

اتم

یک اتم ، کوچکترین جزء اصلی غیر قابل تقلیل یک سیستم شیمیایی می باشد .

ریشه لغوی

این کلمه ، از کلمه یونانی **atomos** ، غیر قابل تقسیم ، که از $a-$ ، بمعنی غیر و **tomos** ، بمعنی برش ، ساخته شده است. معمولا به معنای اتم‌های شیمیایی یعنی اساسی‌ترین اجزاء مولکول‌ها و مواد ساده می باشد

تاریخچه شناسایی اتم

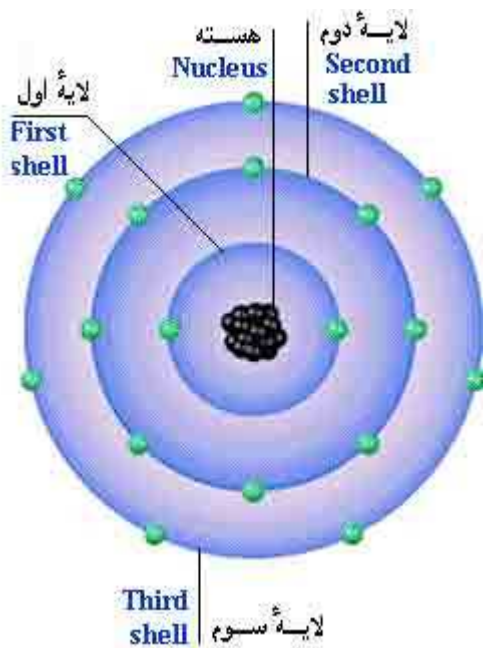
مواد متنوعی که روزانه در آزمایش و تجربه با آن روبه رو هستیم، متشکل از اتم‌های گسسته است. وجود چنین ذراتی برای اولین بار توسط فیلسوفان یونانی مانند دموکریتوس (**Democritus**) ، لئوسیپوس (**Leucippus**) و اپیکورینز (**Epicureanism**) ولی بدون ارائه یک راه حل واقعی برای اثبات آن ، پیشنهاد شد. سپس این مفهوم مسکوت ماند تا زمانیکه در قرن ۱۸ راجر بسکوویچ (**Rudjer Bosovich**) آنرا احیاء نمود و بعد از آن توسط جان دالتون (**John Dalton**) در شیمی بکار برده شد.

راجر بوسویچ نظریه خود را بر مبنای مکانیک نیوتنی قرارداد و آنرا در سال

1758 تحت عنوان:

***Theoria philosophiae naturalis redacta ad unicam
legem virium in natura existentium***

چاپ نمود .



بر اساس نظریه بوسویچ ، اتمها نقاط بی اسکتی هستند که بسته به فاصله آنها از یکدیگر ، نیروهای جذب کننده و دفع کننده بر یکدیگر وارد می کنند. جان دالتون از نظریه اتمی برای توضیح چگونگی ترکیب گازها در نسبتهای ساده ، استفاده نمود. در اثر تلاش آمندو آواگادرو (**Amendo**) (**Avogadro**) در قرن ۱۹ ، دانشمندان توانستند تفاوت میان اتمها و مولکولها را درک نمایند. در عصر مدرن ، اتمها ، بصورت تجربی مشاهده شدند .

اندازه اتم

اتمها ، از طرق ساده ، قابل تفکیک نیستند، اما باور امروزه بر این است که اتم از ذرات کوچکتری تشکیل شده است. قطر یک اتم ، معمولا میان ۱۰ pm تا 100pm متفاوت است .

ذرات درونی اتم

در آزمایش‌ها مشخص گردید که اتم‌ها نیز خود از ذرات کوچکتری ساخته شده‌اند. در مرکز یک هسته کوچک مرکزی مثبت متشکل از ذرات هسته‌ای (پروتون‌ها و نوترون‌ها) و بقیه اتم فقط از پوسته‌های متموج الکترون تشکیل شده است. معمولاً اتم‌های با تعداد مساوی الکترون و پروتون ، از نظر الکتریکی خنثی هستند .

طبقه‌بندی اتم‌ها

اتم‌ها عموماً برحسب عدد اتمی که متناسب با تعداد پروتون‌های آن اتم می‌باشد، طبقه‌بندی می‌شوند. برای مثال ، اتم‌های کربن اتم‌هایی هستند که دارای شش پروتون می‌باشند. تمام اتم‌های با عدد اتمی مشابه ، دارای خصوصیات فیزیکی متنوع یکسان بوده و واکنش شیمیایی یکسان از خود نشان می‌دهند. انواع گوناگون اتم‌ها در جدول تناوبی لیست شده‌اند.

