

الفصل الرابع : البنية الإلكترونية للذرة

I. النموذج الذري لروذرفورد Rutherford:

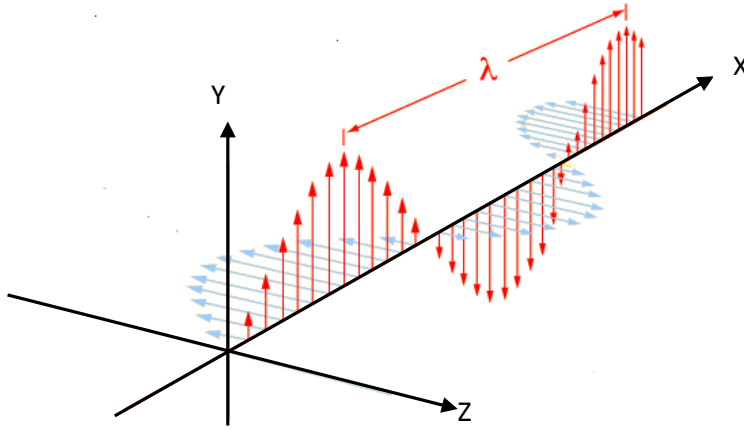
من خلال تجربة روذرفورد (ورقة ذهب بدقائق α) اقترح هذا الأخير نموذجا كوكبيا للذرة : نواة موجبة تدور حولها إلكترونات سالبة بحيث تكون الجملة متعادلة. لم يجب هذا النموذج على الأسئلة الآتية :

- عند انتقال الإلكترون حول النواة يولد موجة كهرومغناطيسية (انتقال شحنة كهربائية في الفضاء) حيث يشيع طاقة فنتوقع طيف مستمر (بين بالمر تجريبيا سنة 1885 أن طيف ذرة الهيدروجين غير مستمر).
- يترتب عن هذا الإشعاع تناقص في الطاقة حيث يصبح مسار الإلكترون حلزوني ويسقط على النواة (نموذج غير مستقر). يستنتج من هذا أن النموذج عاجز عن تفسير بنية الذرة.

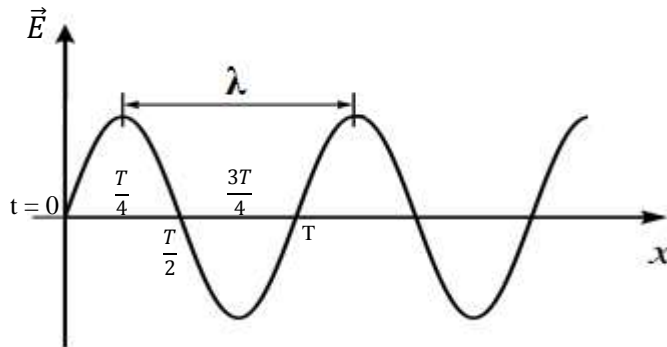
1. الإشعاع الكهرومغناطيسي:

1.1. الطبيعة الموجية للضوء:

الضوء عبارة عن حقل كهربائي \vec{E} مصاحبا لحقل مغناطيسي اهتزازي \vec{B} ينتشر في الفضاء بحركة موجية (انتقال شحنة كهربائية ينتج موجة كهرومغناطيسية). و يمكن تمثيله كالآتي:



إذن الموجة الضوئية عبارة عن موجة كهرومغناطيسية تنتشر في الفضاء بسرعة ثابتة (سرعة الضوء) : $C = 3.10^8 \text{ m/s}$
نتخيل أنه يمكن تصوير هذه الموجة في أي لحظة من الزمن فنحصل على الشكل التالي :



توصف الموجة الكهرومغناطيسية بالعناصر التالية :

λ طول الموجة الضوئية : وهي المسافة التي تقطعها الموجة في ظرف زمني يساوي الدور T
و تقاس λ بوحدة الطول (m , cm , nm , A) حيث : $1 \text{ m} = 10^2 \text{ cm} = 10^9 \text{ nm} = 10^{10} \text{ A}^0$

T الدور : وهو الزمن اللازم لشعاع الإهتزاز بأن يأخذ نفس الطول و نفس الإتجاه و يقاس بـ S .

∂ التواتر (أو التردد) : وهي عدد الأمواج المقطوعة بوحدة الزمن (أو الدورات في الثانية) و يساوي مقلوب الدور.

$$\partial = \frac{c}{\lambda} = \frac{1}{T} \quad \text{و يقاس بـ } S^{-1} \quad \text{والتي تساوي الهرتز } 1 \text{ Hz} = 1 S^{-1} \quad (\text{Hertz} = \text{cycle/s})$$

$\bar{\partial}$ أو σ العدد الموجي : وهو عدد الأمواج في الوحدة من الطول (في المتر الواحد أو cm....) و يساوي مقلوب طول الموجة $\bar{\partial} = \frac{1}{\lambda}$ و يقاس m^{-1} أو cm^{-1} أو Å^{-1} .

2.1. الطبيعة الجسيمية للضوء :

* تقدم العالم ماكس بلانك بنظرة ذات أهمية كبيرة وهي : إذا كانت للضوء طبيعة موجية فإن هذه الموجة تحمل طاقة على شكل وحدات طاغوية صغيرة جدا تدعى بـ : كوانتا طاغوية أي أن الطاقة المنقولة من طرف إشعاع ضوئي غير مستمرة وإنما

$$E = h \partial \quad \text{متقطعة وكل كم طاغوي يوافق طاقة :}$$

E : طاقة الكم الواحد (J)

∂ : تواتر الموجة الضوئية (Hz)

$$h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J.s} \quad \text{ثابت بلانك}$$

بينما مجموع هذه الكمات هو : $E_n = n \cdot h \partial$ حيث : n عدد طبيعي 1, 2, 3,

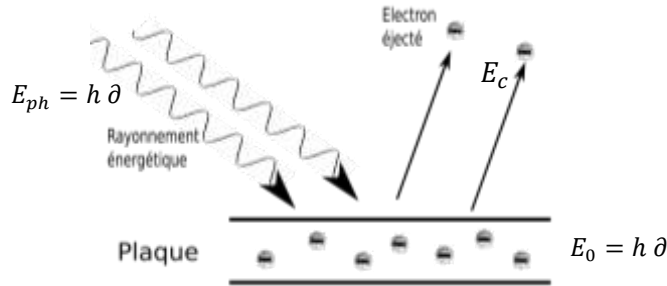
* لقد عمم أنشتاين نظرية الكم مبينا أن الأمواج الضوئية تتألف من جسيمات متناهية في الصغر تسمى فوتونات photons وكل فوتون يحمل طاقة $E = h \partial$.

