

الباب العاشر

التركيب الإلكتروني لذرات عديدة الإلكترون

The electronic structure of many- electron atoms

مقدمة :

كل المعالجات النظرية لعديد الإلكترونات مبنية علي عملية تقريب المجال المركزي. وفي هذا التقريب لقد فرض أن كل إلكترون يتحرك باستقلالية في مجال كروي ناشئ عن النواة. وقد افترضنا مفهوم في ذرة الهليوم وهو السلوك الزاوي لدالة موجة لواحد إلكترون مستقل ويكون مشابه لما في ذرة الإيدروجين فالرموز (m, l) إعداد كم يمكن أن تعين كل مدار لكل إلكترون والأنسب قيمة (n) تعين كل إلكترون وعلي أي حال الدورة الكيميائية للعناصر تتضمن أن (n) تعتبر تقريب جيد لعدد الكم .

والتقنية المستخدمة الشائعة للحسابات الكلية علي ذرات عديدة الإلكترون حيث يفترض اختيار توزيع للإلكترونات وتم حل معادلات الحركة لإلكترون واحد علي الجهد من التوزيع المفترض للآخرين. والتوزيع لهذا اللإلكترون سيكون إذا يتضمن في المجال التقريبي حيث يوجد إلكترون آخر محسوب في هذا المجال والعملية هنا مستمرة حتى يتم حساب التوزيع لكل الإلكترونات.

هذا الاحتمال يعتبر الأفضل عن التوزيع المفترض في المقدمة وتعاد العملية مرة أخرى لو التوزيع الثاني المحسوب ليس مطابقا مع الحساب الأول للحصول علي الدقة المطلوبة. هذه الطريقة تعرف بعملية المجال الذاتي المتناسك (S.C.F) self – consistent field . وقد استخدم هارترلي تكامل لإعداد صحيحة مباشرة. ومعظم الإجراءات المستخدمة مستخدمة دالة موجية منتظمة مثل الارتباط الخطي لبعض الدوال الأساسية المناسبة.

والعملية المعادة تستخدم مصفوفة جبرية بسيطة نسبياً. وابتكر هارترى تعبيراً ثم حسنه مرة أخرى في عام ١٩٣٠ بواسطة فوك خاصة للتغير الداخلي المنتظم للالكترونات واستخدم إجراءات S.C.F تقريباً ما تعرف إلى طريقة هارترى - فوك .

مبدأ باولي ومبدأ اوف بايو

في ١٩٢٦ اقترح باولي مبدأ عدم التأكد لكي يفسر الدورانية للعناصر. وقد اقترح أن كل إلكترون في الذرات العديدة الالكترونات يجب أن تأخذ أربعة من أعداد الكم إضافة لذلك. لا يوجد لاثنين أو أكثر من الالكترونات متكافئة في الذرية حيث في المجال القوي تطابق في كل إعداد الكم k_1, m, n_2, k_2 وهذا يتضمن عدد كم إضافي ليس موجوداً في حل مسألة الإيدروجين.

هذا الأخير الإضافي لعدد الكم والذي عينه بواسطة دبراك 1933 - عدد الكم المغزلي (أو عزم زاوي حقيقي) والآن نريد تعيين أعداد الكم وهي n, l, m and m ولكي نري حلاً علاقة مبدأ باولي للنظام المشوش للإلكترونات ونبرهن أن يحقق إعداد الكم الأربع إيجاد إحتلال المدار (التركيب الفراغي) لذرات عديدة الإلكترون .

ولمعظم المدارات المعلومة، المدار الممتلئ في الذرة المعتدلة يمكن يستدل بواسطة طبقة المدارات لزيادة $(n + l)$ مع تلك القيم الأقل للعدد (n) فالأعداد المناسبة للالكترونات المعلومة في كل مدار أو مستوي مع كل (2) في كل مستوي حتى كل الالكترونات تمتلئ المستوي. هذه الطريقة الشائعة تعرف مبدأ اوف بايو .

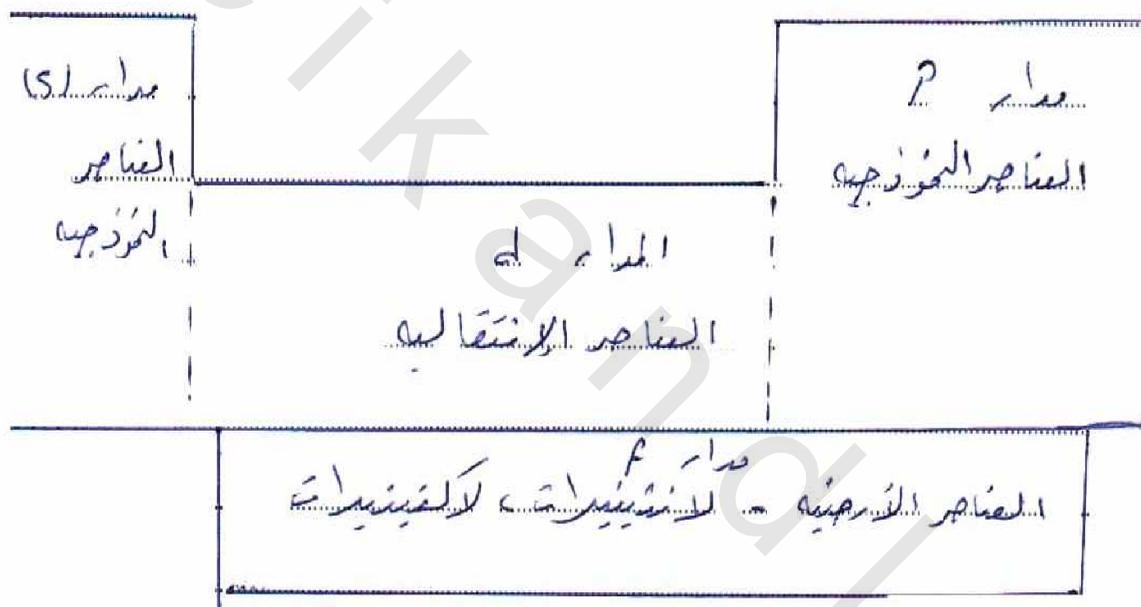
جدول (1) بناء المدارات الذرية للمستوي (n+ 1) وكذلك (n)

n+1	المدارات			
1	1S			
2	2S			
3	1P	5S		
4	3S	4S		
5	3d	4P	5S	
6	4d	5P	6S	
7	4f	5d	6P	7S
8	5f	6d	7P	8S

جدول (1) يبين بناء المستوي (n+1) للقيمة ٨. هذا يعتبر كاف لكل العناصر المعلومة. كل مستوي (S) يحتل ٢ إلكترون وكل (P) بست إلكترونات وكل d-10، f-14 مثال عنصر له العدد ٣٠ (زنك) له التركيب الفراغي علي هذا النحو $1S, 2S, 2P, 3S, 3P, 4S^2, 3d^{10}$ ويمكن الاختصار علي الصورة $[Ar]. [4S^2] [3d^{10}]$ تعني غاز الارجون الخامل وتفيد مدارات التكافؤ المثبتة، ما عدا حدوث طبقة الطبقة المتبأ لبعض العناصر الانتقالية لعناصر اللاكتينيدات واللانثينيدات. بعض الاستثناءات يمكن تفسيرها من قاعدة إضافية. عند امتلاء كامل أو نصف امتلاء للمستوي d، فيمكن امتلاؤه بواسطة انتقال بواحد إلكترون من المدار (S) الأقل التالي (n + 1) مثال الكروم له الشكل الفراغي $[Ar]. 4S^1 3d^5$ والنحاس -29 ليأخذ التركيب الالكتروني $[Ar]. 4S^1 3d^{10}$ وهذا يعطي الفراغ الصحيح المولبيديوم (Mo) (وليس للتجستين - W) والفضة والذهب.