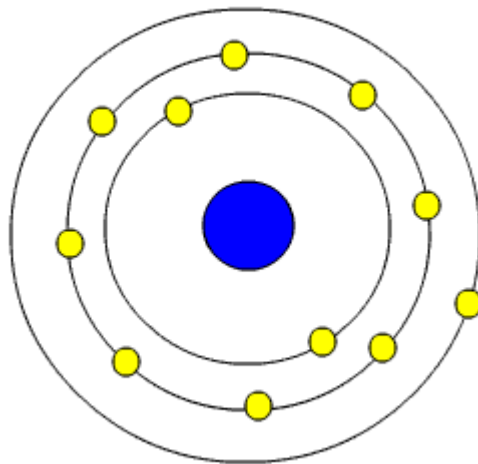
اتم‌های دارای عدد اتمی یکسان اما با جرم اتمی متفاوت (بعلت تعداد متفاوت نوترون‌های آنها)، ایزوتوپ نامیده می‌شوند .

ساده‌ترین اتم

ساده‌ترین اتم ، اتم هیدروژن است که عدد اتمی یک دارد و دارای یک پروتون و یک الکترون می‌باشد. این اتم در بررسی موضوعات علمی ، خصوصا در اوایل شکل‌گیری نظریه کوانتوم ، بسیار مورد علاقه بوده است .

واکنش شیمیایی اتم‌ها

واکنش شیمیایی اتم‌ها بطور عمده‌ای وابسته به اثرات متقابل میان الکترون‌های آن می‌باشد. خصوصا الکترون‌هایی که در خارجی‌ترین لایه اتمی قرار دارند، به نام الکترون‌های ظرفیتی ، بیشترین اثر را در واکنش‌های شیمیایی نشان می‌دهند. الکترون‌های مرکزی (یعنی آنهایی که در لایه خارجی نیستند) نیز موثر می‌باشند، ولی بعلت وجود بار مثبت هسته اتمی ، نقش ثانوی دارند .



پیوند میان اتمها

اتمها تمایل زیادی به تکمیل لایه الکترونی خارجی خود و (یا تخلیه کامل آن) دارند. لایه خارجی هیدروژن و هلیم جای دو الکترون و در همه اتمهای دیگر ظرفیت هشت الکترون را دارند. این عمل با استفاده مشترک از الکترونها از اتمهای مجاور و یا با جدا کردن کامل الکترونها از اتمهای دیگر فراهم می شود. هنگامیکه الکترونها در مشارکت اتمها قرار می گیرند، یک پیوند کووالانسی میان دو اتم تشکیل می گردد. پیوندهای کووالانسی قویترین نوع پیوندهای اتمی می باشند .

یون

هنگامیکه بوسیله اتم ، یک یا چند الکترون از یک اتم دیگر جدا می گردد، یونها ایجاد می شوند. یونها اتمهایی هستند که بعلت عدم تساوی تعداد پروتونها و الکترونها ، دارای بار الکتریکی ویژه می شوند. یونهایی که الکترونها را برمی دارند، **آنیون (anion)** نامیده شده و بار منفی دارند. اتمی که الکترونها را از دست می دهد **کاتیون (cation)** نامیده شده و بار مثبت دارد .

پیوند یونی

کاتیون‌ها و آنیون‌ها بعلت نیروی کولمبیک (coulombic) میان بارهای مثبت و منفی، یکدیگر را جذب می‌نمایند. این جذب پیوند یونی نامیده می‌شود و از پیوند کووالانسی ضعیفتر است.

مرز مابین انواع پیوندها

همانطور که بیان گردید، پیوند کووالانسی در حالتی ایجاد میشود که در آن الکترون‌ها بطور یکسان میان اتمها به اشتراک گذارده می‌شوند، درحالیکه پیوند یونی در حالی ایجاد می‌گردد که الکترون‌ها کاملاً در انحصار آنیون قرار می‌گیرند. بجز در موارد محدودی از حالت‌های خیلی نادر، هیچکدام از این توصیف‌ها کاملاً دقیق نیست. در بیشتر موارد پیوندهای کووالانسی، الکترون‌ها بطور نامساوی به اشتراک گذارده میشوند، بطوریکه زمان بیشتری را صرف گردش بدور اتم‌های با بار الکتریکی منفی‌تر می‌کنند که منجر به ایجاد پیوند کووالانسی با بعضی از خواص یونی می‌گردد. بطور مشابهی، در پیوندهای یونی، الکترون‌ها اغلب در مقاطع کوچکی از زمان بدور اتم با بار الکتریکی مثبت‌تر می‌چرخند که باعث ایجاد بعضی از خواص کووالانسی در پیوند یونی می‌گردد.

