الفصل الثالث: البنية الإلكترونية للمادة

1. الأرقام الكمية

أرقام الكم هي إحداثيات الإلكترون في الذرة، تماماً كما المدينة والحي والشارع والرقم هم عنوان المنزل، فهي أرقام تحدد أحجام الحيز من الفراغ الذي يكون احتمال تواجد الإلكترونات فيه أكبر، كما تحدد طاقة المدارات وأشكالها وإتجاهاتها بالنسبة لمحاور الذرّة في الفراغ، و هي (n, l, m, s). يمكن أن تأخذ الأرقام الكمية بعض القيم المسموح بها.

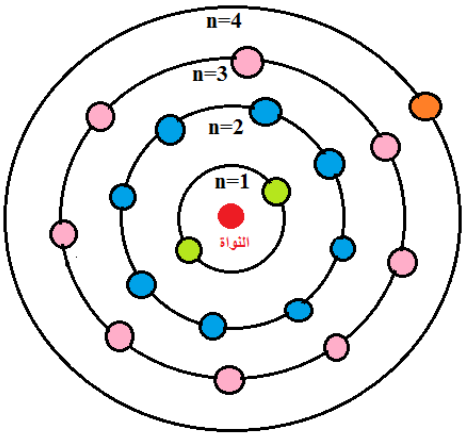
1.1. الرقم الكمي الرئيسي "n"

رقم طبيعي موجب ($n\in IN^*$) و هو يحدد طاقة الإلكترون في المدار. كلما زادت قيمة n ، زادت طاقة الإلكترون. و زادت المسافة التي تفصل الإلكترون عن النواة بسبب زيادة قطر المدار. عادة، يتم تحديد مستويات الطاقة بالحروف: K، L، M ،....كل مستوى (أو طبقة -couche) يتوافق مع $2n^2$ إلكترون كحد أقصى.

رقم الكم الرئيسي	رمز الطبقة الإلكترونية	عدد المدارات n^2	عدد الإلكترونات $2n^2$
1	K	1	2
2	L	4	8
3	M	9	18
4	N	16	32

لا تنطبق الصيغة $2n^2$ عمومًا على أر الكم الرئيسية الأكبر من أو تساوي خمسة ($n\geq5$) ؛ وذلك لأنه في هده الحالة طبقات الالكترونات تحتوي على طبقات فرعية لا تشغلها إلكترونات أيِّ عناصر كيميائية معروفة.

مثال : البوتاسيوم $_{19}k$



الشكل 7 : توزيع الالكترونات لعنصر $_{19}K$

2.1. الرقم الكمي الثانوي "l"

يتم اعتماد الرقم الكمي الثانوي "l" لأن الإلكترونات من نفس المستوى أو الطبقة "n" يمكن أن تشغل مستويات طاقة مختلفة قليلاً تسمى المستويات الفرعية أو الطبقات الفرعية (sous couches). لذلك، كلما زادت قيمة n كلما كان هناك المزيد من الطبقات الفرعية. إن القيم التي يأخذها الرقم الكمي الثانوي l هي قيم الأعداد الطبيعية الموجبة المحصورة بين 0 و n -1 **$(0 \leq l \leq n-1)$** .

مختلف أنواع الطبقات الفرعية هي :

العدد الكمي الثانوي "l"	الطبقة الفرعية (sous couches)
0	**s**
1	**p**
2	**d**
3	**f**

مثال :

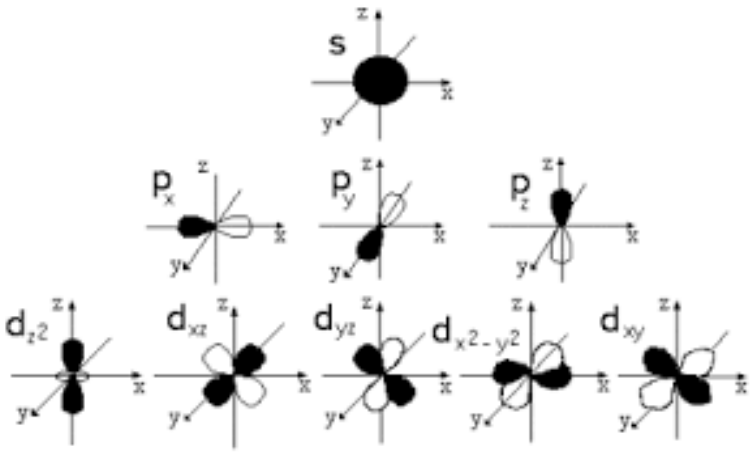
n	l	
1	0	**s**
2	0	**s**
	1	**p**

3.1. الرقم الكمي المغناطيسي "m"

الرقم الكم المغناطيسي "m" يحدد اتجاه العزم المغناطيسي لمدار الإلكترون، ويعتمد على قيمة رقم الكم الثانوي ويأخذ جميع القيم المحصورة بين -l و +l **$(-l \leq m \leq +l)$** و من أجل كل قيمة ل l يأخذ m : 2l+1 قيمة. يذكر أن الإلكترونات التي لها نفس قيم n و l لكن قيم m مختلفة لها نفس الطاقة.