وتبين الدورية الكيميائية للعناصر في التركيب الالكتروني لها. فالعناصر في المكان للجدول الدوري تأخذ نفس الأعداد. ومن تركيب التكافؤ المصاحب قيمة. ولو أن قاعدة $(n + 1)$ طبقت علي مثال كل الغازات الميثالية ما عدا الهيليوم فالتركيب هو nS^2, nP^6 . وكل عناصر مجموعة الأكسوجين تأخذ التركيب $nS^2 nP^6$ ومجموعة عناصر القلوويات تأخذ الشكل التركيبي nS^1 وهكذا...

وفي الحقيقة وفي تصحيح الجدول الدوري الحديث بعكس قيمة l لأقل إلكترون موضوع بواسطة مبدأ أوف بايو شكل (1).



شكل (1) رسم تخطيطي للجدول الدوري

المجموعة المتماثلة The symmetric group

لإيجاد حالات التماثل لتركيبه نظام عديد الإلكترون لا بد من معرفه التركيب التام لنظام تلك المجموعة. منها التماثل الحقيقي للعزم للجسيمات المستقلة والتماثل للجسيمات المتشابهة والمجموعة أحادية الصورة - الواحدة $SU(N)$ من حيث أن n هي $(2S+1)$ - غزل الإلكترون - هي المستخدمة لوصف كمية التحرك الزاوية للجسيم.

لنفترض التركيب المستقر لذرة الكربون وهو $1S^2 2S^2 2P^2$ حيث نلاحظ أن المدارين S كاملا الاحتلال وبالتالي يعرفا بأنهما مدارين مغلقين وأما المدار $2P$ والذي من المفروض أن يتحمل 6 إلكترونات يحتوي فقط علي اثنين من الإلكترونات ويعرف بأنه مدار جزئيا ممتلئ والآن لتحديد العزم الزاوي للإلكترونين هذا يقابل حاصل ضرب اثنين من $D^{1/2}$.

$$D^{1/2} \times D^{1/2} = D^0 + D^1 \quad (1-1)$$

وبالتالي يكون ناتج الغزل الكلي صفر، وواحد، D^0 لمجموع كلي قيمة (S) صفر، لتقابل حالة مفردة لا منحلة، D^1 لنوع S بواحد لتطابق حالة ثلاثية منحلة "triplete". وأما العزم الزاوي المداري الإجمالي يأخذ الشكل :

$$D^1 \times D^1 = D^0 + D^1 + D^2 \quad (1-2)$$

وبالنسبة للمدار P بقيمة واحد، بحيث يأخذ قيمة المجموع L بصفر ليكون الحالة S ويكون بالقيمة واحد للمدار P. ومع الحالة 2 للمدار D وهكذا البناء.

المجموعات المتماثلة :

لإيجاد سماحية حالات باولي للأنظمة العامة فإننا نحتاج إستخدام ترتيب المجموعة المتماثلة (المجموعة المتماثلة) فالمجموعة المتماثلة $S(N)$ للدرجة (N) تعتبر المجموعة التي لها مثل عاملها كل التباديلات الممكنة للمواضيع (N).

مثال: لو كان لدينا موضعين (1, 2) فالمجموعة في هذه الحالة $S(2)$

تتألف من تماثل العملية إذا التغيير الداخلي ويمكن كتابة النتيجة :

$$\begin{array}{c|c|c|c} 1 & 2 & \xrightarrow{E} & 1 & 2 \\ \hline & & \xrightarrow{F} & 2 & 1 \end{array} \quad (1-3)$$

وهنا المجموعة يكون لها فقط اثنين من العمليات. وفي هذه الحالة يمكن أن تطلق عليها اثنين للرتبة وأما بالنسبة لثلاث مواضع تأخذ الشكل :

$$| 1 \ 2 \ 3 \xrightarrow{E} | 1 \ 2 \ 3; \quad R_1 \quad | \cancel{3} \cancel{2} \xrightarrow{R_2} | 2 \ 3 \ 1; \\ \xrightarrow{R_3} | 1 \ 3 \ 2; \quad R_4 \quad | \cancel{2} \cancel{3} \xrightarrow{R_5} | 3 \ 2 \ 1; \quad (10-4)$$

لذا فإن $S(N)$ تأخذ الرتبة (6) و $S(4)$ لتأخذ الرتبة 24 وهكذا

لاحظ أن $N \neq 1 \ 2 \dots (N-1) \times N$ تساوي المحددة $\prod_{i=1}^N (i)$.

فالمجموعة التماثلة تأخذ أعداد نهائية بالتباين لمجاميع الدوران والتي

تأخذ أعداد لا نهائية لعمليات مختلفة دقيقة انظر الجدول (2).

جدول (2) خصائص $S(4), S(3), S(2)$

Y.D.	$S(2)$	(1^2)	(2)			
	[2]	1	1			
	[1^2]	1	-1			
Y.D.	$S(3)$	(1^3)	$3(2, 1)$	$2(3)$		
	[3]	1	1	1		
	[2, 1]	2	0	-1		
	[1^3]	1	-1	1		
Y.D.	$S(4)$	(1^4)	$6(2, 1^2)$	$3(2^2)$	$8(3, 1)$	$6(4)$
	[4]	1	1	1	1	1
	[3, 1]	3	-1	-1	0	1
	[2^2]	2	0	2	-1	0
	[2, 1^2]	3	1	-1	0	-1
	[1^4]	1	-1	1	1	-1

انظر إلى الجدول (2) نلاحظ أن مثلاً عند (4) الأجزاء الممكنة هي (4), (3,1), (2,2), (2,1,1), (1,1,1,1) وبالاختصار , (3, 1), (1⁴), (4), (2, 1²), (2²) وهكذا فالأرقام المستقلة تعرف بالأطوال وهذه العملية (تخطيط يونج Young diagram) ويعرف المقارن بالآخر مثل (3, 1), (2, 1²) بينما التمثيل (2²) يعرف التقارن الذاتي أو التزاوج الذاتي وهذا التصور لتمثيل القران. المهم في تركيب حالات باولي المخصصة للأنظمة العديدة الإلكترون .

حالات باولي المسموحة :

للشرح: نعتبر حالة لأربع إلكترونات متكافئة فالتمثيل المسموح المتبادل هو [4], [3,1], [2²] نعين العدد إلى القوالب في مخطط يونج لنحصل على النتيجة التالية :

$$4i \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline \end{array} \quad (10-5)$$

$$\sum m_i = 4 \times \frac{1}{2} = 2$$

$$S = 2$$

$$[3,1] \begin{array}{|c|c|c|} \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline \frac{1}{2} & & \\ \hline \end{array} \quad (10-6)$$

$$\sum m_i = 3 \times \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 1$$

$$S = 1$$

$$[2^2] \begin{array}{|c|c|} \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \hline \end{array} \quad (10-7)$$

$$\sum_{S=0} m_j = 2 \times \frac{1}{2} - 2 \times \frac{1}{2} = 0$$

فلو أن التمثيل خلال (3) R لحالات تلك الغازات هو المطلوب ببساطة هي تكون D^S ومن ناتج المعادلة (10-5) وحتى (10-7) نجد إننا نحوز D^S واحدة، وثلاثة D^1 واثنين D^0 وهذا يكون نفس الشيء ويتم إيجادها لو أن إننا حصلنا الأربع $D^{1/2}S$.