اتم اولیه

ریشه لغوی و تاریخچه

کلمه اتم از واژه یونانی *Atomos* (به معنی) تقسیم‌ناپذیر) گرفته شده است. اعتبار نخستین نظریه اتمی را بطور معمول از یونانیان باستان می‌دانند اما ممکن است خاستگاه این مفهوم در تمدنهای پیش از یونان باشد. نظریه اتمی (لوسیپوس) و (موکرتیس) که در قرن پنجم قبل از میلاد مسیح می‌زیستند مدعی آن است که تقسیم‌پذیری ماده در نهایت به اتمهایی می‌رسد که امکان تقسیم بیشتر ندارند.

ارسطو در قرن چهارم قبل از میلاد مسیح نظریه اتمی را نپذیرفت. او باور داشت که بطور فرضی ماده بی‌پایان به ذرات کوچک و کوچکتر تقسیم می‌شود. این نظریه دو هزار سال بصورت اندیشه محض باقی ماند. رابرت بویل در سال ۱۶۶۱ و ایزاک نیوتون در سال ۱۶۸۷ وجود اتمها را پذیرفتند.



نظریه اتمی دالتون

جان دالتون نظریه اتمی را بگونه‌ای طرح کرد که شاخص برجسته‌ای در تاریخ شیمی شد. این نظریه در سالهای ۱۸۰۳ تا ۱۸۰۸ تصحیح گرفت. در آن زمان دانشمندان بسیاری معتقد بودند که ماده از اتم‌ها ترکیب یافته است اما دالتون از این هم پیش رفت. او طرحی برای نظریه اتمی بوجود آورد که می‌توانست قوانین تغییر شیمیایی را توضیح دهد و با نسبت دادن جرمهای نسبی به اتمهای عناصر گوناگون به مفهوم نظریه اتمی صورت کمی داد .

اصول موضوع نظریه دالتون

۱. عناصر از ذرات بی نهایت کوچکی که اتم نامیده می شوند ترکیب یافته اند. تمام اتمهای یک عنصر یکسان و اتمهای عناصر گوناگون متفاوت اند.

۲. در واکنشهای شیمیایی اتمها از هم جدا می شوند و به هم می پیوندند. در این واکنش هیچ اتمی ایجاد نمی شود یا از میان نمی رود و هیچ اتمی از یک عنصر به عنصر دیگر تبدیل نمی شود.

۳. یک ماده مرکب شیمیایی حاصل ترکیب اتمهای دو یا چند عنصر است. یک ماده مرکب معین از اتمهایی ترکیب یافته است که همواره نوع و نسبت آنها ثابت است .

تغییرات در نظریه اتمی دالتون

نظریه دالتون به مفهوم کلی آن امروزه نیز معتبر است. لیکن اصل اول آن تغییر یافته است. دالتون می گفت که تمام اتمهای یک عنصر معین ، جرم اتمی یکسان دارند. امروزه ما می دانیم که تمام اتمهای یک عنصر از لحاظ شیمیایی به هم شبیه و اتمهای یک عنصر با اتمهای عنصر دیگر تفاوت دارند. علاوه بر این ما می توانیم یک جرم متوسط برای اتمهای هر عنصر در نظر بگیریم. در

بسیاری از محاسبات اگر عنصر را از یک نوع اتم با جرم متوسط بدانیم

اشتباهی بوجود نمی آید .

منشا نظریه اتمی دالتون

دالتون وجوه کمی نظریه خود را از درون دو قانون مربوط به تغییرات

شیمیایی بیرون کشید:

۱. قانون پایستاری جرم می گوید که در جریان یک واکنش شیمیایی جرم

تغییر محسوسی نمی کند. اصل دوم نظریه دالتون این قانون را توضیح

می دهد.

۲. قانون نسبتهای معین می گوید که یک ماده مرکب خالص همواره شامل

عناصر معینی است که با نسبت جرمی معین ترکیب می شوند. اصل

سوم نظریه دالتون این قانون را توضیح می دهد .

الکترون

در نظریه دالتون و نظریه های یونانیان اتمها کوچکترین اجزای ممکن ماده

بودند اما در اواخر سده نوزدهم کم کم معلوم شد که اتم خود از ذراتی

کوچکتر ترکیب یافته است. این تغییر دیدگاه نتیجه آزمایشهایی بود که با

الکتریسیته بعمل آمد. در سال ۱۸۰۷ و ۱۸۰۸ شیمیدان انگلیسی همفری دیوی با تجزیه مواد مرکب توسط الکتریسیته پنج عنصر پتاسیم ، سدیم ، کلسیم ، استرونیسم و باریم را کشف کرد . دیوی با این کار به این نتیجه رسید که عناصر با جاذبه‌هایی که ماهیتا الکتریکی هستند به هم متصل می‌شوند.

