



الجامعة السورية الخاصة
SYRIAN PRIVATE UNIVERSITY

الجامعة السورية الخاصة
كلية هندسة البترول

الكيمياء العامة واللاعضوية

الدكتور: جليل ضمد غليم

العام الدراسي 2017-2018

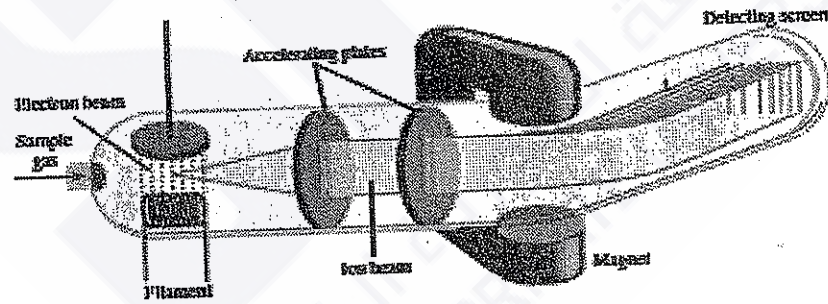
المحاضرة (3)

2019-2018

الجامعة السورية الخاصة
SYRIAN PRIVATE UNIVERSITY

العنصر	العدد الذري	عدد الكتلة	عدد النيوترونات
H	1	1	0
D	1	2	1
T	1	3	2
	6	12	6

- قياس رقم الكتلة باستخدام مطياف الكتلة:
- يساعد مطياف الكتلة قياس كتلة الذرة أو الجزيء على أساس انحراف الشوارد الموجبة في ساحة كهربائية ومغناطيسية وتعود هذه الطريقة إلى العالم تومسون (1824-1907) والتي طورها العالم أستون (1877-1945) باستخدامه لوحة تصوير تسجل عليها شوارد المادة المختلفة في كتلتها (النظائر) وعندها يسمى الجهاز **mass spectrograph**، ولكن في الوقت الحاضر تستخدم أجهزة الكترونية لالتقاط الشوارد الموجبة ويدعى الجهاز مطياف الكتلة **mass spectrometer** يبين الشكل (5-2) مطياف الكتلة:



الشكل (5-2) مطياف الكتلة

2-3-3- نموذج بور للذرة Bohr's model of the atom:

تبعاً لنموذج رذرفورد بقي أن نعرف كيفية دوران الإلكترونات وما هو موقعها، والسبب في التساؤل هو نظرية ماكسويل التي كانت سائدة يومها والتي تنص على أن الإلكترون يفقد طاقته باستمرار في أثناء دورانه حول النواة، وهذا يعني أن الإلكترون سيسقط ويصطدم بالنواة وهذا لن يحدث طبعاً. لقد كان لدراسة طيف ذرة الهيدروجين من قبل العالم بالمر Balmer عام 1885 م وآخرين أثر كبير في إقدام العالم بور عام 1913 م على نشر نظريته، والتي تتألف من النقاط الآتية:

- 1- عدم صحة نظرية ماكسويل.
- 2- نموذج رذرفورد صحيح في أن الإلكترونات تدور حول النواة بشكل مشابه لدوران الكواكب حول الشمس.
- 3- تتحرك الإلكترونات في مسارات دائرية محددة حول النواة، يُرمز للمدارات بأعداد صحيحة $1, 2, 3, \dots$ تدعى الأعداد الكوانتية الرئيسية. فعندما $n=1$ يُعرف ذلك بالسوية الأساسية، وتُعرف المدارات الأعلى $n=2, 3, 4, \dots$ بالسويات المثارة.
- 4- المدارات التي تكون لها كمية حركة زاوية تساوي المقدار $h/2\pi$ أو مضاعفاته هي التي تشغل بالإلكترونات:

$$m_e v r = nh/2\pi$$

حيث إن n عدد دوري وصحيح $n=1, 2, 3, \dots$

m_e كتلة الإلكترون

r نصف قطر المدار

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

- 5- عند اكتساب الإلكترون لكمية من الطاقة ينتقل إلى مستوى طاقة أعلى (وضع غير مستقر) وعند فقد هذه الطاقة يعود إلى موضعه الأصلي فاقداً الكم نفسه من الطاقة الذي اكتسبه في أثناء الإثارة على هيئة إشعاع من الضوء له طول موجي وتردد مميز، ومقدار الطاقة المكتسبة أو المفقودة (الكم أو الكوانتم) يساوي فرق الطاقة بين المستويين وتكون على شكل فوتون، كما توضحه علاقة ماكس بلانك:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = hv = hc/\lambda = hc \cdot \bar{\nu}$$

حيث إن: λ (cm) طول الموجة ، $\bar{\nu}$ ($\frac{1}{\text{cm}}$) العدد الموجي ، v (s^{-1}) التواتر

وعليه فإن نظرية الكم (quantum theory) تنص على أن الطاقة لا توجد بشكل سيالة مستمرة ولكن على نحو متقطع تدعى أصغر قيمة لها كوانتم أو فوتون. وكان ماكس بلانك أول من اقترح فكرة تكميم الطاقة ثم أثبتها أينشتاين.