كل فوتون عبارة عن جسيم نسبي ذو كتلة معدومة وشحنة معتدلة يتحرك في الفراغ بنفس السرعة التي تنتشر بها الموجة الضوئية $C = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$ ، يملك طاقة تدعى بكوانتم من الطاقة متناسبة مع التواتر $E = h \partial$.

تختلف الإشعاعات بعضها عن بعض بطاقة فوتوناتها (إشعاع تواتره ∂ يحمل طاقة $E = h \partial$) والذي يُفسّر بالفعل الكهروضوئي.

2. الفعل الكهروضوئي (Effet photoélectrique) :

يمكن لسطح معدن أن يصدر إلكترونات إذا سقط عليه إشعاع ضوئي طاغته $h \partial$ بحيث قسم من هذه الطاقة يستهلك في فصل الإلكترونات عن المعدن والقسم الآخر يكون على شكل طاقة حركية .



لوحظ خلال التجربة أن إنبعاث الـ e^- لا يتم إلا إذا كان التواتر ∂ للإشعاع الضوئي الساقط له قيمة أكبر من قيمة معينة ∂_0 أي يجب أن يكون الإشعاع الضوئي حاملا لكوانتم طاغوي $E = h \partial$ أكبر أو على الأقل يساوي $h \partial_0$.

∂_0 : يدعى بتواتر العتبة الكهروضوئية ومميز لكل معدن.

$$E_{ph} = E_0 + E_c \quad \Leftrightarrow \quad h\partial = h\partial_0 + \frac{1}{2}m_e v^2 \quad \Rightarrow \quad E_c = h(\partial - \partial_0)$$

إذا كانت الطاقة المنقولة من طرف الإشعاع أكبر من $h \partial_0$ (الطاقة اللازمة لنزع الـ e^-) فالطاقة الزائدة يأخذها الـ e^- على شكل طاقة حركية (إنحفاظ الطاقة).

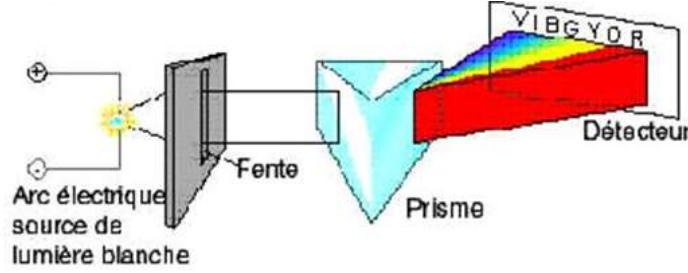
$\partial \geq \partial_0$: نزع الـ e^- ،

$\partial > \partial_0$: نزع ونقل الـ e^- ،

$\partial < \partial_0$: لا يمكن نزع الـ e^- من المعدن.

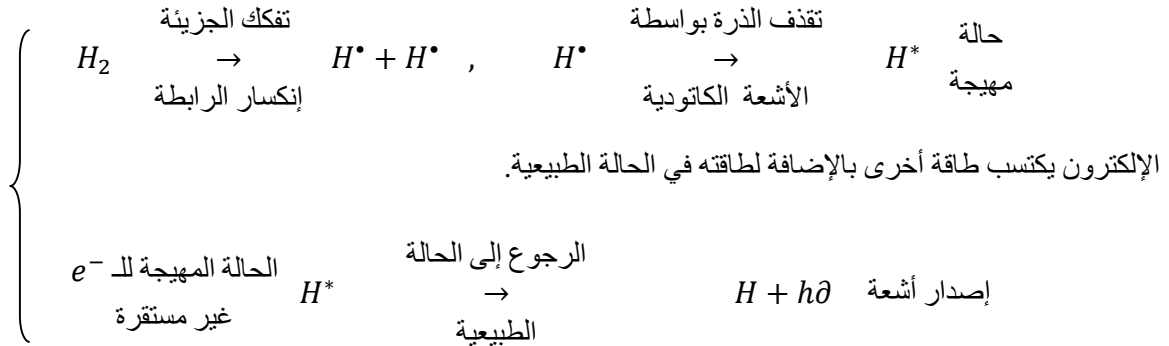
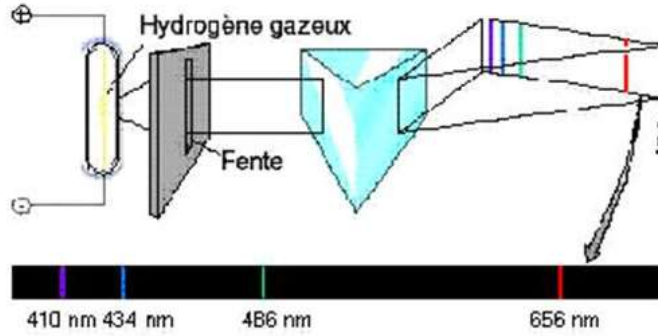
II. طيف الإمتصاص وطيف الإنبعاث

1. طيف الضوء الأبيض: يتألف من عدة ألوان حيث هذا الأخير ينفصل إلى مركباته عند مروره من خلال منشور، فالطيف المحصل عليه عبارة عن تسلسل ألوان مختلفة.



2. طيف إنبعاث ذرة الهيدروجين:

باستعمال التفريغ الكهربائي داخل أنبوب يحوي غاز الهيدروجين تحت ضغط منخفض وعند تطبيق فرق جهد عالي يتم إثارة (تنشيط) ذرات الهيدروجين مما يؤدي إلى توهجها لينتج عنها ضوء وإذا حلل هذا الضوء من خلال منشور إلى مركباته الأولية، تظهر على اللوح الفوتوغرافي خطوط متقطعة في مناطق الطيف التالية: UV فوق البنفسجية، VIS المرئية، IR تحت الحمراء.



يمثل كل خط من هذه الخطوط إشعاع كهرومغناطيسي له تواتر و طول موجة و عدد موجي ودور .

3. علاقة بالمر (Balmer) : بمقارنة أطوال الأمواج للخطوط المختلفة في المجال المرئي، لاحظ بالمر (قبل بور) أنه يمكن التعبير عنها كالتالي:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

عدد طبيعي

$$\text{Constante de Rydberg} \quad \text{ثابت ريديبرغ} \quad R_H = 1,1 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

كل الخطوط التي تحقق هذه العلاقة تكوّن سلسلة من الخطوط ذات أطوال أمواج معينة، تسمى هذه السلسلة بسلسلة بالمر. هذه الخطوط تبين تغير طاقة ال- e^- (إنتقال الإلكترون في مستويات متقطعة).