در سال ۱۸۳۲ و ۱۸۳۳ مایکل فارادی مجموعه آزمایشهای مهمی در زمینه برقکافت شیمیایی انجام داد. در فرایند برقکافت مواد مرکب بوسیله الکتریسیته تجزیه می‌شوند. فارادی رابطه بین مقدار الکتریسیته مصرف شده و مقدار ماده مرکب تجزیه شده را بررسی کرد و فرمول قوانین برقکافت شیمیایی را بدست آورد. بر مبنای کار فارادی جرج جانسون استونی در سال ۱۸۷۴ به طرح این مطلب پرداخت که واحدهای باردار الکتریکی با اتم‌ها پیوستگی دارند. او در سال ۱۸۹۱ این واحدهای الکتریکی را الکترون نامید.

الکترونها در میدان مغناطیسی و الکتریکی منحرف می‌شوند. بعدها مقدار بار الکترون در سال ۱۹۰۹ توسط رابرت . ا . میلیکان محاسبه شد. الکترون یک واحد بار منفی یعنی $q = -1.60221019c$ دارد. جرم الکترون نیز از رابطه q به q/m محاسبه شد و مقدار $m = 9.109610 - 28$ بدست آمد .

پروتون

هرگاه یک یا چند الکترون از یک اتم یا مولکول خنثی جدا شوند باقیمانده ، بار مثبتی برابر با مجموع بارهای منفی الکترونهاى جدا شده دارد. اگر یک الکترون از یک اتم نئون (نماد ، Ne) جدا شود نتیجه یک یون Ne^+ و اگر دو الکترون جدا شود یک یون Ne^{+2} بدست می آید و الی آخر. این نوع ذرات مثبت (یونهاى مثبت) وقتى در لوله تخلیه الکتریکی تولید می شوند که پرتوهای کاتدی از آنها یا مولکولهای موجود در لوله الکترون جدا کنند.

این یونهاى مثبت به طرف الکتروود منفی حرکت می کنند اما الکترونهاى پرتوهای کاتدی چون بار منفی دارند در جهت مخالف (بطرف الکتروود مثبت) حرکت می کنند. این جریان یونهاى مثبت که پرتوهای مثبت نامیده می شوند، نخستین بار توسط یوجین گلدشتاین در سال ۱۸۸۶ مشاهده شدند. این ذرات مثبت پروتون نامیده می شوند و جز تشکیل دهنده تمام اتمها هستند. پروتون یک واحد بار مثبت دارد و علامت آن مثبت است . $q = +1.602210^{-19}$ جرم

پروتون نیز از رابطه q بر q/m محاسبه شد . $m = 1.672610^{-24} gr$

نوترون

چون اتمها از نظر الکتریکی خنثی هستند تعداد الکترونها و پروتونها در هر اتم باید برابر باشد. برای توجیه جرم کل اتمها ارنست رادرفورد در سال ۱۹۲۰

وجود ذراتی بدون بار را در هسته اتم مسلم دانست. چون این ذرات بدون بارند تشخیص و تعیین خواص آنها مشکل است ولی در سال ۱۹۳۲ جیمز چادویک نتیجه کارهای خود را درباره اثبات وجود این ذرات که نوترون نامیده می‌شوند منتشر کرد. او توانست با استفاده از داده‌های بدست آمده از بعضی واکنشهای هسته‌ای مولود نوترون جرم آن را محاسبه کند. چادویک با در نظر گرفتن جرم و انرژی تمام ذراتی که در این واکنشها مصرف و تولید می‌شوند جرم نوترون را که اندکی از جرم پروتون بیشتر است محاسبه کرد.

جرم نوترون $m = 1.675010^{-24}gr$ و جرم پروتون $m = 1.672610^{-24}gr$ است .

هسته اتم

پرتوزایی طبیعی

بعضی از اتمها مجموعه ناپایداری از ذرات بنیادی هستند .این اتمها خود بخود پرتوهایی گسیل می‌دارند و به اتمهای دیگر با هویت شیمیایی متفاوت تبدیل می‌شوند. این فرایند که پرتوزایی نامیده می‌شود که در سال ۱۸۹۶ بوسیله هانری بکرل کشف شد. در سالهای بعد ارنست رادرفورد ماهیت سه نوع پرتو گسیل یافته از مواد پرتوزای موجود در طبیعت را توضیح داد. این

سه نوع پرتو با سه حرف نخستین الفبای یونانی آلفا (a) ، بتا (β) و گاما (γ) مشخص می شوند.