2-3-3-1- حساب طيف الهيدروجين تبعاً لنموذج بور:

افترض بور أن الإلكترون يدور وفق مسار دائري حول النواة، لكي يستقر الإلكترون يجب أن تتساوى القوتين الجاذبة والنافذة كما يأتي:

$$F_1 = F_2$$

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

نرمز بـ E_n طاقة الإلكترون الكلية و التي تساوي:

$$E_n = E_{kin.} + E_{pot.} \quad (2)$$

الطاقة الكامنة الحركية

$$E_n = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{r}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r}$$

$$E_n = -\frac{e^2}{2r} \quad (3)$$

من علاقة كمية الحركة الزاوية:

$$m.v.r = nh/2\pi$$

$$\Rightarrow v = n \cdot \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{1}{m.r}$$

بتعويض v في العلاقة 1 ينتج:

$$m \cdot \frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 \cdot m^2 \cdot r^2} = \frac{e^2}{r}$$

$$\Rightarrow r = \frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 \cdot m \cdot e^2}$$

بتعويض قيمة r في العلاقة 3 ينتج:

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m \cdot e^4}{n^2 h^2} = -A \left(\frac{1}{n^2} \right) \quad (4)$$

وهي طاقة إلكترون ذرة الهيدروجين، أما المقدار الثابت A فيحسب بالتعويض عن الثوابت في العلاقة 4 ويساوي:

$$A = -21.78 \times 10^{-19} \text{ J}$$

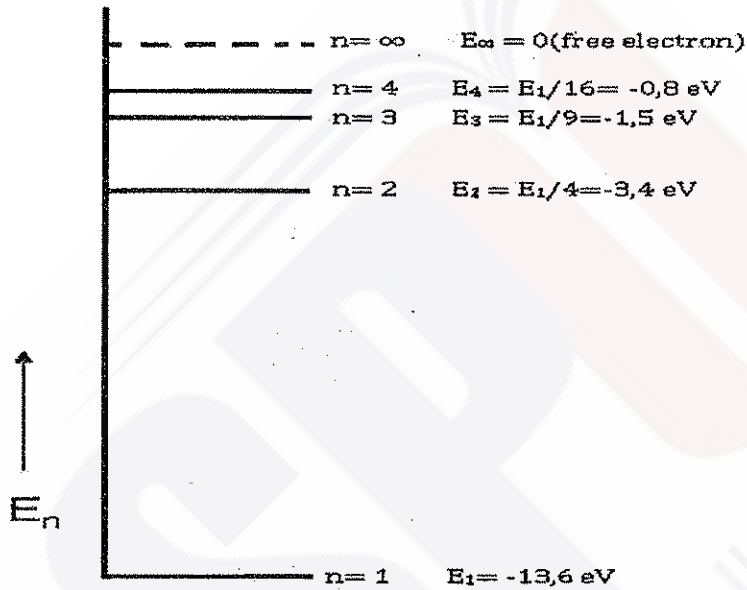
$$E_n = -1/n^2 (21.78 \times 10^{-19} \text{ J}) = -1/n^2 (13.6 \text{ ev}) \quad (5)$$

$$1\text{ev} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ As.V} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} \quad \text{حيث أن:}$$

الإشارة السالبة في العلاقة تعني أن طاقة الإلكترون في الذرة أقل من طاقة الإلكترون الحر عند فقدائها له.

$$E_n = -e^2/2r \quad \text{من المعادلة:}$$

عندما يكون الإلكترون في اللانهاية فإن $E_\infty = 0$ لأنه كلما زاد بعد الإلكترون عن النواة زادت طاقته وكلما اقترب منها نقصت طاقته أي: $E \sim 1/r$ وبالتالي أكبر قيمة سالبة للطاقة تكون عندما $n = 1$ وهو الوضع المستقر للذرة. ويمكن الحصول على مستويات الطاقة في ذرة الهيدروجين تبعاً لنموذج بور وبمساعدة العلاقة 5، كما يبينها الشكل (2-6):



الشكل (2-6) مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين تبعاً لنموذج بور

قبل أن يُعلن بور عن نموده كانت خطوط طيف ذرة الهيدروجين معروفة تجريبياً، وكان العالم السويسري بالمر Balmer أول من أوجد في عام 1885 م علاقة رياضية استطاع على أساسها حساب الطول الموجي لخطوط طيف ذرة الهيدروجين في المجال المرئي:

$$\bar{\nu} = 1/\lambda = \nu/c = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \dots \dots 6$$

حيث إن: $\bar{\nu}$ العدد الموجي أو مقلوب طول الموجة cm

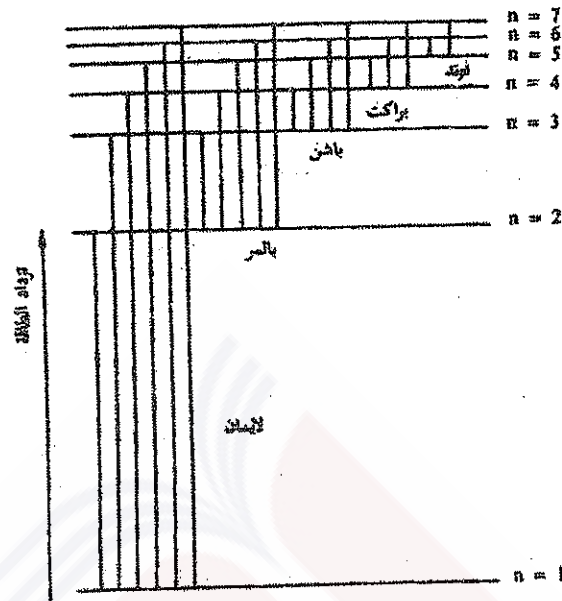
R_H مقدار ثابت يدعى ثابت رايدبيرغ $109677.60 \text{ cm}^{-1}$

n عدد صحيح $n = 3, 4, \dots, \infty$

أجرى العالم رايدبيرغ تعديلاً على علاقة بالمر لتكون مناسبة لحساب طول الموجة لجميع خطوط الطيف سواء في متسلسلة بالمر أو غيرها:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \dots (7)$$