وإنطلاقاً من هذه العلاقة تم الكشف عن سلاسل أخرى خطية ذات أطوال أمواج أو أعداد موجية $\bar{\sigma}$ مختلفة فسمية كل سلسلة خطية بإسم كاشفها.

تكتب العلاقة بصفة عامة كالتالي :

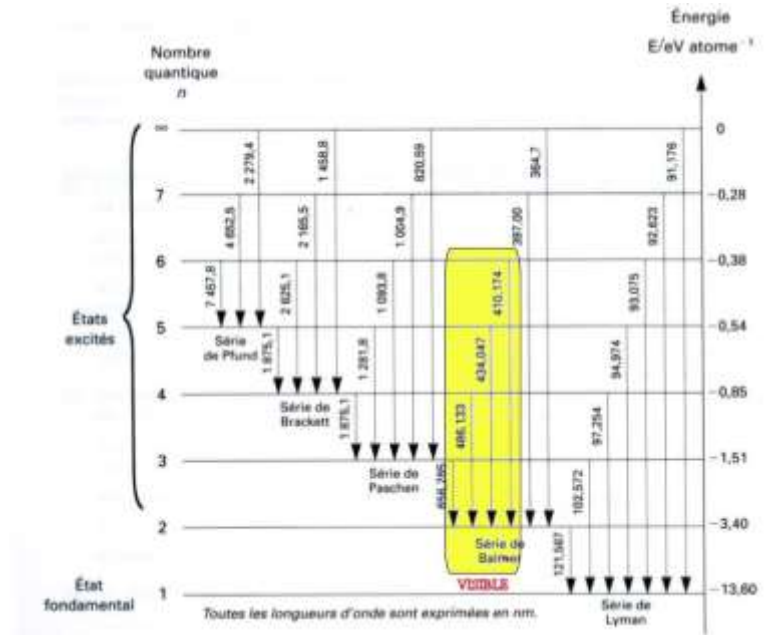
$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad n_2 > n_1$$

n_1, n_2 : عدنان طبيعيين موجبان.

* عند تطبيق فرق جهد عالي يتم إثارة ذرات الهيدروجين أي الإلكترون الوحيد ينتقل من الحالة الأساسية إلى الحالة الغير أساسية (حالة إثارة).

* الإلكترون لا يستقر في المستويات الجديدة وإنما يرجع إلى الحالة الأساسية إما دفعة واحدة أو تدريجياً. إذا رجع الإلكترون إلى الحالة الأساسية ($n_1 = 1$) فإنه يعطي خطوطاً طيفية في سلسلة إسمها ليمان. إذا رجع الإلكترون إلى المستوى الثاني ($n_1 = 2$) فإنه يعطي خطوطاً طيفية في سلسلة إسمها بالمر. إذا رجع الإلكترون إلى المستوى الثالث ($n_1 = 3$) فإنه يعطي خطوطاً طيفية في سلسلة إسمها باشن. إذا رجع الإلكترون إلى المستوى الرابع ($n_1 = 4$) فإنه يعطي خطوطاً طيفية في سلسلة إسمها براكت. إذا رجع الإلكترون إلى المستوى الخامس ($n_1 = 5$) فإنه يعطي خطوطاً طيفية في سلسلة إسمها بفوند.

وعلى هذا الأساس يمكن تمثيل طيف إنبعاث ذرة الهيدروجين حسب الشكل التالي :



كل قيمة لـ n_1 توافق سلسلة خطية :

n_1	n_2	إسم السلسلة	إسم الطيف	مجال (nm)
1	$2 \rightarrow \infty$	ليمان Lyman	UV	97,25 – 121,57
2	$3 \rightarrow \infty$	بالمر Balmer	VIS	434,1 – 656,3
3	$4 \rightarrow \infty$	باشن Paschen	IR proche	1094 – 1875
4	$5 \rightarrow \infty$	براكت Brackett	IR moyen	2630 – 4050
5	$6 \rightarrow \infty$	بفوند Pfund	IR lointain	7400 – ∞

في طيف الإنبعاث لذرة الهيدروجين ، العدد الموجي ينقص ويزداد طول الموجة \Leftarrow تنقص الطاقة الإشعاعية المنبعثة

حيث : $\bar{\sigma} = \frac{1}{\lambda}$ ، $E = h c \frac{1}{\lambda}$

ملاحظة: تتميز كل سلسلة طيفية بخطين أساسيين هما الخط الأول والخط الحدي .

يطلق إسم الخط الأول لسلسلة ما على الخط الذي يوافق فرق في الطاقة أصغري E_{min} أي طول موجة أعظمي λ_{max} .
تعطى عبارة العدد الموجي لهذا الخط :

$$\bar{\delta} = \frac{1}{\lambda_{max}} = Z^2 \cdot R_H \cdot \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] \Rightarrow \lambda_{max(1)} = \frac{n^2(n+1)^2}{Z^2 R_H (2n+1)}$$

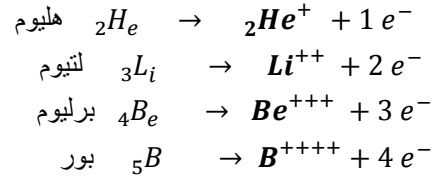
يطلق إسم الخط الحدي لسلسلة ما على الخط الذي يوافق فرق في الطاقة أعظمي E_{max} أي طول موجة أصغري λ_{min}
تعطى عبارة العدد الموجي لهذا الخط :

$$\bar{\delta} = \frac{1}{\lambda_{min}} = Z^2 \cdot R_H \cdot \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\infty^2} \right] \Rightarrow \lambda_{min(\infty)} = \frac{n^2}{Z^2 R_H}$$

III. نموذج بور الذري: يقتصر هذا النموذج على دراسة الأنظمة ذات الإلكترون الواحد أي ذرة الهيدروجين $1H$ و أشباه الهيدروجين (هيدروجينويد).

أشبه الهيدروجين عبارة عن شوارد تتشابه مع الهيدروجين في عدد الإلكترونات و تختلف معه في عدد البروتونات.

أهم أشباه الهيدروجين : $2He^+$, $3Li^{+2}$, $4Be^{+3}$, $5B^{+4}$

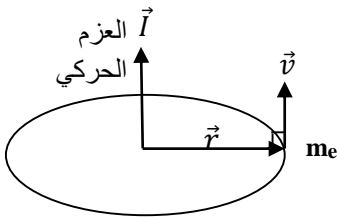


إقتراح بور نموذجا ذريا الذي من خلاله يمكن أن نجد بدقة خطوط الإنبعاث للهيدروجين إنطلاقا من النتائج التي توحي بأن طاقة الإشعاع غير مستمرة وإنما تكون على شكل كمات متقطعة من الطاقة (النظرية الكمية).