- تابش آلفا مرکب از ذراتی است که بار $2+$ و جرمی تقریباً برابر پروتون دارند. این ذرات آلفا با سرعتی حدود 16000 km/s از ماده پرتوزا بیرون می جهند. نخستین بار که ذرات α مورد مطالعه قرار گرفتند نوترون هنوز کشف نشده بود. امروزه ما می دانیم که ذره آلفا مرکب از دو پروتون و دو نوترون است.

- تابش بتا مرکب از جریانی از الکترونهاست که تقریباً با سرعت km/s 130000 سیر می کنند.

- تابش گاما اصولاً صورتی از نور با انرژی بسیار زیاد است. پرتوهای گاما بدون بار و شبیه پرتوهای ایکس اند .

مدل اتمی رادرفورد

رادرفورد در سال ۱۹۱۱ نتایجی از آزمایشهای خود را که در آنها از ذرات آلفا برای پژوهش در ساختار اتم استفاده شده بود منتشر کرد. آزمایش از این قرار بود که باریکه ای از ذرات α به ورقه بسیار باریکی به ضخامت cm 0.0004 از طلا ، نقره یا مس تابانده شد. اکثر ذرات α بطور مستقیم از

ورقه بیرون رفتند ولی بعضی از آنها از مسیر مستقیم منحرف شده و معدودی بطرف منبع خود بازگشتند. رادرفورد نتایج این آزمایشها را با طرح این فرض که هر اتم مرکب از دو بخش است توضیح داد:

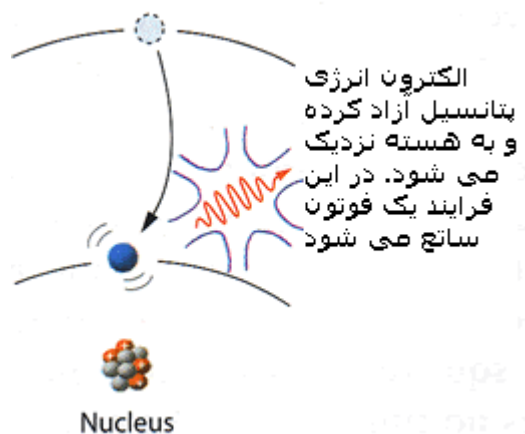
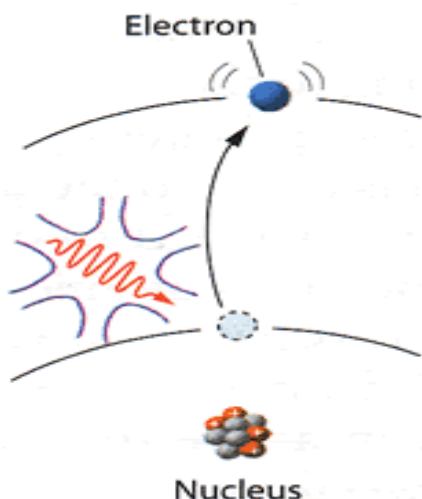
- یک هسته در مرکز اتم وجود دارد. بیشترین جرم و تمام بار مثبت اتم در هسته متمرکز است. اکنون باور ما این است که هسته شامل پروتونها و نوترونهاست که بر روی هم جرم هسته را در بر دارند و بار هسته ناشی از پروتونهای هسته است.

- الکترونها که بیشترین حجم اتم را اشغال می کنند خارج هسته هستند و به سرعت دور هسته حرکت می کنند. چون یک اتم از لحاظ الکتریکی خنثی است بار مثبت کل هسته (که ناشی از پروتونهای آن است) برابر بار منفی همه الکترونهای اتم است. بنابراین عده الکترونها با عده پروتونها برابر است.

مدل بوهر

پذیرفتن مدل اتمی رادرفورد این سوال برای دانشمندان پیش آمد ، که طیف نشری خطی اتم عناصر ، حاصل از چیست ؟

الکترون با دریافت انرژی پتانسیل از فوتون نور از هسته دور شده و به یک تراز بالاتر می رود



الکترون انرژی پتانسیل آزاد کرده و به هسته نزدیک می شود. در این فرایند یک فوتون ساطع می شود

در این هنگام نیلس

بور با پذیرفتن مدل

اتمی رادرفورد چنین

پیشنهاد داد که

الکترون ها در اطراف هسته اتم در سطوح انرژی مشخصی قرار دارند و در

این سطوح به دور هسته اتم در حال چرخیدن هستند. انرژی الکترون هایی

که در سطوح انرژی پایین تر به هسته نزدیک تر هستند، نسبت به الکترون

هایی که از هسته دورند، انرژی کمتری دارند. پس برای انتقال الکترون از

سطح انرژی پایین به سطح انرژی بالا، باید انرژی معادل اختلاف انرژی بین

آن دو سطح ، را به آن الکترون بدهیم . پس انرژی الکترون ها در یک اتم کوانتیده است .