حيث $n_2 > n_1$ ، يوضح الشكل (7-2) سلاسل طيف ذرة الهيدروجين:



الشكل (7-2) سلاسل طيف ذرة الهيدروجين

وتكون السلاسل الطيفية المبينة في الشكل السابق كما يأتي:

(1) سلسلة ليمان (Lyman) حيث $n_1=1$ و $n_2 = 2,3,4...$

(2) سلسلة بالمر (Balmer) حيث $n_1=2$ و $n_2 = 3,4,5...$

(3) سلسلة باشن (Paschen) حيث $n_1=3$ و $n_2 = 4,5,6...$

(4) سلسلة براكيت (Brackett) حيث $n_1=4$ و $n_2 = 5,6,7...$

(5) سلسلة بفوند (Lyman) حيث $n_1=5$ و $n_2 = 6,7,8...$

يمكن حساب الثابت R_H على أساس نموذج بور من العلاقة:

$$\Delta E = h\nu = E_{n_2} - E_{n_1}$$

$$h\nu = -A/n_2^2 - (-A/n_1^2) = A(1/n_1^2 - 1/n_2^2)$$

نعوض بقيمة A من العلاقة 4:

$$\Delta E = 2\pi^2 me^4/h^2 (1/n_1^2 - 1/n_2^2) = h\nu = hc/\lambda$$

$$\Delta E = h\nu = hc/\lambda$$

$$hc/\lambda = 2\pi^2 me^4/h^2 (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$$

$$\bar{\nu} = \frac{2\pi^2 me^4}{ch^3} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \dots (8)$$

وهي تشبه معادلة رايدبيرغ:

$$\bar{\nu} = 1/\lambda = \nu/c = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

وعند حساب R_H من العلاقة 8 وبالتعويض نجد:

$$R_H = 2\pi^2 m e^4 / ch^3 = 109737 \text{ cm}^{-1}$$

وهذه القيمة الحسابية نجد أنها قريبة من القيمة المقاسة تجريبياً (علاقة بالمر).

مثال (2-1): احسب طول الموجة للانتقال الثالث في سلسلة براكيت لذرة الهيدروجين $n=4$

$$\begin{aligned} \bar{\nu} = 1/\lambda &= R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \\ &= 109677.6 \left(\frac{1}{16} - \frac{1}{49} \right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \lambda = 2.166 \times 10^{-4} \text{ cm}$$

ثم احسب طاقة هذا الإشعاع؟

$$\Delta E = h\nu = hc/\lambda = 6.625 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{10} / 2.166 \times 10^{-4}$$

$$\Rightarrow \Delta E = 9.176 \times 10^{-20} \text{ J}$$

مثال (2-2): احسب تبعاً لعلاقة بالمر، طول موجة الضوء في الإشعاع عندما ينتقل الإلكترون في طيف ذرة الهيدروجين من السوية $n_4 = 4$ إلى السوية $n_2 = 2$ ومن ثم احسب طاقة هذا الإشعاع.

$$\frac{1}{\lambda} = 109677 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 20562 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow \lambda = 486 \times 10^{-7} \text{ cm}$$

$$E = h\nu, \quad \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^{10} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}}{486 \times 10^{-7} \text{ cm}} = 6.17 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$E = 6.625 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 6.17 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} = 4.09 \times 10^{-19} \text{ J}$$

مثال (2-3): عند انتقال إلكترون ذرة الهيدروجين من سوية مثارة إلى السوية الأساسية ثم إلى إصدار شعاع ضوئي موجته $\lambda = 121 \text{ nm}$ ، المطلوب:

(a) احسب فرق الطاقة بين السويتين. (b) احسب العدد الكمي الرئيسي للسوية المثارة.

$$\Delta E = E_n - E_1 = \frac{hc}{\lambda}$$

$$E_n - E_1 = \frac{6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 3 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}}{121 \times 10^{-9} \text{ m}} = 16.4 \times 10^{-19} \text{ J} = 10.2 \text{ eV}$$

$$E_n = E_1 + 10.2 \text{ eV} = (-13.6 + 10.2) = -3.4 \text{ eV}$$

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \Rightarrow n^2 = \frac{E_1}{E_n} = \frac{13.6 \text{ eV}}{3.4 \text{ eV}} = 4 \Rightarrow n = 2$$

مثال (4-2): احسب طول موجة شعاع ضوئي تبلغ طاقته 4.9 eV ؟

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{6.625 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 3 \times 10^8 \text{ cm/s}}{4.9 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C.1V}} = 2.531 \times 10^{-5} \text{ cm} \Rightarrow \lambda = 2532 \text{ Å}$$

ويمكن حساب سويات طاقة الإلكترون في الشوارد المشابهة للهيدروجين (كما في

$$E_n = E_{n(H)} \cdot P^2 \quad \text{شاردة الليثيوم (Li}^{2+}\text{) وفق العلاقة:}$$

حيث أن: $E_{n(H)}$ طاقة ذرة الهيدروجين (العلاقة 5)

P عدد البروتونات ويساوي 3 في الشاردة Li^{2+}

ويُعطى فرق الطاقة بين السويتين n_I و n_{II} بالعلاقة الآتية:

$$\Delta E_n = \Delta E_{n(H)} \cdot P^2$$

$\Delta E_{n(H)}$ فرق الطاقة بين السويتين n_I و n_{II} في ذرة الهيدروجين.