وأي تجزئته للعدد N يتبعه أي نظام طبقي $S(N)$ فيكون التعبير عنه علي النحو التالي :

$$\lambda \Rightarrow (b_1, b_2, \dots, N^{bbN}), \quad (10-8)$$

حيث $-b_1$ عدد الحلقات للطول الأول ، $-2b_2$ عدد الحلقات للطول الثاني وهكذا. حقيقة فأي تجزئة للحد (b_1) سوف يساوي الصفر ويمكن العمل علي أي نظام طبقي لمجموعة خاصة، يمكن تمثيل $[\lambda]$ للمجموعة المتماثلة $S(N)$ وذلك بأخذ الهيئة الآتية :

$$Xr(R);[\lambda] = \frac{1}{N!} \sum_{C_p \in S(N)} h_{C_p} X(P)_{(\lambda)} \prod_{i=1}^N [XR]^i \quad (10-9)$$

حيث $X_r(R)$ ، $[\lambda]$ عبارة عن صفة للعملية (R) في الممثلة للمجموعة الخاصة بعد ملائمتها لتمثيل $[\lambda]$ للحد $S(N)$ ، $-N$ عدد للحد $S(N)$ ، $(N! - \text{رتبته})$ والمجموع عبارة عن العدد الكلي للطبقات (C_p) للحد $S(N)$ ، $-h_{C_p}$ رتبه طبقة النظام C_p للحد $S(N)$ ، $X(P)_{(\lambda)}$ - عبارة

عن خاصية للسماحية P (خلال النظام C_p) لتمثيل (λ) للحد $S(N)$.
والناتج علي طول الحلقات (i) لتجزئة النظام (λ) انظر المعادلة (10-8)
 R - هي عملية R للمجموعة الخاصة مرفوعة للأس ith كمثال:
 $C^2(\phi)$ مساوية $C(2\phi)$ ، $- [X(R)]^{hi}$ تشير أن الناتج صفة مرفوعة
للقوة $bith$.

والمعادلة (10-9) يلاحظ إنها معقدة الوصف عند عملية التطبيق.
لتفسير استخدامها من جدول (10-2) تعتبر أول ملائمة إلي (2) فإننا
نحوز التماثل $R(3)$.

$$XD[E];[2] = \frac{1}{2} \{ 1 \times [X(E)]^2 + 1 \times [X(E^2)] \}$$

$$= \frac{1}{2 \times 1} \times 12 = 6 \quad (10-10)$$

وبالنسبة $C(\phi)$ للحد $R(3)$ نحصل علي :

$$XD[C(\phi)];[2] = \frac{1}{2} \{ 1 \times [C(\phi)]^2 + 1 \times [X[C^2(\phi)]] \}$$

$$= \frac{1}{2} [1 \times (1 + 2\cos\phi) + 1 \times (1 + 2\cos 2\phi)]$$

$$= \frac{1}{2} (1 + 4\cos^2\phi + 1 + 2\cos 2\phi)$$

$$= 2 + 2\cos\phi + 2\cos 2\phi \quad (11-)$$

وناتج التمثيل الاختزالي :

$R(3)$	E	$C(\phi)$	
Γ	6	$2\cos\phi + 2\cos 2\phi$	(10-12)

$$D^S \times D^L = D^1 \times D^1 \\ = D^0 \times D^1 + D^2 \quad (10-15)$$

بالنسبة للقيمة l بصفر واحد واثنين أو الرموز ${}^3P_0, {}^3P_2, {}^3P_1$ للحالة الأحادية أو التمثيل المغزلي هو D^0 المجموع الكلي وبالتالي l ستساوي L ، لتعطي الرموز ${}^1D_2, {}^1S_0$ ومجموعة الحالات الناتجة من التركيب الالكتروني سوف تكون مماثلة. إما بما يعرف l المزدوجة أو إزدواج روسيل - ساوندرز Russell - Saunderson أو S, L وعلي أي حال L, S لا معني في إزدواج l ولنعتبر الشكل P^2 مرة أخرى حيث القيمة l تكون $\frac{1}{2}$ أو $\frac{3}{2}$.

$$D^{1/2} \times D^1 = D^{1/2} \times D^{3/2} \quad (10-16)$$

قارن قيم l المكافئة للقيمة $(\frac{1}{2})$ للالكترونين، لنحصل علي :

$$D^{1/2} \times D^{1/2} = D^0 \times D^1 \quad (10-17)$$

ولكن D^0 هو فقط اللامنتظم وهذا يعطي قيمة صفر l ثم زوج القيم المكافئة l لتعطي $\frac{3}{2}$.

$$D^{3/2} \times D^{3/2} = D^0 \times D^1 + D^2 + D^3 \quad (10-18)$$

والرموز D^2, D^0 اللامنتظم وهذا يعطي l قيمة صفر واثنين وأخيرا قيمة اللاتكافؤ l ويمكن تزاوجها

$$D^{1/2} \times D^{3/2} = D^1 + D^2 \quad (10-19)$$

إزدواجية روسيل - ساوندرز للنتروجين والبروتكتيوم :

مثال : ولنأخذ التركيب الالكتروني للنتروجين في الحالة الأرضية علي النحو $1S^2, 2S^2, 2P^3 - N$ لتطبيق إزدواجية روسيل - ساوندرز لإيجاد حالات الانتقال لباولي وهنا نجد ثلاث الكترونات في المدار P

المفتوح والمجموعة إذا المناسبة هي $S(3)$ بالنظر إلى جدول (2) للحد $S(3)$ نجد أن الغزل المسموح الممثل هو $[3]$, $[2,1]$ وهذا يقابل إلى قيم S

للقيم $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ علي التوالي وتكون رباعية وازدواجية لحالات غزل :
وملائمة التعيين ولطابقة $[1^3]$ لنحصل :

$$X_{Di}(E); [1^3] = \frac{1}{3} \{ 1 \times [X(E)]^3 - 3 \times (-1) \times [X(E^2)] \\ [X(E)] + 2 \times [X(E^3)] \} \\ = \frac{1}{6} [27 - (3 \times 3 \times 3) + (2 \times 3)] \\ = 1$$

ولإيجاد $X[C(\phi)]$ لنحصل علي :

$$X_{Di}[C(\phi)]; [1^3] = \frac{1}{3} \{ (1 \times [X[C(\phi)]]^3 - 3 \times (-1) \times [X[C^2(\phi)]] \times [X[C(\phi)]] \\ - 2 \times [X[C^3(\phi)]] \} \\ = \frac{1}{6} [(7 + 12\cos\phi - 6\cos 2\phi + 2\cos 3\phi) \\ - 3(1 + 4\cos\phi + 2\cos 2\phi + 2\cos 3\phi) \\ + 2(1 + 2\cos 3\phi)] = 1 \quad (21)$$

(المعادلة (21) استخدمت مطابقة ثلاثية trigonometric للحصول

لبساطة إيجاد النواتج للسلوك تحت الدوران) ونملك للحالة الرباعية فقط

الجزء الوحيد $S_{3/2}^4$.

