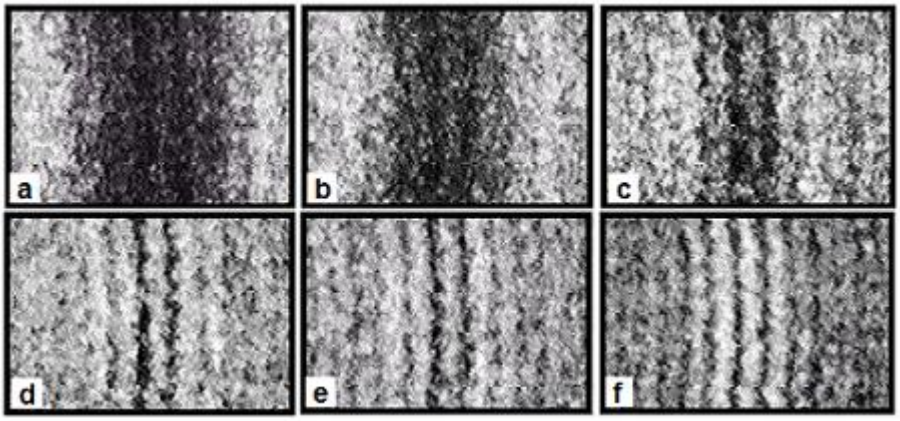
آرایش الکترونی نوین به طور کلی و در ابتدای امر نمایش دهندهٔ چگالیِ احتمالِ وجود الکترون در اطراف هستهٔ اتُم است. امّا بر اساس قوانین حاکم بر آن و در نتیجه قابلیّت هاَی نهفته در آن، از جمله تعاریف ریاضی وارِ ارائه شده برای زیر اوربیتال ها و پوسته ها، امکان تعیین انرژی و نیز مکان هر یک از الکترون ها نسبت به هستهٔ اتُم وجود دارد. به عبارت دیگر، در ساختار اتمی هر یک از عناصر می توان شعاع پوستهٔ کروی یکایک الکترون ها را تعیین نمود. بر اساس این آرایش الکترونی، یکایک الکترون ها در هر یک از عناصر شیمیائی با استفاده از کُد گذاری زنجیره ای (chain coding) نام مخصوص به خود را خواهند داشت.



شکل ۶- چگالی احتمال وجود الکترون در اطراف هسته اتم

آنسان که پیداست مدل کوانتومی جدید شباهت هائی نیز با ***مدل اتمی بُور*** *(Bohr Model)* دارد. امّا در آرایش الکترونی نوین چگونگی تشکیل اوربیتال ها یا ابرهای الکترونیِ کروی شکل (spherical orbitals) در اطراف هستهٔ اتُم بر اساس قوانین احتمالات و تفسیری واقع بینانه از مکانیک کوانتومی به گونه ای فراگیر بنا شده است، در حالیکه *مدل اتمی بُور* تجربی بوده و فاقد مبانی علمی است. به عبارت دیگر، مدل کوانتومی جدید بدون هر گونه استثنائی برای تعیین ساختار اتمی یکایک عناصر موجود در طبیعت کاربُرد پذیر است. در این مدل نیازی نیست برای تجسّم اتُم به اشکال و احجام پیچیده، موهوم و گمراه کننده مبتنی بر تخیّل غیر منطقی روی بیاوریم. در حقیقت، یکایک الکترون هایِ اتُمِ هر عنصر بر حسب مقدار انرژی خود، که منحصر به فرد است، در یکی از اوربیتال های مرتبهٔ اوّل که هر کدام تراز انرژی و همچنین زیر اوربیتال ها (suborbitals) و پوسته های مخصوص به خود را دارند قرار می گیرند. اولویّت و نحوهٔ پُر شدن اوربیتال ها، زیر اوربیتال ها و در نهایت پوسته ها (shells)، که در هر کدام از آنها تنها یک الکترون جای می گیرد، به چگالی احتمال آنها و نیز به تعداد کل الکترون های موجود در اتُمِ هر عنصر بستگی دارد و به راستی از قوانین احتمالات پیروی می کند.

شکل ۷ که برگرفته شده از مقالهٔ "**شکست نظریهٔ موج توماس یانگ**" است می تواند تا حدودی شباهت بین الگوی واقعیِ آزمایش تفرّق با الکترون ها و آرایش الکترونی نمایش داده شده در **شکل ۶** را نشان دهد.



شکل ۷- الگوی آزمایش تفرّق با الکترون ها
انجام شده در دانشگاه فنّی وین (اتریش)
http://www.ati.ac.at/~summweb/ifm/main.html

توضیحات بیشتر در مورد این شکل را می توانید از **اینجا** بگیرید.

تعریف نظریه همه چیز:

نظریهٔ همه چیز (TOE) نظریه ایست نهایی در فیزیک نظری که مِلاک یگانه ای را برای اندازه گیری و شناخت تمامی پدیده های طبیعی معرفی می کند و می تواند تمام پدیده ها را کاملاً توضیح داده و به یکدیگر پیوند دهد، و به طور کلی نتیجهٔ هر آزمایشی را که قابل انجام باشد پیش بینی کند.

تعریف بالا برای اوّلین بار در مقالهٔ "***بحثی پیرامون نظریهٔ همه چیز***" مطرح گردید. هدف دانشمندان از جمله فیزیکدانان نظری همواره ارائهٔ نظریهٔ واحدی بوده است برای آشتی دادن دو نظریهٔ مهم امّا ناسازگار قرن بیستم، یکی نظریهٔ نسبیّت عام که به ساختار فضا-زمان با مقیاس های بسیار بزرگ می پردازد و دیگری نظریهٔ مکانیک کوانتومی که ساختارهای اتمی و زیر اتمی در مقیاس های بسیار کوچک را شرح می دهد. در نوشتار پیش رو نگارنده تلاش نموده است علاوه بر ارزیابی تعریف بالا، پیوند بین نظریهٔ همه چیز و آرایش الکترونی در ساختار های اتمیِ مبتنی بر مدل کوانتومی موجود را پیدا کند.

(سیزدهم فروردین ماه ۱۳۹۳)