ويمكن حساب نصف قطر نواة الذرة الشبيهة بالهيدروجين تبعاً للعلاقة:

$$r = r_H \cdot 1/P$$

مثال (5-2): احسب طاقة تشرد Li^{2+} إذا علمت أن طاقة تشرد الهيدروجين تساوي 13.6 eV.

$$\Delta E_{Li} = \Delta E_{n(H)} \cdot P^2 = (13.6) \cdot (3^2) = 122.4 \text{ eV}$$

4-2- الطبيعة الموجية للإلكترون - وفرضية دي بروغلي:

De-Broglie's hypothesis- Wave Nature of electron

للإشعاع الكهرومغناطيسي صفات موجة يمكن تحديد طولها λ ، و بالتالي تملك صفات الانعراج والتداخل والاستقطاب، ومن ناحية أخرى يتألف الإشعاع أيضاً من جسيمات دقيقة تدعى الفوتونات وبالتالي فهو يملك طاقة وله كتلة. وهذه الصفات المزدوجة للضوء تم تفسيرها عبر ظاهرة التأثير الكهروضوئي للعالم أينشتاين، أيضاً، أوجت للعالم دي بروغلي Debrogli's في العام 1924 م بتعميم المفاهيم الموجية الجسيمية على جميع الجسيمات الدقيقة، و التوصل إلى علاقة لحساب طول موجات الأجسام.

$$\Delta E = \Delta m \cdot C^2 \quad \text{وذلك بالمساواة بين علاقة أينشتاين:}$$

$$\Delta E = h \cdot \nu \quad \text{وعلاقة ماكس بلانك:}$$

بالمساواة بين العلاقتين:

$$m.C^2 = mC.C = h.v = \frac{h.C}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{m.C}$$

حيث إن λ طول موجة الفوتون الناتج عن تحول الكتلة m إلى طاقة ضوئية. ويمكن الحصول على علاقة مشابهة لطول الموجة الجسيمية بتعويض سرعة الضوء C بسرعة الجسيم v المطلوب حساب طول موجته:

$$\lambda = \frac{h}{m.v}$$

يوضح الشكل (8-2) الطبيعة الموجية للضوء:



الشكل (8-2) الطبيعة الموجية للضوء

وهذه الطبيعة الموجية تتطلب أن يكون للإلكترون طول موجة محدد بحيث إن محيط مداره $(2\pi r)$ يساوي عدداً صحيحاً من أطوال الموجة تبعاً للعلاقة الآتية:

$$2\pi r = n \lambda$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{2\pi r}{n}$$

$$\lambda = \frac{h}{m.v}$$

بمقارنتها مع العلاقة:

$$\frac{h}{m.v} = \frac{2\pi r}{n}$$

$$m.v.r = \frac{n.h}{2\pi}$$

وهذا يعني أن عزم الإلكترون الزاوي (ذو الطبيعة الموجية) يساوي عدداً صحيحاً من المقدار الثابت $\frac{h}{2\pi}$ وهذا ما أثبتته بور في نظريته.

مثال (6-2): يبلغ طول موجة ضوء من مصدر ضوئي معين 588nm ، احسب طاقة

الفوتون بوحدة الجول J . ($1\text{nm} = 1.0 \times 10^{-9}\text{m}$)

$$E = h.v = \frac{h.C}{\lambda} \quad \text{من علاقة ماكس بلانك:}$$

نعوض في العلاقة:

$$E = \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{J.s}) \times (3 \times 10^8 \text{m.s}^{-1})}{5.88 \times 10^{-7} \text{m}} = 3.4 \times 10^{-19} \text{J}$$

مثال (7-2): احسب تردد ضوء بنفسجي طول موجته 408nm؟

$$C = v \cdot \lambda$$

$$v = \frac{C}{\lambda} = \frac{3.0 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}}{408 \times 10^{-9} \text{ m}} = 7.35 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

2-5- قاعدة هايزنبرغ في عدم التحديد Heisenberg Uncertainty Rule:

تنص على أنه لا يمكن في لحظة من اللحظات تحديد مكان الإلكترون و قوة دفعه، ويمكن التعبير عن ذلك بالعلاقة:

$$(m \cdot \Delta v) \cdot \Delta x \geq h/4\pi \Leftrightarrow \Delta x \cdot \Delta v \geq h/4\pi m$$

حيث إن: Δx الخطأ أو عدم التأكد في تحديد مكان الإلكترون

m كتلة الإلكترون، v سرعة الإلكترون

$$m \cdot \Delta v = \Delta P$$

ينتج أنه كلما كان تعيين مكان الجسم أكثر دقة أصبحت قيمتا العزم و السرعة أقل تحديداً وبالعكس، فكلما ازدادت الدقة في تعيين العزم و(السرعة) ازداد الشك في مكان الجسم. وفي حالة الجسيمات ذات الكتل الكبيرة تكون قيمة النسبة h/m صغيرة جداً (Δv و Δx) مقداران ضئيلان جداً) ولهذا تصلح لها وتنطبق عليها قوانين الميكانيك الكلاسيكي التي يمكن بواسطتها تعيين سرعة الجسم ومكانه تعييناً دقيقاً في آن واحد.