وملائمة D^1 إلى $[2,1]$ للحصول علي الأجزاء المسموحة للحالة

المزدوجة وللتطبيق نحصل :

$$X_{Di}(E)[2,1] = \frac{1}{3} (1 \times [X(E)]^3 - 3 \times 0 \times [X(E^2)] [X(E)] - 2 \times 1 \times [X(E^3)])$$

$$\frac{1}{6} (54+0-6)=8 \quad (10-22)$$

وبالنسبة لـ $C(\phi)$:

$$\begin{aligned} X_{D^1} [C(\phi)] [21] &= \frac{1}{3} (1 \times 2 \times \{X[C(\phi)]\}^3 - 3 \times 0 \times \{X[C^2(\phi)]\} \{X[C(\phi)]\} \\ &= 2 \times 1 \times \{X[C^2(\phi)]\} \\ &= \frac{1}{6} [(14 - 2 \cos \phi + 12 \cos 3\phi + 4 \cos 3\phi + 0 - (2 + 4 \cos 3\phi)) \\ &= 2 + 4 \cos \phi + 2 \cos 2\phi \end{aligned}$$

$R(3)$	E	$C(\phi)$
Γ	6	$2 + 4 \cos \phi + 2 \cos 2\phi$

وهذا يختزل إلى $D^1 + D^2$ وهنا الآن يمكن ازدواج حالات P ، D ، وبازدواجية $S \& L$ لإيجاد نجد أن حالات P .

$$D^{1/2} \times D^1 = D^{1/2} \times D^{5/2} \quad (10-25)$$

لحالة D

$$D^{1/2} \times D^2 = D^{3/2} + D^{5/2} \quad (10-26)$$

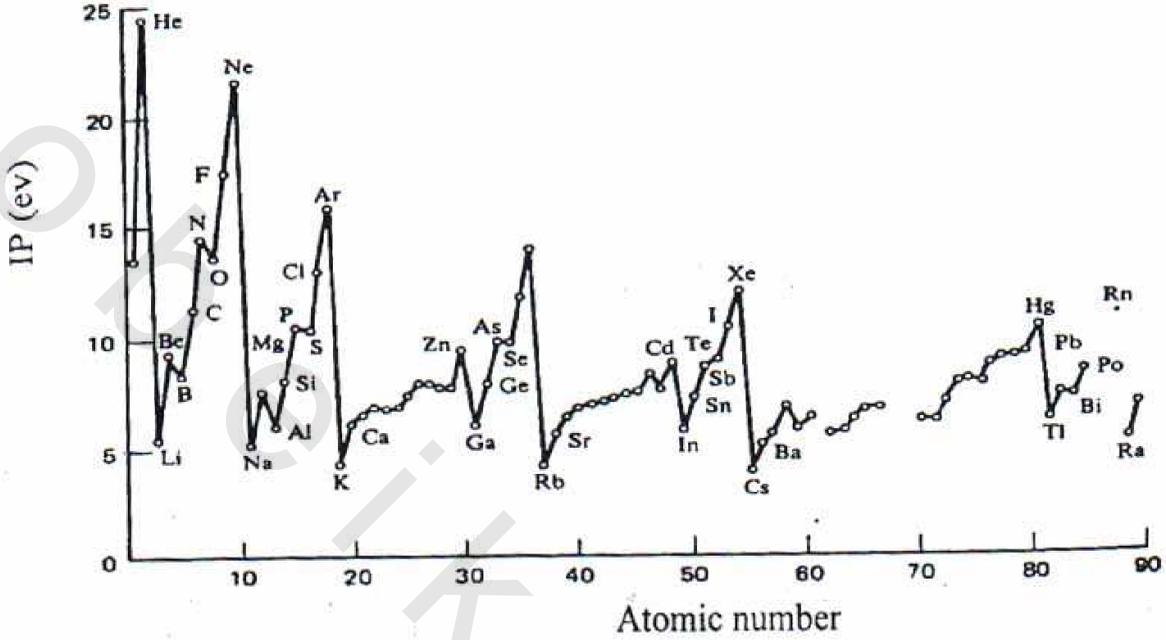
طاقة التأين والميل الاليكتروني :

ما هو المقصود بطاقة التأين وهو الذي عرف بجهد التأين ويعرف بأنه كمية الطاقة اللازمة لنزع إلكترون من مداره الأكثر خارجي من ذرة في حالتها المستقرة. وهنا نريد أن نحدد نوع وقوة الروابط الكيميائية وتعرف بـ IP بأنها طاقة التغير.



وهذا بالاحري لو أن الذرة امتصت كمية من الطاقة يرمز لها بإشارة موجبة والعكس لو أن النظام فقد كمية من الطاقة فتكون الإشارة سالبة. وتعين الطاقة بطريقة التحليل الطيفي وتقاس بالجهد الاليكتروني وتوجد عدة عوامل يعتمد عليها جهد التأين وهي نصف قطر الذرة

والشحنة النووية والتركييب الالكتروني وجهد التآين التتابعي انظر الشكل (2).

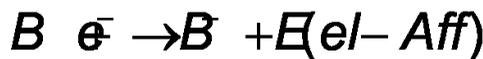


شكل (2) ثابت جهد التآين للعناصر مقابل العدد الذري

ويبين الشكل (2) تغير IP مع العدد الذري Z. فنجد مثلا العناصر Ar, Ne أو K, Li, Na والذي تقول عنه بالعناصر المتماثلة نجد أن قيمه الطاقة لها متقاربة فمثلا $IP_{Ne} = 21.6 \text{ eV}$ ولكن $P_{Ar} = 15.8$ وفي الصوديوم $IP_{Na} = 5.1 \text{ eV}$ في $L_7 = 54 \text{ eV}$ بالنظر إلى النقص الطفيف في قيمة IP نلاحظ خاصية أهمية في عملية تكوين الروابط، وبأخذ التعبير علي هذا النحو :

$$1P = \frac{1}{2n^2} Z^2 H^+ \quad (27-0)$$

Z - هنا الشحنة المؤثرة وهي للوحدات e.v (إلكترون فولت لهاتري $H = 27.2 \text{ eV}$). وأما الميل الالكتروني electron affinity لعنصر عبارة عن الطاقة اللازمة عند إضافة إلكترون إلى ذرة معزولة في حالتها الثابتة. والطاقة المنطلقة (المتحررة) تأخذ إشارة سالبة ويتكون الايون السالب أي أن :



وعموما بان IP ليست EA فالعناصر التي لها تركيب ثابت من الصعب اكتسابها إلكترون ومن الملاحظ أن EA تزداد بزيادة العدد الذري فمثلا للكلور 3.4 eV وهذا يبين أن قيمة الميل الإلكتروني الكبيرة ميل العنصر لاكتساب الإلكترون. يلاحظ بعض الشذوذ عن هذه القاعدة بان العدد الذري له تأثير علي قيمة الميل، فنجد الفلور $F=3.4 \text{ eV}$ واليود $I=3.1 \text{ eV}$ بينما الكلور $Cl=3.6 \text{ eV}$ وهذه قيمة غير متوقعة في حالة الكلور .