مدل اتمی بور توانست به ما نشان دهد که طیف نشر خطی که از اتم عناصر گسیل می شود ، بر اثر انتقال الکترون ها از سطوح انرژی بالا به سطوح انرژی پایین است ، که در این انتقال انرژی الکترون کاهش و به صورت نور و گرما آزاد می شود.

که اگر این نور آزاد شده را از منشور عبور دهیم طیف نشری آن مشخص می شود . بور ، بیشتر مدل اتمی خود را بر اساس آزمایش هایی که با اتم های هیدروژن و هلیوم انجام داده بود مطرح می ساخت به همین دلیل مدل

اتمى او (که به مدل منظومه شمسی معروف است) برای اتم های سنگینی مانند اورانیم ، آهن و ... صدق نمی کرد

در این هنگام مدل اتمی کوانتمی) یا ابر الکترونی (به همکاری بسیاری از دانشمندان به در عرصه رقابت مطرح شد . از جمله دانشمندانی که در این مدل اتمی سهم چشمگیری داشتند ، هایزنبرگ ، پلانک و شرودینگر را می توان نام برد.

البته انیشتین با ارائه فرمول های خود نیز توانست به این مدل اتمی کمک کند.

معادله شرودینگر

نگاه اجمالی

از مکانیک کلاسی می‌دانیم که در بررسی حرکت ذره ابتدا معادله حرکت آن ذره را پیدا می‌کنند و بر اساس آن در مورد چگونگی حرکت بحث می‌کنند. در حالت کلاسیک، بطور کلی این معادله با استفاده از لاگرانژین مربوط به حرکت ذره حاصل می‌گردد. همچنین می‌دانیم که در مکانیک کوانتومی، بر اساس نظریه دوبروی در مورد ذرات دو دیدگاه موجی و ذره‌ای در نظر گرفته می‌شود و اصل مکملی نور مانع از این می‌شود که این دو تصویر را به صورت همزمان بکار ببریم. ولی برای توصیف کامل حرکت، هر دو دیدگاه باید در نظر گرفته شوند. بر این اساس معادله‌ای که به حرکت این ذرات کوانتومی حاکم است، معادله شرودینگر نامیده می‌شود.

حرکت ذره آزاد

معمولا ساده‌ترین حالت در مکانیک کوانتومی حرکت یک ذره آزاد است. لفظ آزاد به این لحاظ بکار می‌رود که این ذره تحت تاثیر هیچ پتانسیلی قرار ندارد. در این صورت معادله شرودینگر در مورد حرکت ذره مورد نظر، با این فرض که حرکت در یک بعد صورت می‌گیرد، به صورت زیر خواهد بود:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

در رابطه فوق m جرم ذره ، \hbar ثابت پلانک ، $\psi(x,t)$ تابع موجی است که در تشریح دیدگاه موجی ، به ذره مورد نظر نسبت داده می شود. همچنین \hbar یک واحد موهومی است که مجذور آن برابر (-1) می باشد (عدد مختلط). در این رابطه نماد $\frac{\partial}{\partial t}$ بیانگر مشتق نسبی نسبت به زمان و $\frac{\partial}{\partial x}$ نشانگر مشتق نسبی نسبت به مکان است .

خصوصیات معادله شرودینگر

- معادله شرودینگر نسبت به مشتق زمان از مرتبه اول است. این امر ایجاب می کند که وقتی مقدار اولیه تابع موج منتسب به ذره ، به عنوان مثال در لحظه $t=0$ معلوم باشد، مقدار آن را در هر لحظه دیگر نیز بتوان پیدا کرد. این مطلب از شکل این معادله ، یا از شکل عمومی ترین جواب این معادله ، که یک رابطه انتگرالی است، مشهود است .

- نکته دیگر این است که در معادله شرودینگر هیچ عدم قطعیتی وجود ندارد. به بیان دیگر، همین که حالت اولیه تابع موج مشخص شد، در این صورت در هر زمان دیگری، آن تابع موج کاملاً مشخص می‌گردد. دلیل این مطلب در اینجاست که هیچ محدودیتی بر روی تابع موج حالت اولیه وجود ندارد.