مثال (8-2): احسب عدم الدقة في تحديد (Δv) سرعة الإلكترون، إذا علمت أن عدم

الدقة في تحديد مكانه $\Delta x = 0.01 \text{ \AA}$ وأن كتلته $m = 9 \times 10^{-31} \text{ Kg}$.

$$\Delta x \cdot \Delta v = \frac{h}{4\pi m} \Rightarrow \Delta v = \frac{h}{4\pi m \cdot \Delta x}$$

$$\Delta v = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}}{4 \times 3.14 \times 9 \times 10^{-31} \text{ Kg} \cdot 0.01 \times 10^{-10} \text{ m}} = 5.86 \text{ m.s}^{-1}$$

وهذا يعني أن عدم الدقة في قياس سرعة الإلكترون عالية جداً وتبلغ تقريباً $2.1 \times 10^7 \text{ Km/hr}$.

2-6- ميكانيك الكم - معادلة شرودنغر:

Shrödinger equation –Quantum Mechanics

اقتصرت نظرية بور في تحديد طيف الذرات على ذرة الهيدروجين فقط، وعجزت عن تفسير وجود خطوط إضافية في طيف ذرة الهيدروجين في المجال المغناطيسي، وعن كيفية تحديد مكان الإلكترون وسرعته في آن واحد، ودوران الإلكترون حول النواة بمدار محدد، واعتبار أن ذرة الهيدروجين مستوية، نتيجة هذه التساؤلات كان لابد من إيجاد معادلة تصف حركة الجسيمات الدقيقة وطاقتها، وقد تمكن العالم النمساوي شرودنغر من حل هذه المشكلة في إيجاد معادلة عرفت باسمه:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V)\psi = 0$$

حيث إن : E الطاقة الكلية

V الطاقة الكامنة

h ثابت بلانك

m كتلة الإلكترون

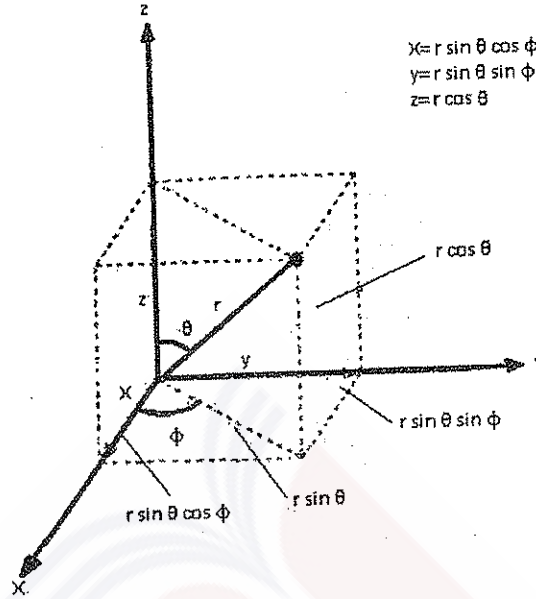
ψ التابع الموجي (بسي)

x, y, z المحاور الرئيسية الثلاثة

إن وجود m يدل على أن للإلكترون صفة الجسيم، ووجود التابع الموجي ψ يعطيه صفة الموجة (ليس — ψ معنى فيزيائي بشكل مباشر) ولكن التابع ψ^2 يعني احتمال وجود إلكترون في مكان محدد من الفراغ وهذا يشبه شدة الضوء طرداً مع ψ^2 . ويسمى التابع الموجي الذي يعتبر حلاً لمعادلة شرودنغر بالمدار، وتكمن طريقة حل المعادلة في عملية تحويل التابع ψ إلى حاصل ضرب تابعين وفق العلاقة الآتية:

$$\psi_{n,L,m}(r,\theta,\Phi) = R_{n,L}(r) \cdot Y_{L,m}(\theta,\Phi)$$

حيث: R التابع القطري ويتعلق بالبعد r وبالعدد الكمي الرئيسي n والعدد الكمي الثانوي L والتابع Y وتابع الزوايا ويتعلق بالعدد الكمي الثانوي L والعدد الكمي المغناطيسي m ويبين الشكل (2-9) العلاقة بين الإحداثيات القطبية (r,θ,Φ) والإحداثيات الديكارتية (X,Y,Z) :



الشكل (9-2) العلاقة بين الإحداثيات القطبية (r, θ, ϕ) والإحداثيات الديكارتية (x, y, z)
 إن حل معادلة شرودنغر صعب وبالعقيد حتى في الحالة البسيطة جداً، كحالة ذرة الهيدروجين ولذلك سنكتفي بذكر نتائج حلها فقط، إن حل معادلة شرودنغر لكل إلكترون يؤدي إلى الحصول على قيم خاصة بالإلكترون سميت بأعداد الكم.

✱ 7-2 - أعداد الكم Quantum numbers: وهي تحدد حجم الحيز من الفراغ الذي يكون احتمال تواجد الإلكترونات فيه أكبر ما يمكن، كما تحدد طاقة هذه المدارات وأشكالها واتجاهاتها بالنسبة لمحاور الذرة، وهي:

✱ 1- عدد الكم الرئيسي The principle Quantum Number:

وهو العدد الذي يصف بُعد الإلكترون عن النواة ويرمز له بـ (n) ، وبأخذ القيم: $n = 1, 2, \dots, \infty$ وبزيادة قيمته تزداد طاقة الإلكترون. وتدل قيم n على الطبقات الإلكترونية الرئيسية كما يأتي:

1	2	3	4	5
K	L	M	N	O

ويحدد عدد الإلكترونات الأعظمي في كل سوية بالعلاقة: $2n^2$.