مضمون نظرية بور: لتفسير طيف الهيدروجين ، صاغ بور مبادئ أساسية على شكل مسلمات (فرضيات) غير مبرهنة ولكن يُحتمل أن تكون صحيحة بحسن النتائج المستخرجة منها.

الفرضية 1: المدار الذي يوجد فيه الإلكترون له طاقة ثابتة ولا يستطيع الإلكترون أن يدور حول النواة في أي مدار بل يدور في مدارات مستقرة وخلال دورانه لا يمتص ولا يصدر أشعة (أي يحافظ على طاقته في هذا المدار).

الفرضية 2 (التكمم): لا يمكن أن يأخذ العزم الدائري الحركي للإلكترون (وهو عزم كمية الحركة $m_e v$ بالنسبة للمدار ذي نصف القطر r) إلا قيما محددة ومساوية إلى أضعاف القيمة $\frac{h}{2\pi}$.



$$\begin{aligned} \vec{I} &= \vec{r} \wedge \vec{p} \Rightarrow \vec{I} = \vec{r} \wedge m_e \vec{v} \\ \|\vec{I}\| &= \|\vec{r}\| \cdot m_e \|\vec{v}\| \cdot \sin(\vec{r}, \vec{v}) \quad , \quad \vec{r} \perp \vec{v} \\ \Rightarrow \|\vec{I}\| &= r \cdot m_e v \cdot \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \\ \Rightarrow I &= m_e \cdot v \cdot r = n \frac{h}{2\pi} \end{aligned}$$

n: عدد صحيح (1, 2, 3,) يدعى بالعدد الكمي الرئيسي (nombre quantique) .

الفرضية 3 (الانتقال الكمومي): لا يمكن للإلكترون أن ينتقل من مدار مستقر إلى مدار آخر مستقر إلا بإمتصاصه أو إصداره

لطاقة تساوي الفرق الطاقي بين المدارين، حيث الفرق في الطاقة بين مدارين يساوي : $\Delta E = |E_f - E_i| = h \bar{\delta}$

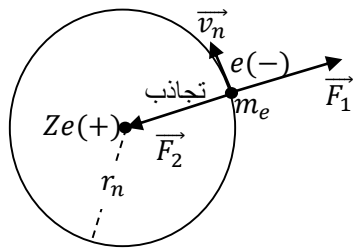
E_f : طاقة المدار النهائي .

E_i : طاقة المدار الابتدائي .

وعلى هذا الأساس فإن الإلكترون ذو الكتلة m_e و السرعة v ينتقل في مدارات مستقرة تبعد عن النواة بـ r_n .

1. تعيين نصف القطر r_n :

هذا الإلكترون الوحيد يكون خاضعا للقوتين \vec{F}_1 و \vec{F}_2 المتساويتين و المتعاكستين في الإتجاه بحيث : $\vec{F}_1 + \vec{F}_2 = \vec{0}$



$$\text{القوة الطاردة المركزية : } \vec{F}_1 \equiv \vec{F}_c = \frac{m_e v_n^2}{r_n}$$

$$\text{القوة الكولومبية : } \vec{F}_2 \equiv \vec{F}_{cb} = \frac{kZe^2}{r_n^2}$$

حيث :

Z : شحنة النواة أي ($Z = 1$) بالنسبة لذرة الهيدروجين

K : مقدار ثابت ويساوي ($K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9$) في نظام MKSA ويساوي ($K = 1$) في نظام CGS

ϵ_0 : سماحية الوسط حيث ($\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}$) في نظام MKSA

$$\|\vec{F}_c\| = \|\vec{F}_{cb}\| \Leftrightarrow \frac{m_e v_n^2}{r_n} = \frac{kZe^2}{r_n^2} \Rightarrow m_e v_n^2 = \frac{kZe^2}{r_n} \dots \dots \dots (1)$$

من الفرضية (2) ليور لدينا :

$$m_e v_n \cdot r_n = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow v_n = \frac{n h}{2\pi \cdot m_e \cdot r_n} \dots \dots \dots (2)$$

بتعويض (2) في (1) نجد :

$$m_e \left(\frac{nh}{2\pi m_e r_n} \right)^2 = \frac{kZe^2}{r_n}$$

$$\Rightarrow r_n = \frac{n^2}{Z} \left(\frac{h^2}{4\pi^2 k m_e e^2} \right) \dots \dots \dots (3) \quad \text{ou} \quad r_n = \frac{n^2}{Z} \left(\frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} \right)$$

نرمز بـ a_1 إلى نصف القطر الأول لذرة الهيدروجين (الحالة الأساسية $n = 1$), $z = 1$, نعوض في (3) نجد :

$$r_1 = a_1 = \frac{(6,62 \times 10^{-34})^2}{4 \times 10 \times (9 \times 10^9) \times 9,1 \times 10^{-31} \times (1,6 \times 10^{-19})^2} = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$a_1 = 0,53 \text{ \AA}$$

ومنه نصف قطر ذرة بور الخاصة بالهيدروجين في حالتها الأساسية تساوي دوماً $a_1 = 0,53 \text{ \AA}$ وبصفة عامة يكون :

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_1$$

وهي العبارة العامة التي تحسب منها أنصاف أقطار أي مدار خاص بالـ H وأشبه الهيدروجين مثل :

$r_1 = \frac{1^2}{2} \times 0,53 = 0,265 \text{ \AA}$: الهيليوم ${}^4_2\text{H}^+$	$r_1 = 0,53 \text{ \AA}$: الهيدروجين ${}^1_1\text{H}$
$r_2 = \frac{4}{2} \times 0,53 = 1,06 \text{ \AA}$		$r_2 = \frac{2^2}{1} \times 0,53 = 2,12 \text{ \AA}$	
$r_3 = \frac{9}{2} \times 0,53 = 2,385 \text{ \AA}$		$r_3 = \frac{3^2}{1} \times 0,53 = 4,77 \text{ \AA}$	

2. تعيين سرعة الإلكترون v_n :

من الفرضية (2) ليور لدينا :

$$m_e v_n \cdot r_n = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow v_n = \frac{n h}{2\pi \cdot m_e \cdot r_n}$$

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_1$$

ولدينا :

$$\Rightarrow v_n = \frac{z}{n} \frac{h}{2\pi \cdot m_e \cdot a_1} \dots \dots \dots (4)$$