چگالی احتمال

در حالت کلی تابع موج $\psi(x, t)$ یک تابع مختلط است و به خودی خود هیچ تعبیر فیزیکی ندارد، اما مربع قدر مطلق آن کمیت بسیار بااهمیتی است، که چگالی احتمال نام دارد. چگالی احتمال بیانگر احتمال وجود ذره است و در جایی که فرض می‌شود، ذره در آنجا باشد، مقدار آن بزرگتر است و در هر جای دیگر مقدار آن کوچکتر می‌باشد. چگالی احتمال که با $p(x, t)$ نمایش داده می‌شود، یک تابع حقیقی است و وابستگی زمانی آن بیانگر این مطلب است که با گذشت زمان برای پیدا کردن ذره در جایی که در لحظه اولیه قرار داشته، شانس کمتری وجود دارد.

معادله شرودینگر در حالت کلی

در مطالب قبلی معادله شرودینگر را در حالت ساده ذره آزاد و در مورد حرکت یک بعدی بیان کردیم. در صورتی که ذره مورد نظر آزاد نباشد، در این صورت تحت تاثیر پتانسیلی مانند قرار خواهد داشت که در حالت تک بعدی پتانسیل را با $V(x)$ و در حالت سه بعدی با $V(x, y, z)$ نشان می‌دهیم و چون بیشتر پتانسیل‌های مهم، تقارن کروی دارند، لذا بهتر است که بحث را در مختصات کروی انجام دهیم. در این صورت پتانسیل به صورت $V(r)$ خواهد بود. برای بیان معادله شرودینگر در حالت عمومی و در فضای سه بعدی، تغییرات زیر را در معادله شرودینگر ذره آزاد اعمال می‌کنیم:

- تابع موج مربوط به ذره را با $\psi(x, t)$ نمایش می‌دهیم.
- مشتق نسبت به مکان را در حالت سه بعدی با نماد ∇ که دل نامیده می‌شود، نشان می‌دهیم.
- چون ذره آزاد نبوده و تحت تاثیر پتانسیل $V(r)$ قرار دارد، لذا یک جمله به صورت $V(r)\psi(x, t)$ به معادله اضافه می‌کنیم. بنابراین معادله شرودینگر در حالت کلی به صورت زیر در می‌آید:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, t) + V(r)\psi(r, t)$$

کاربرد معادله شرودینگر

- با استفاده از حل معادله شرودینگر مشخصه‌های سیستم از قبیل ترازهای انرژی، اندازه حرکت خطی و اندازه حرکت زاویه‌ای سیستم مشخص می‌شود.
- از حل معادله شرودینگر تابع موج منتسب به هر سیستم فیزیکی بدست می‌آید. با استفاده از تابع موج می‌توان چگالی احتمال را محاسبه نموده و حرکت ذرات سیستم را مورد بررسی قرار داد.
- برای هر سیستم معادله شرودینگر مخصوصی وجود دارد که وابسته به هامیلتونی تعریف شده برای آن سیستم است.

انرژی یونش

انرژی لازم برای جدا کردن سست‌ترین الکترون از یک اتم منفرد گازی شکل و درحالت پایه یک عنصر را «انرژی اولین یونش» آن عنصر می‌نامند



نماد (g) نشان دهنده حالت گازی عنصر و یون مربوطه است.

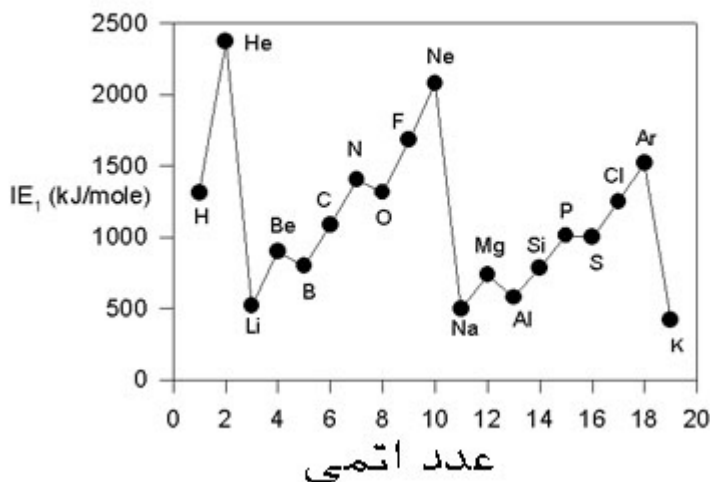
علامت انرژی‌های یونش

در تعیین انرژی‌های یونش عناصر برای بیرون کشیدن الکترون از اتم، انرژی مصرف می‌شود، زیرا این امر متضمن فائق آمدن بر جاذبه متقابل هسته و الکترون است. پس چون سیستم، در این فرآیند، انرژی جذب می‌کند، انرژی‌های یونش علامت مثبت دارند. مثلاً می‌توان انرژی اولین یونش سدیم را به صورت زیر نمایش داد:



$$= +496\text{Kj} :: \text{اولین یونش سدیم}$$

انرژی اولین یونش بر حسب عدد اتمی



واحد انرژی یونش

انرژی یونش برای هر الکترون منفرد بر حسب الکترون ولت (eV) و برای یک مول الکترون (6.02×10^{23} الکترون) که از یک مول اتم (6.02×10^{23} اتم) عنصر جدا شود، kJ/mol بیان می‌گردد.