ولقد افترض كوويمان نظرية وهي أن طاقة الأفلاك الذرية تعبر إلي حد ما عن طاقة التأين علي النحو :

$$(IP)_i = \text{Zero} - (E\phi_i) = -E\phi_i \quad (٢٨-١٠)$$

وهذا يعني أن عملية تخلص الإلكترون من الفلك الخارجي ϕ لا يؤثر علي بقية الإلكترونات الاخرى حيث أن كل إلكترون له كمية طاقة لازمة للنزع، وهذا ما سبق (طاقة الأول اقل من الثاني والثاني اقل من الثالث وهكذا...) إذا كل إلكترون له طاقة محددة.

نصف القطر الذري :

إذا تكلمنا عن القطر ونصف القطر فانه يلزم معرفه الحجم الذرية، فالحجوم الذرية بالنسبة للفلزات القلوية تأخذ نهايات عظمي ويقل الحجم تدريجيا كلما اتجهنا داخل الذرة ثم يبدأ في نهاية عظمي مرة أخرى عند العمود الأول للعناصر القلوية .

ويلاحظ أيضا معامل التمدد والتوصيل الحراري معتمدان علي دورية الأوزان الذرية وأما بالنسبة لأنصاف أقطار الانوية، يقل نصف القطر للذرات كلما زادت الشحنة علي الأيون. فمثلا الحديد 12 \AA ، الحديدوز 0.80 \AA والحديدك 0.63 \AA للأيونات الموجبة .

وأما الأيونات السالبة فمثلا أيون الكبريت الثنائي 1.73 \AA والسداسي 134 \AA بينما ذرة الكبريت 1.9 \AA . وبالنسبة للعناصر التي تأخذ دورة مائلة للداخل وكأنها شبيهة بالسلم يلاحظ التساوي في نصف القطر كما في عنصر الليثيوم والمغنسيوم والسكانديوم علي التوالي 0.78 \AA ، 0.78 \AA ، 0.78 \AA .

كذلك يقل نصف قطر العنصر في الدورة الواحدة مع إضافة الكترونات جديدة. وعموما لكل تلك الظروف نجد أن قطر الذرة يتوقف علي الطريقة التي يتم بها التعيين. وقد أمكن وضع تعبير رياضي لحساب نصف قطر الذرة علي النحو :

$$r_{AR} = \frac{n_2}{r}$$

وعموما عملية القياس تعبير مجازي حيث هو تقريبا من الكثافة الالكترونية علي المدار إلي مركز الذرة. لذا فان منحنيات توزيع الكثافة الالكترونية المحتملة لذرة مثلا الإيدروجين ابسط الذرات علي الانطلاق نجدها عند أبعاد معينة من النواة :

والكثافة الكلية الاحتمالية الالكترونية ما هي إلا مجموع جبيري لاحتمالية وجود الإلكترون في نقطة معينة في الأفلاك الفراغية لناخذ المعادلة الآتية :

$$\psi_{(1 \rightarrow 18)} = \frac{1}{\sqrt{18}} \left| \begin{matrix} S(1) & S(2) & \dots & P(17) & P(18) \end{matrix} \right| \quad (10-29)$$

مثلا لذرة الأرجون :

ولإيجاد طاقة الادني بطريقة التغير علي هذا النحو :

$$E = \left\langle \psi_{(1 \rightarrow 18)} \left| \hat{H} \right| \psi_{(1 \rightarrow 18)} \right\rangle \quad (10-30)$$

وعليه تركيب الأغلفة فانه ينبع طريقة هوند أو لتركيب بوهر معتمدا علي طاقة الإلكترون في الأغلفة الرئيسية والفرعية معا. ثم توجد طريقة وهي بنظام الهرم المقلوب لتبين قيمة الطاقة لأي علاف أيهما اقرب أو اقل في قيمة الطاقة .

شكل (3) يبين الكثافة الاحتمالية لوجود الإلكترون في المدار

كذلك يلاحظ من العناصر أن العناصر في آخر عمود الثمانية وهو ما يمثل العناصر النبيلة، نجد أن الغلاف الأخير الممتلئ يحدد أساسا الحجم الذري. ومن ناحية أخرى بالنسبة للغلاف الخارجي للذرات العديدة الالكترونات يلاحظ وجود منحنيات ليست حادة ولا يعطي قمة حادة مما يلاحظ وجود تداخل بين الأغلفة أو المدارات أيضا مؤثر الطاقة له تدخل في الكثافة الالكترونية وبكتابة الهاميلتونيان لذرة ما عبارة عن الشكل الآتي:

$$\hat{H} = \hat{H}^{\circ} + \hat{H}_{rep} + \hat{H}_{SO} \quad (10-31)$$

\hat{H}° - مجموع مؤثرات الطاقة المشابهة لإلكترون ذرة الإيدروجين

وهو:

$$\hat{H}^{\circ} = \sum_i \left(\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) \quad (10-32)$$

\hat{H}_{rep} - حد التنافر repulsim

$$\hat{H}_{rep} = \sum_i \sum_j \frac{1}{r_{ij}} \quad (10-33)$$

والحد الأخي Spin- orientation

$$H_{SO} = \sum_i \hat{L}_i \hat{S}_i \quad (10-34)$$

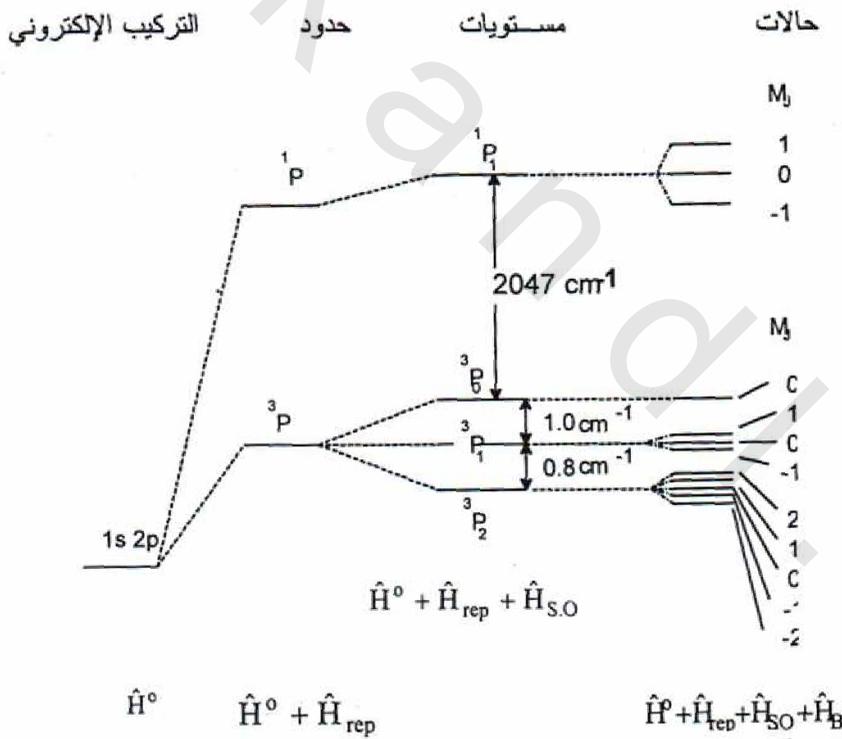
التأثير المتبادل بين الدورانية والمغزلية :

هذا بالنسبة للقياس في الوسط العادي بدون مؤثرات خارجية ولكن إذا قيست في مجالات أخرى ولكن تحت تأثير مجال مغناطيسي

magnetic field (Zemann effect) فيمكن التعبير الآن علي الصورة :

$$\hat{H}_B = -\hat{U} \cdot B = -(\bar{U}_L + \hat{U}_S)B \quad (10-35)$$

حيث B - المجال المغناطيسي المؤثر U_S , U_L - العزوم المغناطيسية للحركية الدورانية والمغزلية .