2- عدد الكم الثانوي The secondary Quantum Number:

استطاع العالم سمر فيلد أن يكتشف أن خط الطيف والذي يمثل انتقال إلكترون بين مستويين مختلفين في الطاقة هو في الواقع عبارة عن عدة خطوط طيفية دقيقة تدعى سويات الطاقة الفرعية أي كل سوية طاقة رئيسية تتكون من عدد من سويات الطاقة الفرعية والتي يُرمز لها بـ s, p, d, f وتأخذ القيم $0, 1, 2, 3$ على التوالي. وهو الذي

يصف شكل المدار الذي يوجد فيه الإلكترون ويرمز له بـ (ℓ)

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

يوضح الجدول الآتي قيم الأعداد n و ℓ والسويات الموافقة لها:

انقسام السوية n واسم السويات	العدد الكمي الثانوي ℓ	العدد الكمي الرئيسي n
S	0	1
S,p	0,1	2
S,p,d	0,1,2	3
S,p,d,f	0,1,2,3	4

3- عدد الكم المغناطيسي The magnetic Quantum Number:

بوجود مجال مغناطيسي قوي وجد أن كل خط طيف يمثل مستوى فرعياً ينقسم إلى عدد فردي من المدارات يوضحها العدد الكمي المغناطيسي m وهي:

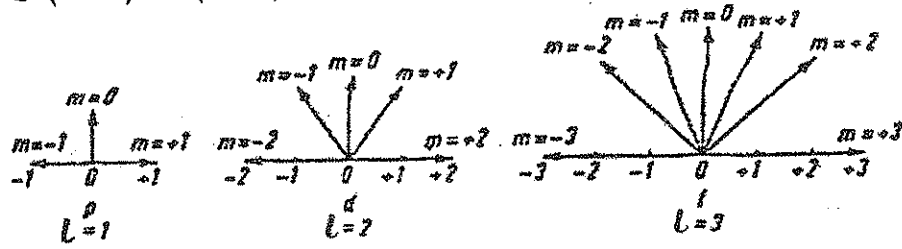
- المستوى S له مدار واحد ويكون بشكل كروي.
 - المستوى الفرعي P وهو عبارة عن ثلاثة مدارات تتخذ محاورها الاتجاهات الفراغية X,Y,Z وهي متعامدة.
 - المستوى الفرعي d وهو عبارة عن خمسة مدارات متعامدة.
 - المستوى الفرعي f وهو عبارة عن سبعة مدارات متعامدة أيضاً.
- أي أن العدد m يحدد عدد مدارات سويات الطاقة الفرعية واتجاهاتها الفراغية وهو عدد فردي يأخذ القيم 1,3,5,7 : $m = (-\ell, \dots, 0, \dots, +\ell)$

ℓ	0	1	2	3
المدار	s	p	d	F
عدد الانقسامات	—	3	5	7

يوضح الجدول الآتي قيم الأعداد ℓ و m :

ℓ	M
$\ell=0$	0
$\ell=1$	+1 0 -1
$\ell=2$	+2 +1 0 -1 -2

يوضح الشكل الآتي الاتجاهات المغناطيسية للمدارات $(d=0)s$ و $(d=1)p$ و $(d=2)d$:



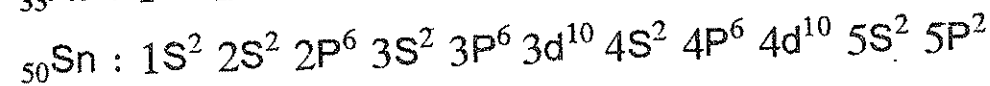
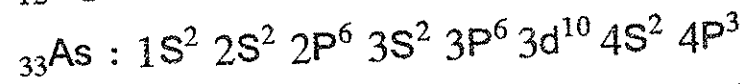
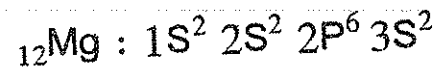
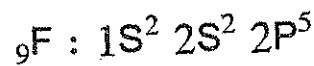
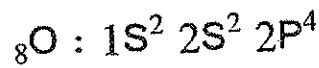
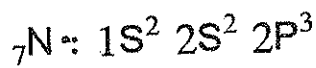
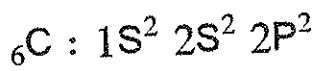
4- عدد الكم للّف الذاتي The spin Quantum Number:

يمكن أيضاً بدون الساحة الكهربائية أو المغناطيسية وبوساطة مطياف حساس وقوي أن يظهر انقسام الخطوط الطيفية والتي تبدو وكأنها خط واحد. لشرح هذه الظاهرة يجب الإشارة إلى دوران الإلكترون حول نفسه إما لليسار أو اليمين، وكل خط عبارة عن سوية طاقة والفرق بين السويتين هو فرق بين عزمين حركيين زاويين $m_e v r$ مقداره الكمي $h/2\pi$. وهذه القيمة عبارة عن الفرق بين $+\frac{1}{2} h/2\pi$ و $-\frac{1}{2} h/2\pi$. ولذلك يعبر عن اللف الذاتي للإلكترون بالعدد الكمي للّف الذاتي S ويأخذ القيم $S=\pm 1/2$.