ترتیب انرژی یونش در عناصر یک دوره

انرژی یونش در یک دوره از چپ به راست بتدریج افزایش می‌یابد. به آن قسمت‌هایی از منحنی که به عناصر دوره دوم (از Li تا Ne)، دوره سوم (از Na تا Ar) و الی آخر تعلق دارد. توجه کنید که انرژی یونش به این سبب

افزایش می‌یابد که آنها بتدریج کوچکتر می‌شوند و بار مؤثر هسته بتدریج افزایش می‌یابد، در نتیجه جدا کردن الکترون بتدریج دشوارتر می‌شود .

ترتیب انرژی یونش در عناصر یک گروه

در عناصر نماینده ، بطور کلی انرژی یونش بین عناصر یک گروه از بالا به پایین کاهش می‌یابد. عناصر گروه (Cs ، Rb ، K ، Na ، Li) و عناصر گروه صفر (Rn ، Xe ، Kr ، Ar ، Ne ، He) بصورت مینیمم و ماکسیمم منحنی نشان داده شده‌اند. در هر گروه بتدریج از اتمی به اتم پایینتر می‌رویم ، بار هسته ، افزایش می‌یابد، اما اثر آن تا حد زیادی از طریق افزایش تعداد الکترونها ی پوسته زیرین که اثر پوششی دارند، حذف می‌شود. در حالیکه آنها بزرگتر می‌شوند، الکترونی که باید یونیده شود، در فاصله‌ای دورتر از هسته قرار می‌گیرد، در نتیجه جدا شدن الکترون آسانتر شده ، انرژی یونش کاهش می‌یابد.

انرژی یونش عناصر واسطه در یک دوره به سرعت مشابه با عناصر نماینده افزایش پیدا نمی‌کند. انرژی یونش عناصر واسطه درونی ، کم و بیش ثابت می‌ماند . در این دو دسته عناصر ، الکترون متمایز کننده به پوسته‌های درونی اضافه می‌شود . افزایش اثر پوششی حاصل ، وضعیت انرژی یونش در

عناصر واسطه و واسطه درونی را توجیه می‌کند. اتم فلزات در واکنشهای شیمیایی معمولا الکترون از دست می‌دهند و به یونهای مثبت تبدیل می‌شوند. اتم غیرفلزات معمولا به این ترتیب عمل نمی‌کنند. بنابراین فلزات عناصری با انرژی یونش نسبتا کم و غیرفلزات عناصری با انرژی یونش نسبتا زیادند.

انرژی دومین یونش

بحثهای ما تاکنون مربوط به انرژی اولین یونش بوده است. انرژی دومین یونش هر عنصر انرژی لازم برای جدا کردن یک الکترون از یون $1+$ آن عنصر است.



انرژی سومین یونش

انرژی سومین یونش بیان کننده انرژی مورد نیاز برای جدا کردن یک الکترون از یون $2+$ آن عنصر است. جدا کردن یک الکترون منفی از اتم خنثی طبعا آسانتر از جدا کردن الکترون از ذره دارای یک بار مثبت و آن هم به نوبه خود آسانتر از جدا کردن الکترون از ذره دارای دو بار مثبت است. در نتیجه انرژی

سومین یونش بزرگتر از انرژی دومین یونش و آن هم بزرگتر از انرژی اولین یونش است .

انرژی چهارمین یونش و بالاتر

از آنجا که انرژی چهارمین یونش و بالاتر ، به غایت زیاد است، یونهای بالاتر از $3+$ بندرت در شرایط عادی وجود دارند. همانگونه که انتظار می رود برای هر عنصر انرژی یونش از اولین تا چهارمین زیاد می شود .

جهش

در تمام مراحل پس از جدا شدن الکترونهاي والانس ، افزایش انرژی مورد نیاز برای یونش بعدی بصورت جهشی است .

واکنش پذیری فلزات

واکنش پذیری فلزات در گوشه پایین سمت چپ جدول تناوبی دیده می شوند. واکنش پذیری ، بر حسب از دست دادن الکترون ، بتدریج که از این گوشه به طرف بالا یا به سمت راست حرکت می کنیم، کاهش می یابد .