شكل (4) تأثير المجال المغناطيسي علي التركيب الإلكتروني لذرة (He)

إضافة لكل تلك المؤثرات والتي تبين الدقة واللادقة في عملية القياس للأقطار مثلا عدد الكم الزاوي الكلي (J) حيث لكل مستوي عدد (2J + 1) وكل حالة من الحالات له قيمة مميزة ومختلفة عن الاخرى.

فما معني طاقة الأفلاك الفيزيائي :

درس كوديمان طاقة الأفلاك الفيزيائي ϕ_i المتولدة في مجال تناسقي ذاتي واوجد العلاقة بين طاقة الايونات وطاقة الذرة المتعادلة الآتية :

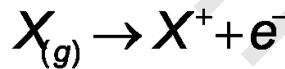
$$E[X^+] = E[X] - \xi_k \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (10-36)$$

$$E[X] = E[X] - \xi_m, \quad m = N+1, N+2 \quad (10-36)$$

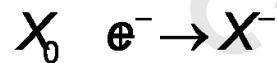
حيث X^- ذرة متعادلة، X^+ ايونات موجبة X^- ايونات سالبة .

حيث $-K$ مدار يعبر عن الحالة المستقرة للذرة المتعادلة .

$-m$ أفلاك غير ممتلئة - يلاحظ وجود علاقة بينهما بين k, m طاقة التأين وطاقة المدارات. وكما ذكرنا بان طاقة التأين الأولي تعتبر أدنى كمية من الطاقة لحدوث تغيير في المدار .



$X_{(g)}$ ذرة في الحالة المستقرة، X^+ ذرة في حالة التأين. وأما بالنسبة للميل الاليكتروني هو إكتساب الكتروني من ذرة في الحالة المستقرة لتصبح في حالة أخرى من حالات الطاقة وليكتمل المدار الخارجي لها .



X_0 ذرة في الحالة المستقرة، X^- ذرة حامله لشحنة الكترونية سالبة لتصل إلي الحالة الثمانية .

مثال: احسب نسبة الحيود في نظرية لفرض كويمان المثوية في طاقة التأين الأولي والثانية لليثيوم إذا علمت أن :

$$- \text{طاقة التأين الأولي} = 5.39 \text{ eV}$$

ب- طاقة هارترى - فوك = $-7.43 H$

ج- طاقة $1S$ = $-2.478H$

د- طاقة $2S$ = $-0.1963H$

ومن الدراسة الطيفية انبعث أشعة لها طول موجي 22.6 nm .

الحل

الطول الموجي باستخدام علاقة دي بروجلي :

$$\frac{hc}{\lambda} = E_{2s} - E_{1s} \quad (37-10)$$

وعليه فان طاقة المدار $1S$ علي النحو :

$$E_{1s} = E_{2s} - \frac{hc}{\lambda} = \quad (38-10)$$

حيث h - ثابت بلانك ، c - سرعة الضوء ، λ - الطول الموجي إذا

بالاستبدال :

$$E_{1s} = -529 - \frac{(6626 \times 10^{27} \times 3 \times 10^8)}{226 \times 10^9} \frac{1}{1602 \times 10^{-12}}$$

$$1602 \text{ ev} = 1602 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

$$= -529 \text{ ev} - 60193 \text{ ev}$$

إذا علم بان طاقة التأين الإيدروجين $(H) = 27.2 \text{ ev}$

وبالتالي طاقة التأين الأول E_1 ، E_2 علي التوالي هي :

$$E_1 = 674016 , E_2 = -534 \text{ ev}$$

$$-2478272 \text{ \& } = -0.1963272$$

وتكون النسبة المئوية في الحيود هي :

$$E_1 = \frac{539 - 534}{5.39} \times 100 = 0.1\%$$

$$E_2 = \frac{67404 - 60193}{60193} \times 100 = 119758\%$$

وبعد أن تقدمنا بتفصيل عن التركيب الذري لذرة عديدة الالكترونات فما يتبقى منا في هذا الجزء هو كيفية توزيع الالكترونات بطريقة أخرى وكيفية حساب الطاقة لها ولنأخذ بعض الأمثلة وهما ذرتي الهليوم والليثيوم والطرق المشهورة التي تناولت تلك المواضيع وهي طريقة المصفوفات وأولها طريقة سلاتر .

طريقة سلاتر – دالة الموجه : (الذرة اليهليوم الأرضية)

إذا علم أن دالة الموجه للحالة المستقرة لذرة اليهليوم علي النحو :

$$\psi_{1,2} = \sqrt{\frac{1}{2}} [1S(1)1S(1) \{ \alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1) \}] \quad (10-38)$$

دالة موجه مقبولة محققه لشطين وهما أنها غير متماثلة لتبديل إحداثيات الالكترونين 1, 2, ثانيا تعبر عن تطابق الالكترونين في الفراغ والغزل، وهذا يعني أيضا أنها لا تعطي فرصة بتساوي أعداد الكم الأربع .

ومصفوفة سلاتر لدالة الموجه عن ذرة اليهليوم بالصورة الآتية :

$$\psi_{1,2} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} 1S(1)\alpha(1) & 1S(1)\beta(1) \\ 1S(2)\alpha(2) & 1S(2)\beta(2) \end{vmatrix} \quad (10-39)$$

وبمفكوك المصفوفة نحصل علي هذه الصورة :

$$= \sqrt{\frac{1}{2}} \{ [1S(1)1S(1) \{ \alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1) \}] \}$$

يلاحظ بعد مفكوك المعادلة (2) لنحصل مرة أخرى علي المعادلة (1): ومن شروط المصفوفات لعلماء الرياضه أن تحقق عدة شروط أساسية وهي :

أ- إذا كان صفان أو عمودان في مصفوفة مربعة A متساويان فان المصفوفة لهما مساوية صفرا وبمعني أنه إذا كان العمودان متساويان فالمصفوفة بصفر .

ب- ثانيا إذا كان كل عنصر في صف أو عمود في مصفوفة مربعة تساوي صفر .

ج- ثالثا عند أي تغيير في المصفوفة لعدد من متجاورين أو غير متجاورين في المصفوفة تأخذ المصفوفة المتغيرة إشارة سالب .