نرمز بـ v_1 لسرعة الإلكترون الخاص بذرة الهيدروجين في حالتها الأساسية ($z = 1, n = 1$):
 $6,62 \times 10^{-34}$

$$v_1 = \frac{h}{2 \times 3,14 \times 9,1 \times 10^{-31} \times 0,53 \times 10^{-10}}$$

$$v_1 = 2,18 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$v_1 = \frac{h}{2\pi \cdot m_e \cdot a_1} \dots \dots \dots (5) \quad \text{لدينا :}$$

$$v_n = \frac{z}{n} v_1 \quad \text{نعوض في (4) نجد :}$$

وهي العبارة العامة لحساب سرعة الإلكترون الخاصة بذرة H أو أشباه الهيدروجين في أي مدار يشغله الإلكترون وذلك حسب نظرية بور مثل :

$$v_1 = \frac{2}{1} \times 2,18 \times 10^6 = 4,36 \times 10^6 \text{ m/s} : \text{الهيليوم } {}^4\text{H}_e^+ \quad v_1 = 2,18 \times 10^6 \text{ m/s} : \text{الهيدروجين } {}^1\text{H}$$

$$v_2 = \frac{2}{2} \times 2,18 \times 10^6 = 2,18 \times 10^6 \text{ m/s} \quad v_2 = \frac{1}{2} \times 2,18 \times 10^6 = 1,09 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$v_3 = \frac{2}{3} \times 2,18 \times 10^6 = 1,45 \times 10^6 \text{ m/s} \quad v_3 = \frac{1}{3} \times 2,18 \times 10^6 = 0,73 \times 10^6 \text{ m/s}$$

3. تعيين طاقة الإلكترون الكلية E_n :

من الفرضية (1) لبور (المدارات مستقرة) يعني أن طاقة الإلكترون في أي نقطة منه ثابتة. الإلكترون في المدار المستقر له طاقة حركية E_c وطاقة كامنة E_p .

الطاقة الحركية E_c :

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v_n^2$$

$$m_e v_n^2 = \frac{kZe^2}{r_n} \quad \text{من (1) لدينا :}$$

$$\Rightarrow E_c = \frac{kZe^2}{2 r_n} \dots \dots \dots (6)$$

وهي العبارة العامة التي نحسب منها الطاقة الحركية للإلكترون لذرة H أو أشباه الهيدروجين في أي مدار نصف قطره r_n حيث :

$$r_n = \frac{n^2}{z} a_1$$

الطاقة الكامنة E_p : تساوي الطاقة الكامنة العمل اللازم بذله لنقل إلكتروننا ذو شحنة سالبة من اللانهاية حتى مسافة قدرها r من النواة مع احتمال أن الإلكترون يوجد في اللانهاية ويقرب من النواة.

$$dw = \vec{F}_{cb} \cdot dr$$

$$w = E_p = \int_r^\infty \vec{F}_{cb} \cdot dr$$

\vec{F}_{cb} : القوة الجاذبة المتجهة من المدار نحو النواة.

$$E_p = \int_r^\infty -\frac{kZe^2}{r_n^2} dr \quad \Leftrightarrow \quad E_p = -kZe^2 \int_r^\infty \frac{1}{r^2} dr$$

$$\Rightarrow E_p = -kZe^2 \left[\frac{-1}{r} \right]_r^\infty \quad \Rightarrow \quad E_p = -kZe^2 \left[\frac{-1}{\infty} - \left(\frac{-1}{r} \right) \right]$$

$$E_p = \frac{-kZe^2}{r_n} \dots \dots \dots (7), \quad r_n = \frac{n^2}{z} a_1$$

وهي العبارة العامة التي نحسب منها الطاقة الكامنة للإلكترون لذرة H أو أشباه الهيدروجين في أي مدار حسب بور.

الطاقة الكلية E_n :

$$E_n = E_c + E_p = \frac{kZe^2}{2 r_n} - \frac{kZe^2}{r_n} \cdot \frac{2}{2}$$

$$E_n = - \frac{kZe^2}{2r_n}$$

من (3) لدينا :

$$r_n = \frac{n^2}{z} \cdot \frac{h^2}{4\pi^2 k m_e e^2}$$

نعوض (3) في (8) نجد :

$$E_n = \frac{z^2}{n^2} \cdot \frac{-2\pi^2 k^2 m_e e^4}{h^2} \dots \dots \dots (9) \quad \text{ou : } E_n = \frac{z^2}{n^2} \cdot \frac{-m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2}$$

و هي العبارة العامة لحساب الطاقة لإلكترون ذرة بور في أي مدار n.

نرمز بـ E_1 لطاقة إلكترون ذرة الهيدروجين أو أشباه الهيدروجين في الحالة الأساسية ($n = 1, Z = 1$)

$$E_1 = \frac{-2 \times 10 \times (9 \times 10^9) \times 9,1 \times 10^{-31} \times (1,6 \times 10^{-19})^4}{(6,62 \times 10^{-34})^2} = -13,6 \text{ eV}$$

$$\text{donc : } E_1 = \frac{-2\pi^2 k^2 m_e e^4}{h^2}$$

نعوض في (9) نجد :

$$E_n = \frac{z^2}{n^2} \cdot E_1 \dots \dots \dots (10)$$

و هي عبارة الطاقة الكلية حسب بور وعلى هذا الأساس يمكن حساب طاقة المستويات لذرة الهيدروجين حسب نظرية بور.

$$E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

حساب E_n لـ $1H$: طاقة المستوى الأساسي

$$E_2 = \frac{1}{2^2} (-13,6) = -3,4 \text{ eV}$$

$$E_3 = \frac{1}{3^2} (-13,6) = -1,51 \text{ eV}$$

$$E_\infty = 0$$

حساب E_n لـ $2He^+$:

$$E_1 = \frac{2^2}{1^2} (-13,6) = -54,4 \text{ eV}$$

$$E_2 = \frac{2^2}{2^2} (-13,6) = -13,6 \text{ eV}$$

$$E_3 = \frac{2^2}{3^2} (-13,6) = -6,04 \text{ eV}$$

$$E_\infty = 0$$

بصفة عامة :

$$r_n = \frac{n^2}{z} a_1 \quad , \quad a_1 = 0,53A^0$$

$$v_n = \frac{z}{n} v_1 \quad , \quad v_1 = 2,18 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$r_n = \frac{z^2}{n^2} E_1 \quad , \quad E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

4. علاقة الطاقة بطيف الإمتصاص أو بطيف الإنبعث:

حسب الفرضية (3) لبور ينتقل الإلكترون من مدار ذو طاقة محددة إلى مدار آخر ذو طاقة محددة كذلك بإمتصاصه أو بإنبعاثه لكمية من الطاقة تساوي الفرق الطاقي للمدارين.

$$\Delta E = |E_f - E_i| = h\delta$$

وعليه من أجل مستويين محددين بـ n_1 و n_2 حيث $n_2 > n_1$ فإن :

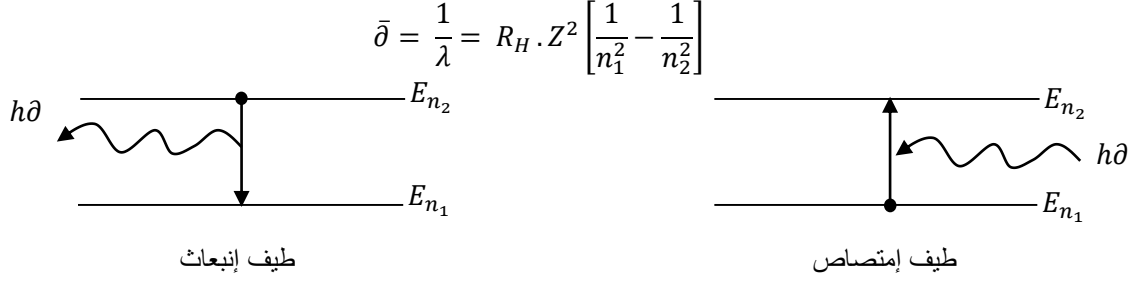
$$E_{n1} = \frac{z^2}{n_1^2} \left(\frac{-k^2 \cdot 2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \right) \quad , \quad E_{n2} = \frac{z^2}{n_2^2} \left(\frac{-k^2 \cdot 2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \right)$$

$$\Delta E = h\delta = \frac{hc}{\lambda} = E_{n2} - E_{n1} = \frac{z^2 k^2 2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\Rightarrow \bar{\delta} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc} = \frac{z^2 k^2 2\pi^2 m_e e^4}{h^3 c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = z^2 \cdot R_{Hcal} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad R_{Hcal} = \frac{k^2 2\pi^2 m_e e^4}{h^3 c}$$

ومن هذا نستخلص بأن نظرية بور تؤدي إلى علاقة بالمر التجريبية المذكورة سابقا :
 وهي القيمة المحسوبة لثابت ريديرغ الخاص بذرة H حسب نظرية بور وتساوي $R_{Hcal} = 1,09738 \times 10^7 m^{-1}$
 $R_H = 0,056 \%$ تقريبا من القيمة التجريبية ($R_{Hexp} = 1,096776 \times 10^7 m^{-1} \approx 1,1 \times 10^7 m^{-1}$) مما يؤكد صحة نظرية بور.



5. الحالة الأساسية والحالة المثيجة - التأين - :

تبين علاقة حساب نصف القطر $r_n = \frac{n^2}{Z} a_1$ تصاعد قيم أنصاف الأقطار بتزايد n وكذلك الطاقة الكلية :

$$r_1 > r_2 > r_3 > \dots > r_\infty$$

$$E_1 > E_2 > E_3 > \dots > E_\infty$$

مع $Z > 1$ في حالة أشباه H

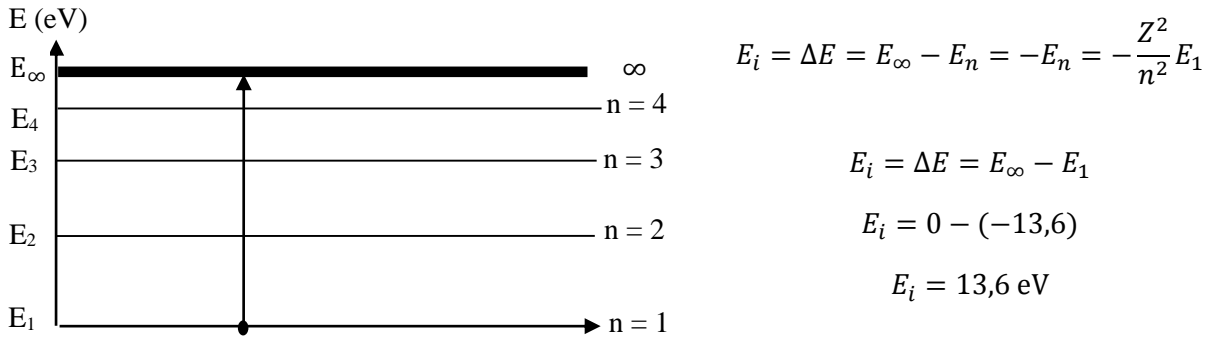
الحالة الأساسية : الإلكترون في ذرة H وأشباه H وفي عدم وجود فعل خارجي يحتل المدار الأكثر إستقرارا لأصغر قيمة طاقوية أي المدار المميز بـ $n = 1$ ونقول أن الذرة في الحالة الأساسية.

الحالة المثيجة (الحالة غير المستقرة) : عندما يمتص الإلكترون طاقة $\Delta E = h\delta$ و يقفز إلى مدار ذو طاقة أكبر من طاقة المدار الابتدائي فنقول بأن الذرة مثيجة أي غير مستقرة.
 الإنتقال إلى المدار 2 يوافق حالة الإثارة الأولى
 الإنتقال إلى المدار 3 يوافق حالة الإثارة الثانية إلخ.

التأين : يلاحظ أنه كلما قفز الإلكترون إلى مستوى طاقي أكبر كلما قل إرتباطه بالنواة (أي قوة كولونب تنقص) وعندما يصل إلى مدار لا نهاية r_∞ يفصل الإلكترون تماما عن النواة ($F_{cb} = 0$: القوة الجاذبة) فنحصل على شاردة H^+ في حالة الهيدروجين وإلكترون حرا وسرعة منعدمة، ونقول في هذه الحالة بأن ذرة الهيدروجين متأينة.



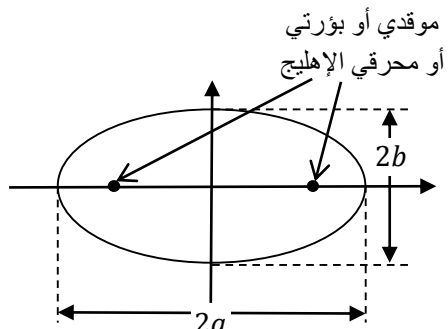
يعبر عن الطاقة اللازمة لنزع الإلكترون بـ E_i : طاقة التأين Energie d'ionisation و هي طاقة موجبة.