2-8- قواعد توزيع الإلكترونات على مدارات الذرة:

1- مبدأ الاستبعاد لباولي: ينص المبدأ على أنه لا يوجد في الذرة زوج من الإلكترونات لكل منهما الأعداد الكمية الأربعة نفسه. يوضح الجدول (2-2) توزيع الإلكترونات على مدارات الذرة حتى $n=3$.

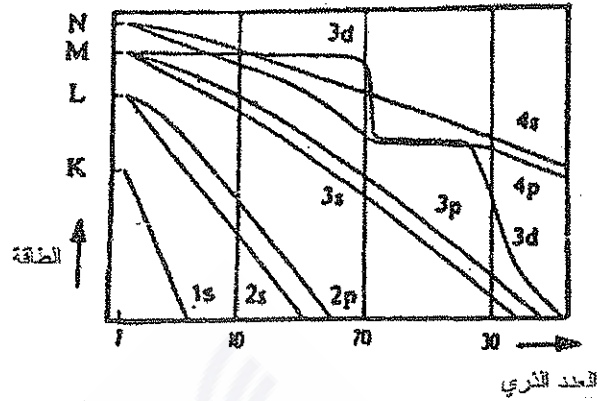
2- قاعدة هوند Hund's Rule: وتنص على أنه: يتم توزيع الإلكترونات على مدارات s, p, d, f بشكل فردي وعندما تزيد على عدد المدارات يبدأ التزاوج في المدار الواحد، أمثلة:



الجدول (2-2) توزيع الإلكترونات على مدارات الذرة حتى $n=3$

ℓ	m	s	عدد الإلكترونات $2n^2$	المدار	الترتيب الإلكتروني	الطبقة الرئيسية
0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	1S	1S ²	K
0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	2S	2S ²	L
1	+1	$\pm \frac{1}{2}$	6	2P _x	2P ⁶	
	0	$\pm \frac{1}{2}$		2P _y		
	-1	$\pm \frac{1}{2}$		2P _z		
0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	3S	3S ²	M
1	+1	$\pm \frac{1}{2}$	6	3P _x	3P ⁶	
	0	$\pm \frac{1}{2}$		3P _y		
	-1	$\pm \frac{1}{2}$		3P _z		
2	+2	$\pm \frac{1}{2}$	10	3d _{x²-y²}	3d ¹⁰	
	+1	$\pm \frac{1}{2}$		3d _{xz}		
	0	$\pm \frac{1}{2}$		3d _{z²}		
	-1	$\pm \frac{1}{2}$		3d _{yz}		
	-2	$\pm \frac{1}{2}$		3d _{xy}		
		$\pm \frac{1}{2}$				

ويوضح الشكل (10-2) العلاقة بين مستويات الطاقة والعدد الذري:

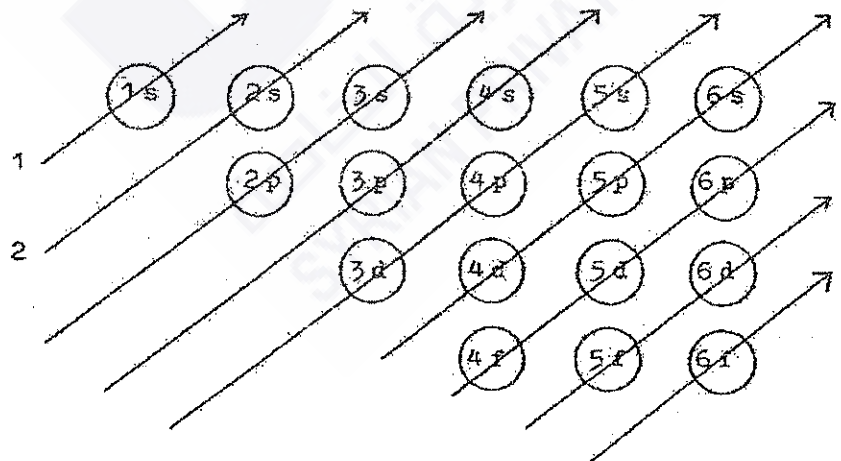


الشكل (10-2) العلاقة بين مستويات الطاقة والعدد الذري

نلاحظ أن طاقة السوية تزداد مع العدد الكمي الرئيسي n ، أما هذا فيعود إلى ضعف قوى التجاذب بين النواة والطبقات الإلكترونية كلما ازداد البعد عن النواة. كذلك نلاحظ أن سوية المدار 4s أخفض من سوية المدار 3d حتى العدد الذري 20 يمكن تفسير ذلك كما يأتي:

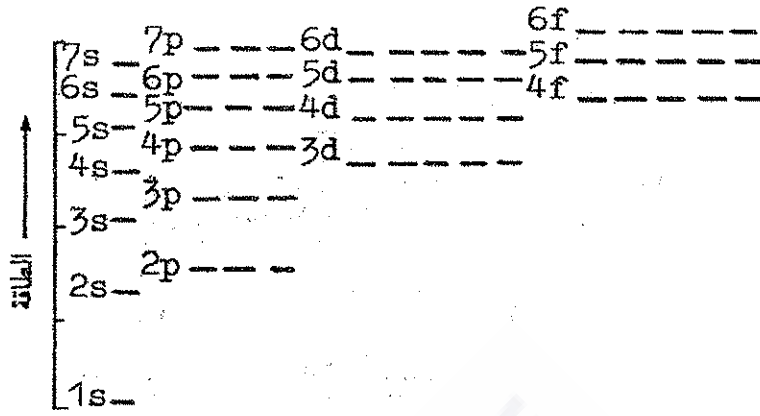
مع زيادة العدد الكمي n تقترب مستويات الطاقة بعضها من بعض لدرجة أنها تتساوى فيما بينها. وقد تصبح طاقة سوية من مستويات المدار الرابع أدنى من طاقة سوية من مستويات المدار الثالث، ولذلك يمكن القول إن المدارات يتداخل بعضها مع بعض بزيادة العدد الكمي n .