مثال: إذا كان لدينا مصفوفة ذات درجة (3×3) فيكون حاصل ناتج

علي النحو التالي :

$$A = \begin{vmatrix} 2 & 4 & 3 \\ 1 & 5 & 6 \\ 8 & 7 & 9 \end{vmatrix} = 2 \begin{vmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 9 \end{vmatrix} - 4 \begin{vmatrix} 1 & 6 \\ 8 & 9 \end{vmatrix} + 3 \begin{vmatrix} 1 & 5 \\ 8 & 7 \end{vmatrix}$$

$$= 2(5 \cdot 9 - 7 \cdot 6) - 4(1 \cdot 9 - 8 \cdot 6) + 3(1 \cdot 7 - 5 \cdot 8)$$

مثال: إذا علم أن $A = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}$ اوجد قيمة هذه المصفوفة عند $A=0$

أو $A=-A$ ؟

أولاً : عند $A=0$ وهذا يعني تساوي احد الصفوف أو احد الأعمدة وأيا كانت الصورة فإن $A=0$ وهذا الشرط الأول في المصفوفة $a=b$ و $c=d$ أو $a=c$:

$$A = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a & a \\ a & a \end{vmatrix} = 0$$

ثانياً:

$$A = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b & a \\ d & c \end{vmatrix} = -A$$

بمعنى تغير احد العناصر في المصفوفة بتبديل الموقع .

تفسير ذرة الليثيوم من منظور سلاتر :

من المعلوم بان ذرة الليثيوم تحتوي علي ثلاث الكترونات والتركيب الالكتروني علي النحو $1S^2 2S^1$ وبالتالي يمكن أن تكتب دالة الموجه علي النحو التالي :

$$1S(1) \ 1S(2) \ 1S(3)$$

(٤٠-٠)

يلاحظ وجود تماثل في الفراغ من حيث يمكن تبديل الإحداثيات لأي إلكترونين. وينقصنا شرط آخر وهو دوال الغزل للإلكترونات حتى نحقق شرط باولي ولنبدأ في كتابة مصفوفة سلاتر علي هذا النحو:

$$\begin{vmatrix} 1S\alpha(1) & 1S\beta(1) & 1S\alpha(1) \\ 1S\alpha(2) & 1S\beta(2) & 1S\alpha(2) \\ 1S\alpha(3) & 1S\beta(3) & 1S\alpha(3) \end{vmatrix} = \text{Zero}$$

أو تأخذ الصورة :

$$\begin{vmatrix} 1S\beta(1) & 1S\beta(1) & 1S\alpha(1) \\ 1S\beta(2) & 1S\beta(2) & 1S\alpha(2) \\ 1S\beta(3) & 1S\beta(3) & 1S\alpha(3) \end{vmatrix} = 0$$

وما تحققة شرط المصفوفة أنها تؤول للصفر من حيث تساوي احد الأعمدة بالأخري وإذا كانت ذرة الليثيوم قائمة في التركيب أو تلاشت وهذا مرفوض لذا فإننا سوف نأخذ شكلا آخر من أشكال المصفوفات بناء علي التركيب الالكتروني للمدارات $1S^2 2S^1$ علي هذه الصورة :

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{6}} \begin{vmatrix} 1S\alpha(1) & 1S\beta(1) & 2S\alpha(1) \\ 1S\alpha(2) & 1S\beta(2) & 2S\alpha(2) \\ 1S\alpha(3) & 1S\beta(3) & 2S\alpha(3) \end{vmatrix} \neq 0 \quad (٤١-١٠)$$

(3N-3)

أو تأخذ الصورة :

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{6}} \begin{vmatrix} 1S\beta(1) & 1S\beta(1) & 2S\beta(1) \\ 1S\beta(2) & 1S\beta(2) & 2S\beta(2) \\ 1S\beta(3) & 1S\beta(3) & 2S\beta(3) \end{vmatrix} \neq 0 \quad (٤٢-١٠)$$

وهنا نلاحظ أن التركيب مقبول ليأخذ التركيب الالكتروني المؤلف $1S^2 2S^1$. ويمكن كتابة المصفوفة علي هذا النحو :

$$\psi = |1S(1) 1S(2) 2S(3)| \quad (٤٣-٠)$$

وبالنسبة لشرط التعادل يمكن حذفه لأنه ثابت ومعلوم من خصائص المحددة .

حساب طاقة ذرة الليثيوم :

لدراسة حساب طاقة الليثيوم يمكن كتابة الهاميلتونيان علي هذه الصورة :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \nabla_1^2 + \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{Z}{r_{12}} + \frac{Z}{r_{13}} + \frac{Z}{r_{23}} \quad (٤٤-١٠)$$

يلاحظ وجود $(\frac{1}{r_0})$ وهو ما يمثل حدود التناظر ، $-\nabla$ عامل لابلاس

$-Z$ الشحنات وهنا افترضنا وجود نواه واحدة متمركزة وثابتة لثلاث الكترولونات ولناخذ الهاميلتونيان :

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$$

وهنا \hat{H}^0 - تكتب لثلاث الكترولونات في حالة مستقلة: أي أن :

$$\hat{H}^0 = \left(\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} \right) + \left(\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2} \right) + \left(\frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{Z}{r_3} \right) \quad (٤٥-١٠)$$

وأما مؤثر الاضطراب فهو \hat{H}^1 والذي يمثل الباقي من المعادلة (7)

بعد المعادلة (8) :

$$\hat{H}^1 = \frac{Z}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \quad (٤٥-١٠)$$

يلاحظ أن دالة الموجه مشابه لما هو في ذرة الإيدروجين وبالتالي فان

دالة الموجه ما هي إلا تجميع خطي علي النحو التالي :

$$E^0 = E_{1S}^0 + E_{1S}^0 + E_{2S}^0$$

وبلاحظ أن الطاقة المذكورة في المعادلة (10) في المدار (1S) باثين إلكترون، وواحد في المدار الثاني وهو يمثل ثلاث ذرات هيدروجين . وبالتالي تكون الطاقة الكلية هي :

$$E^0 = \frac{Z^2}{2n^2} - \frac{Z^2}{2n^2} - \frac{Z^2}{2n^2}$$

$$= \left[-\frac{9}{2 \times 1^2} - \frac{9}{2 \times 1^2} - \frac{9}{2 \times 2^2} \right] H = -\frac{81}{8} H$$

$$H = \frac{81}{8} \times 27209 = 2755 \text{ eV}$$

ولكي نصل إلى الطاقة فإننا نستخدم شرط التعامد والمعايرة للدوال المغزلية والفراغية للتكامل :

$$E^1 = \int \psi^* \hat{H}^1 \psi^0 d\tau$$

وعموما الطاقة تؤول درجة مساوية $E^1 = 835 \text{ eV}$ وبالتالي فإن الطاقة لذرة الليثيوم في الحالة الأرضية للدرجة الأولى

$$E^1 - E^0 = 835 - 2755 = -1920 \text{ eV}$$

ولقد وجد أن الطاقة الفعلية لليثيوم هي -203.5 وبالمقارنة نجد أنه يوجد نسبة خطأ بين القيمتين علي النحو 5.65% ويمكن الوصول إلي نتيجة أفضل ولكن بعد إجراء عدة تكاملات أخري علي E^2 , E^3 للرتبة الثانية والثالثة

ويمكن إجراء المعالجة لذرة الليثيوم بكتابة الدالة التجريبية الآتية :

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (b_1)^{3/2} e^{-b_1 r} \quad (10-45)$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (b_2)^{3/2} (2 - b_2 r) e^{-b_2 r}$$

إذا ما عوضنا $Z=b_1=b_2$ في المعادلة (14) وبالتالي فإن مصفوفة
سلاتر للدالة التجريبية يمكن كتابتها علي الصورة :

$$\psi^0 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} A(1) & A(1) & B(1) \\ A(1)(2) & A(2) & B(2) \\ A(1)(3) & A(3) & B(3) \end{vmatrix} \neq 0 \quad (10-45)$$

والطاقة الكلية التي يمكن الحصول عليها من هذه الدالة تكون
أقل ما يمكن إذا فاضلنا تكامل التعبير الآتي :

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi^0 \rangle}{\langle \psi | \psi^0 \rangle} \quad (10-46)$$

بحيث تكون الطاقة نهاية صفري بالنسبة لكل من (b_2, b_1) أي أن:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial b_1} \right)_{b_2} = \text{Zero} , \left(\frac{\partial E}{\partial b_2} \right)_{b_1} = \text{Zero} \quad (10-47)$$

وعموما تم إيجاد القيمة مباشرة للثابت b_1, b_2 علي النحو التالي :

$$b_2 = 1776 , b_1 = 2.686$$

وتكون الطاقة الكلية للحالة الأرضية لليثيوم إذا:

$$E = - 73928 \text{ } 2729 - 201134 \text{ ev}$$

وهذه الطاقة تقريبا قريبة جدا من القيمة -203.5 ev لخطأ حوالي
1.1759% .