إنتقال الـ e^- من المستوى $n = 1$ إلى $n = \infty$

IV. نموذج سومرفيلد Model atomique de Sammer Field :

رغم النتائج المعتمدة المتحصل عليها بواسطة نظرية بور التي فسرت طيف الهيدروجين وأشبه الهيدروجين باعتمادها على العدد الكمي n (طاقة مكمّمة) إلا أنه إتضح أن طيف العناصر الكيميائية وحتى الهيدروجين وأشبه الهيدروجين أكثر تعقيدا مما تصوره بور حيث عند خضوع ذرات غاز الهيدروجين مثلا لمجال مغناطيسي يلاحظ تضاعف الخطوط الطيفية التي كانت من قبل على شكل خطوط بسيطة وكل خط من خطوط الطيف تقريبا عبارة عن خطوط مقتربة من بعضها البعض وهذا يفسر التركيب المعقد لطيف العنصر المدروس. نظرية بور لم تتطرق لهذه الظاهرة ، ولتفسيرها إقترح سومرفيلد نموذجا ذريا يصور فيه مسار الإلكترون بالإضافة إلى المسار الدائري لبور، مدارات (مسارات) إهليجية (أو بيضوية) وكذلك إدخال عددين كميين لتوضيح حركة الإلكترون الكاملة.



يعرف الإهليج بـ :

- محورين : محور كبير $2a$ و محور صغير $2b$
- موقدين : النواة تحتل أحد الموقدين
- السطح : يعبر عنه بالعلاقة التالية :

$$\frac{2b}{2a} = \frac{b}{a} \leq 1$$

قيمة الإنحراف : شكل الإهليج يكون أكثر دورانية (دائرة) كلما إقتربت قيمة b من a .

توصل سومرفيلد للنتائج التالية :

1. العدد الكمي الرئيسي n : هو نفس العدد الكمي في نظرية بور حيث تتوزع الإلكترونات في مدارات مستقرة ، تعرف هذه المدارات الإلكترونية بالطبقات ونرمز لها بالأحرف اللاتينية: K, L, M, N, O, P, Q بهذا الترتيب وكل طبقة توافق مستوى طاقي يحدده رقم الكم الرئيسي n حيث : $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$

- مثل: الطبقة الإلكترونية K توافق $n = 1$
 الطبقة الإلكترونية L توافق $n = 2$
 الطبقة الإلكترونية M توافق $n = 3$

يشترط على المحاور الكبيرة للمسارات الإهليجية أن تحقق العلاقة التالية : لكل قيمة لـ n يوافق محور كبير a بحيث :

$$a = r_n = \frac{n^2}{Z} a_1$$

r_n : نصف قطر بور للمدار الموافق لـ n .

كل المسارات الإهليجية أو الدائرية التي تملك نفس العدد الكمي الرئيسي n لها نفس الطاقة و هذه الطاقة هي نفسها المحصل عليها في نظرية بور.

$$E_n = \frac{Z^2 E_1}{n^2} \leftarrow \text{ لكل قيمة لـ } n$$

Z : شحنة النواة

E_1 : طاقة الإلكترون في ذرة الهيدروجين $n=1$ (الحالة الأساسية).

المسارات التي تملك نفس العدد n تكون طبقة طاقيّة أو إلكترونية Couche .

2. العدد الكمي الثانوي : أو العدد السمتي Azimutal ويدل هذا العدد على مقدار إنحراف المسار البيضوي عن الدائري أي يحدد شكل المسار (المدار) الذي يوجد فيه الإلكترون فهو يعرف الطبقة الثانوية.

$$\frac{b}{a} = \frac{l+1}{n} \quad \text{السطح يخضع إلى شرط وهو :}$$

$$\text{لما } a = b \leftarrow \text{ المسار يكون دائري أي : } \frac{b}{a} = 1$$

$$0 < \frac{b}{a} \leq 1 \Rightarrow 0 < \frac{l+1}{n} \leq 1 \Rightarrow 0 < l+1 \leq n \Rightarrow -1 < l \leq n-1$$

$$\Rightarrow l \in [0, n-1]$$

l : عدد طبيعي تتراوح قيمته ما بين $0, n-1$ ،

لكل قيمة لـ n توجد n قيمة لـ l : $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

وكل قيمة لـ l توافق شكل واحد

K	⇒	الطبقة الأولى	$n = 1$	$l = 0$	⇒	شكل واحد
L	⇒	الطبقة الثانية	$n = 2$	$l = 0, 1$	⇒	شكليين ≠
M	⇒	الطبقة الثالثة	$n = 3$	$l = 0, 1, 2$	⇒	3 أشكال ≠

فنفول بأن كل قيمة لـ l توافق طبقة ثانوية (أو طبقة تحتية) وأن العدد الكمي الرئيسي n يجمع الطبقات الثانوية في طبقة رئيسية واحدة.

من أجل قيمة لـ n ← توافق طبقة رئيسية تتكون من n قيمة لـ l أي شكل مداري (n طبقة تحتية).	
طبقة رئيسية $n = 1$ ←	طبقة تحتية $l = 0$
طبقة رئيسية $n = 2$ ←	طبقتان تحتيتان $l = 0, 1$
طبقة رئيسية n ←	طبقة تحتية $l = 0, 1, 2, 3 \dots, n - 1$

مثال : أحسب نصف القطرين الكبير a والصغير b للمسارات المختلفة في الطبقات الإلكترونية K, L, M بالنسبة لذرة الهيدروجين.
الحل :

$$* K \Rightarrow n = 1 \Rightarrow l = 0$$

$$a = r_1 = \frac{n^2}{z} a_1 = \frac{1^2}{1} \times 0,53 = 0,53 \text{ \AA}$$

$$\frac{b}{a} = \frac{l+1}{n} \Rightarrow \frac{b}{a} = \frac{0+1}{1} = 1 \Rightarrow a = b = 0,53 \text{ \AA} \quad \text{مسار وحيد ودائري}$$

$$* L \Rightarrow n = 2 \Rightarrow l = 0, 1$$

$$1) l = 0$$

$$a = r_2 = \frac{n^2}{z} a_1 = \frac{2^2}{1} \times 0,53 = 2,12 \text{ \AA}$$

$$\frac{b}{a} = \frac{l+1}{n} \Rightarrow \frac{b}{a} = \frac{1}{2} \Rightarrow a = 2b \Rightarrow b = \frac{a}{2} = 1,06 \text{ \AA} \quad \text{المسار بيضوي}$$