حيث يتم توزيع الإلكترونات على مداراتها تبعاً للشكلين (11-2) و (12-2):



الشكل (11-2) مخطط توزيع الإلكترونات على مدارات الذرة

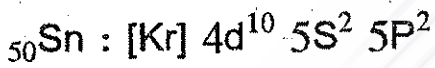
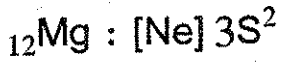
ويمثل الشكل (12-2) مستويات الطاقة للذرات المتعددة الإلكترونات:



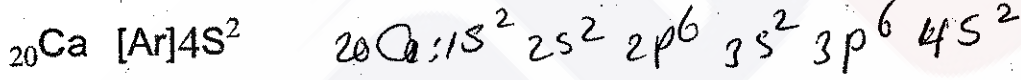
الشكل (2-12) سويات الطاقة للذرات متعددة الإلكترونات

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \approx 3d < 4p < 5s \approx 4d < 5p < 6s \approx 5d \approx 4f < 6p$$

ويمكن كتابة التوزيع الإلكتروني بشكل مختصر كما يأتي:



مثال (9-2): اكتب التوزيع الإلكتروني لكل من ^{20}Ca و ^{21}Sc



الكالسيوم من العناصر الرئيسية، يتميز بالإلكترونات تكافؤ لها عدد كمي رئيسي $n=4$ أما السكندريوم من العناصر الانتقالية فيتميز بالإلكترونات تكافؤ لها أكثر من عدد كمي واحد ($n=3$ و $n=4$). تتميز العناصر الانتقالية d بامتلاء جميع المدارات بالإلكترونات ما عدا المدارين الأخيرين nd و $(n+1)s$ ، في المجموعة الانتقالية الأولى نلاحظ أن المدارين 3d و 4s غير ممتلئين، وفي المجموعة الانتقالية الثانية نجد أن المدارين 4d و 5s غير ممتلئين، أما في المجموعة الانتقالية الثالثة فهما 5d و 6s. كما في الأمثلة التالية:

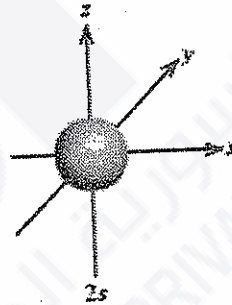


يُحدد رقم المجموعة للعنصر الانتقالي كما يأتي:

إذا كان عدد الإلكترونات في مدارات d خمسة أو أقل فإن رقم المجموعة هو مجموع الإلكترونات في $nS(n-1)d$ ، أما إذا كان عدد الإلكترونات أكثر من خمسة وأقل من عشرة فيكون رقم المجموعة هو VIII B، وإذا كان عدد الإلكترونات في d عشرة أي ممثلاً فإن رقم المجموعة هو عدد الإلكترونات في المدار S.

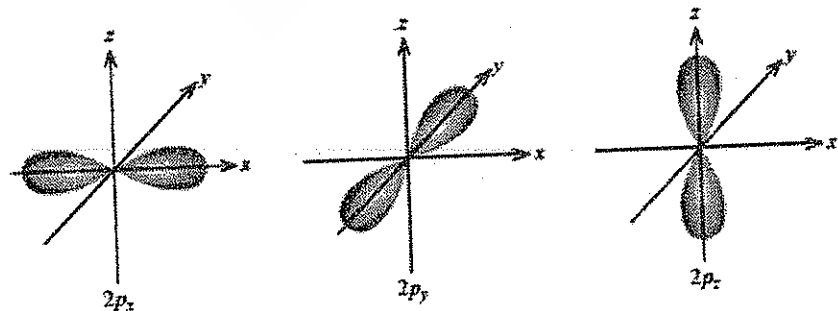
يجب الإشارة عند حل معادلة شرودنغر إلى أن التابع (ψ) حدد أعداد الكم (n, L, m) أما العدد الكمي S فيتعلق بالخاصة المغناطيسية للإلكترون، عندما تأخذ الأعداد القيم الآتية:

$n = 1$	$L = 0$	$m = 0$
		يكون لدينا مدار واحد هو (S)
$n = 2$	$L = 1$	$m = -1, 0, +1$
		يكون لدينا ثلاثة مدارات فرعية للمدار (P_x, P_y, P_z)
$n = 3$	$L = 2$	$m = -2, -1, 0, +1, +2$
		يعني وجود خمسة مدارات فرعية للمدار (d)، يوضح الشكل (13-2) أشكال المدارات S:



الشكل (13-2) أشكال المدارات S

يوضح الشكل (14-2) أشكال المدارات P:



الشكل (14-2) أشكال المدارات P