ويمكن الوصول إلي نتائج أفضل لو أخذنا في الاعتبار مقدار التنافر
بين الالكترونات .

قانون حساب ثوابت الحجم:

وضع سلاتر عدة قواعد لحساب ثابت الحجب، من حساب
 $Z = Z - S$ حيث ان Z - الشحنة المؤثرة ، S - ثابت الحجب وعليه
فان إلكترون في الفلك الأول (المدار الأول $1S$) يحجب بمقدار 0.3 ev

وبالنسبة للإلكترونات التي تأخذ $l=0$, $n>1$ فإن القانون المستخدم هو :

$$S_{ll} = 0.35X + 0.85y + 1.0Z \quad (10-48)$$

حيث X - عدد الإلكترونات الموجودة في مستوى الإلكترون المحجب Y - عدد الإلكترونات في المستوى $(n-1)$ عدد الإلكترونات في المستوى الأعلى وهكذا.

وأما بالنسبة للإلكترون يدور في المدار $3d$ فإن القانون المستخدم هو :

$$S_{3d} = 0.35X + 1.0y \quad (10-49)$$

حيث X - العدد في المدار $3d$ Y - عدد الإلكترونات عند $n=3$, $l=2$.

مثال: احسب الشحنة Z المؤثرة للذرات والأيونات الآتية مستخدماً قواعد سلتر؟ L, L^+, C and Fe

الحل

أ- بالنسبة لذرة الليثيوم (3)، حيث يكون الحجب في المدار الأول $1s$ هو :

$$\begin{aligned} S_{12} &= 0.3 \cdot 0.3; \quad S_{25} = 0.35 + 0.85 \cdot 4 + 1.0 \cdot 2 \\ &= \bar{Z} = 3 - 2.05 = 96 \\ &= 0.35 (1) + 0.85 (2) + 1.0 \times (10) = \end{aligned}$$

$$2 = L_i^+ \quad S_{1s} = 0.3 \times 1 = 0.3; \quad Z = 2 - 0.3 = 1.7 \quad \text{ب-}$$

$$6 = C \quad S_{1s} = 0.3 \times (1) = 0.3; \quad Z = 6 - 0.3 = 5.7 \quad \text{ج-}$$

$$S_{1s} = 0.35 \times (2) + 0.85 \times (2) = 2.40; \quad Z = 6 - 2.4 = 3.6$$

$$26 = Fe \quad \text{د-}$$

$$S_{1s} = 0.3; \quad Z = 26 - 0.3 = 25.7$$

$$S_{2s} = 0.3 \cdot 5 + 0.85 \cdot 2 = 3.45; \quad Z = 26 - 3.45 = 22.55$$

$$S_{3s} = 0.35 \cdot 5 + 0.85 \cdot 8 + 1 \cdot 2 = 11.275$$

$$= 1055; Z = 26 \quad 1055 = 1545$$

$$= 17.725$$

$$S_{3d} = 035 \text{ @ } 10\% \quad 18 = 201; Z = 26 \quad 201 = 5.9$$

$$= 295$$

$$S_{4s} = 035 \text{ @ } 10\% \quad 14 \quad 10 = 222; Z = 26 \quad 222 = 3.75$$

$$= 1.875$$

$$Z_{2S} = Z_{2P}; Z_{3S} = Z_{3P}; Z_{5S} = Z_{4P}; \dots$$

جدول (1) يبين قيم الشحنة المؤثرة (Z') لبعض الذرات المتعامدة

	z	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p
He	2	1.6875							
Li	3	2.6906	0.6396						
Be	4	3.6848	0.9560						
B	5	4.6795	1.2881	1.2107					
C	6	5.6727	1.6083	1.5679					
N	7	6.6651	1.9237	1.9170					
O	8	7.6579	2.2458	2.2266					
F	9	8.6501	2.5638	2.5500					
Ne	10	9.6421	2.8792	2.8792					
Na	11	10.6259	3.2857	3.4009	0.8358				
Mg	12	11.6089	3.6960	3.9129	1.1025				
Al	13	12.5910	4.1068	4.4817	1.3724	1.3552			
Si	14	13.5745	4.5100	4.9725	1.6344	1.4284			
P	15	14.5578	4.9125	5.4806	1.8806	1.6288			
S	16	15.5409	5.3144	5.9885	2.1223	1.8273			
Cl	17	16.5239	5.7152	6.4966	2.3561	2.0387			
Ar	18	17.5075	6.1152	7.0041	2.5856	2.2547			
K	19	18.4895	6.5031	7.5136	2.8933	2.5752	0.8738		
Ca	20	19.4730	6.8882	8.0207	3.2005	2.8861	1.0995		
Sc	21	20.4566	7.2868	8.5273	3.4466	3.1354	1.1581	2.3733	
Ti	22	21.4409	7.6883	9.0324	3.6777	3.3679	1.2042	2.7138	
V	23	22.4256	8.0907	9.5364	3.9031	3.5950	1.2453	2.9943	
Cr	24	23.4138	8.4919	10.0376	4.1226	3.8220	1.2833	3.2522	
Mn	25	24.3957	8.8969	10.5420	4.3393	4.0364	1.3208	3.5094	
Fe	26	25.3810	9.2995	11.0444	4.5587	4.2593	1.3585	3.7266	
Co	27	26.3668	9.7025	11.5462	4.7741	4.4782	1.3941	3.9518	
Ni	28	27.3526	10.1063	12.0476	4.9870	4.6950	1.4277	4.1765	
Cu	29	28.3386	10.5099	12.5485	5.1981	4.9102	1.4606	4.4002	
Zn	30	29.3245	10.9140	13.0490	5.4064	5.1231	1.4913	4.6261	
Ga	31	30.3094	11.2995	13.5454	5.6654	5.4012	1.7667	5.0311	1.5554
Ge	32	31.2937	11.6824	14.0411	5.9299	5.6712	2.0109	5.4171	1.6951
As	33	32.2783	12.0635	14.5368	6.1985	5.9499	2.2360	5.7928	1.8623
Se	34	33.2622	12.4442	15.0326	6.4678	6.2350	2.4394	6.1590	2.0718
Br	35	34.2471	12.8217	15.5282	6.7395	6.5236	2.6382	6.5197	2.2570
Kr	36	35.2316	13.1990	16.0235	7.0109	6.8114	2.8289	6.8753	2.4423