$$2) l = 1$$

$$a = r_2 = 2,12 \text{ \AA}$$

$$\frac{b}{a} = \frac{l+1}{n} \Rightarrow \frac{b}{a} = \frac{1+1}{2} = 1 \Rightarrow a = b = 2,12 \text{ \AA} \quad \text{المسار دائري}$$

$$* M \Rightarrow n = 3 \Rightarrow l = 0, 1, 2$$

$$1) l = 0$$

$$a = r_3 = \frac{n^2}{z} a_1 = \frac{3^2}{1} \times 0,53 = 4,77 \text{ \AA}$$

$$\frac{b}{a} = \frac{l+1}{n} \Rightarrow \frac{b}{a} = \frac{1}{3} \Rightarrow b = \frac{a}{3} = 1,59 \text{ \AA} \quad \text{المسار بيضوي أكثر تسطح}$$

$$2) l = 1$$

$$a = r_3 = 4,77 \text{ \AA}$$

$$\frac{b}{a} = \frac{l+1}{n} \Rightarrow \frac{b}{a} = \frac{1+1}{3} = 1 \Rightarrow b = \frac{2a}{3} = 3,18 \text{ \AA} \quad \text{المسار بيضوي أقل تسطح}$$

$$3) l = 2$$

$$a = r_3 = 4,77 \text{ \AA}$$

$$\frac{b}{a} = \frac{l+1}{n} \Rightarrow \frac{b}{a} = \frac{2+1}{3} = 1 \Rightarrow a = b = 4,77 \text{ \AA} \quad \text{المسار دائري}$$

3. العدد الكمي المغناطيسي m فعل زيمان Effet Zeman :

يلاحظ فعل زيمان عندما تخضع ذرات الغاز إلى فعل مجال مغناطيسي خارجي فيلاحظ تضاعف خطوط الطيف بحيث تفسر هذه الظاهرة بأن مسارات الإلكترون تأخذ اتجاهات مختلفة في وجود هذا المجال المغناطيسي تكوّن زاوية الانحراف (وهي الزاوية التي يصنعها محور العزم الحركي مع محور الحقل المغناطيسي الخارجي) وقد وجد أنها تتعلق بـ l و m .



غياب المجال المغناطيسي \vec{B}
محور المسار هو إتجاه العزم الحركي

تحت تأثير \vec{B}

تحت تأثير المجال المغناطيسي \vec{B} ، محور العزم الحركي الذي هو محور المدار يأخذ إتجاه معين أي موافق لقيمة محددة .
m : العدد الكمي المغناطيسي ويكون زاوية θ مع محور \vec{B} .
تعطى قيم الزاوية θ بالعلاقة التالية : $\cos \theta = \frac{m}{l}$

m : العدد الكمي المغناطيسي

l : العدد الكمي الثانوي

m : عدد صحيح رئيسي يأخذ القيم بين $-l$ و $+l$ بحيث : $m = l \cos \theta$ أي : $-l \leq m \leq +l$.
 $\sum m = 2l + 1$: قيم m هي : $m = -l, \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots, +l$

كل قيمة لـ m توافق إتجاه يحدد أي يوافق فلكا أو أربيطال.

مثال : حدد زاوية الإنحراف عند تطبيق مجال مغناطيسي خارجي على الطبقة الالكترونية M .
الحل :

$$* M \Rightarrow n = 3 \Rightarrow l = 0, 1, 2$$

$$1) l = 0 \Rightarrow m = 0 \quad 3s \quad \text{اتجاه واحد}$$

$$m = l \cos \theta \Rightarrow \cos \theta = \frac{0}{0} \Rightarrow \text{اتجاه غير معروف}$$

$$2) l = 1 \Rightarrow m = -1, 0, 1 \quad 3p_x, 3p_z, 3p_y$$

$$\cos \theta = \frac{m}{l}$$

$$m = -1 \Rightarrow \cos \theta = -1 \Rightarrow \theta = \pi$$

$$m = 0 \Rightarrow \cos \theta = 0 \Rightarrow \theta = \pi/2$$

$$m = +1 \Rightarrow \cos \theta = +1 \Rightarrow \theta = 0$$

توجد 3 اتجاهات وبما أن $l = 1$ يمثل المسار $3p \Leftarrow$ الطبقة التحتية $3p$ مكونة من 3 أربيطالات ذات اتجاهات مختلفة
 $3p_x, 3p_z, 3p_y$ في نفس الطبقة الثانوية

$$3) l = 2 \Rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2 \quad 3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{z^2}, 3d_{yz}, 3d_{x^2-y^2}$$

$$\cos \theta = \frac{m}{l}$$

$$m = -2 \Rightarrow \cos \theta = -1 \Rightarrow \theta = \pi$$

$$m = -1 \Rightarrow \cos \theta = -1/2 \Rightarrow \theta = 3\pi/4$$

$$m = 0 \Rightarrow \cos \theta = 0 \Rightarrow \theta = \pi/2$$

$$m = +1 \Rightarrow \cos \theta = +1/2 \Rightarrow \theta = \pi/4$$

$$m = +2 \Rightarrow \cos \theta = +1 \Rightarrow \theta = 0$$

توجد 5 اتجاهات مختلفة في نفس الطبقة الثانوية المعرفة بـ $l = 2$ أي $3d$ مكونة من 5 أربيطالات :
 $3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{z^2}, 3d_{yz}, 3d_{x^2-y^2}$

4. العدد الكمي اللفي s : لقد وجد تجريبيا أن الإلكترون وهو في مساره ، يلف كذلك حول نفسه. يسمى دوران الإلكترون حول نفسه بالدوران s حيث توجد قيمتين فقط لهذا الرقم الكمي اللفي هما $S = \frac{1}{2}$, $S = -\frac{1}{2}$ مهما كانت الطبقة الإلكترونية التي يوجد بها الإلكترون.

الطبقة الرئيسية	رقم الكم الرئيسي n	رقم الكم الثانوي $l \in [0, n - 1]$	رمز الطبقة الثانوية (التحتية)	رقم الكم المغناطيسي $-l \leq m \leq +l$	رقم الكم اللفي s
K	n = 1	l = 0	1s	m = 0	$S = \frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$
L	n = 2	l = 0 l = 1	2s 2p	m = 0 m = -1 , 0 , 1 m = 2p _x , 2p _z , 2p _y	//
M	n = 3	l = 0 l = 1 l = 2	3s 3p 3d	m = 0 m = -1 , 0 , 1 m = -2,-1,0,1,2	//
N	n = 4	l = 0 l = 1 l = 2 l = 3	4s 4p 4d 4f	m = 0 m = -1 , 0 , 1 m = -2,-1,0,1,2 m = -3,-2,-1,0,1,2,3	//