مثال :

عدد المدارات الذرية	رقم الكم المغناطيسي "m"	الطبقة الفرعية (sous couches)	رقم الكم الثانوي "l"
مدار ذري واحد	**m=0**	**s**	l=0
ثلاث مدارات ذرية	**m=-1,0,+1**	**p**	l=1
خمس مدارات ذرية	**m=-2,-1,0, +1,+2**	**d**	l=2
سبع مدارات ذرية	**m=-3, -2,-1 ,0, +1, +2, +3**	**f**	l=3



تمثيل المدارات الذرية

4.1. الرقم الكمي المغزلي "s"

الرقم الكمي المغزلي يحدد حالتين محتملتين لدوران الإلكترون حول نفسه حيث ينتج الإلكترون مجالًا مغناطيسيًا له اتجاهين متعاكسين. و يأخذ القيم +1/2 أو -1/2 .

s = +1/2 يرمز لها ب ↓ أو s = -1/2 و يرمز لها ب↑

- **تمثيل المدارات بالحجيرات الكمية:** يُعرَّف **المدار** الذري بأنه منطقة من الفضاء تحيط بالنواة أين لدينا احتمال كبير لإيجاد الإلكترون و يعبر عنه رمزيا بخانة مربعة الشكل ☐

مثال :

عدد المدارات	الطبقة الفرعية	m	l	n
↿⇂ 2e⁻ max	1s	0	0	**1**
↿⇂ 2e⁻ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ 6e⁻ — 8e⁻max	2s	0	0	**2**
	2p	-1, 0,+1	1	
↿⇂ 2e⁻ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ 6e⁻ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ 8e⁻ — 18e⁻max	3s	0	0	**3**
	3p	-1, 0, +1	1	
	3d	-2, -1,0, +1, +2	2	
↿⇂ 2e⁻ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ 6e⁻ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ 8e⁻ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ ↿⇂ 14e⁻ — 32e⁻max	4s	0	0	**4**
	Sp	-1, 0, +1	1	
	4d	-2, -1, 0, +1, +2	2	
	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	3	

2. مبادئ و قواعد ملء المحطات الذرية

توزيع الإلكترونات التي يساوي عددها العدد الذري **Z** لعنصر معين $^{A}_{Z}X$ داخل المدارات الذرية (أي ملء خانات المدارات بالإلكترونات) يتم بإتباع المبادئ و القواعد التالية:

1.2. قاعدة الاستبعاد لباولي (Pauli)

هذه القاعدة تقول انه من غير الممكن أن يكون لإلكترونين نفس الأعداد الكمية الأربعة. معنى ذلك أن المدار الذري الواحد يمكن أن يشغله إلكترونين كحد أقصى. بشرط أن يكون لهما عدد مغزلي متعاكس.

مثال :

$n = 1 ; s = \pm /1/2$ إذن $l = 0$ و $m = 0$

He : $1s^2$

(n,l,m,s)

(1,0,0,**+1/2**)

(1,0,0,**-1/2**)

2.2. قاعد هوند Hund

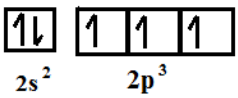
ويمكن تفصيل نص قاعدة هوند إلى قاعدتين أساسيتين، وهما:

القاعدة الأولى: تتوزع الإلكترونات أولًا بشكل منفرد في جميع مدارات الطاقة الفرعية، حتى تصبح جميع المدارات الفرعية نصف ممتلئة (كل مدار فيه إلكترون واحد فقط)، ثم تبدأ الإلكترونات بالاقتران داخل المدارات النصف ممتلئة ليصبح المدار الواحد ممتلئاً بإلكترونين، وذلك حسب التوزيع الإلكتروني للعنصر.

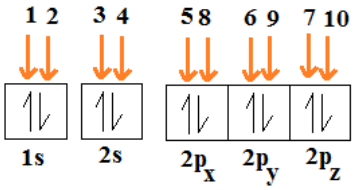
القاعدة الثانية: جميع الإلكترونات المنفردة في المدارات المشغولة لها نفس الدوران المغزلي (Spin) إما للأعلى أو للأسفل أي s= -1/2 أو s= +1/2.

مثال: لدينا ثلاثة إلكترونات في المدار p حسب قاعدة هاند يكون توزيع الالكترونات على الخانات كالتالي لأن ذلك يجعلها أكثر استقرارا.

$_{7}N$



بصفة عامة توزيع الالكترونات على الخانات يكون كالتالي :



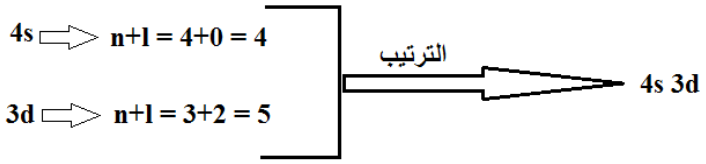
3.2. قاعدة كليشكوفسكي (Klechkowski) أو مبدأ الاستقرار

إن الحالة الأساسية للذرة هي الحالة التي تكون فيها أكثر استقرارا. و بالتالي فان الالكترونات ستبدأ بشغل المستويات الطاقوية الأقل في حدود الأماكن الشاغرة. و يكون ذلك باحترام القاعدتين التاليتين :

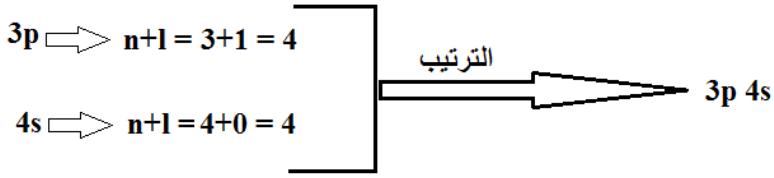
- **يتم الملء حسب n + l المتزايدة.**

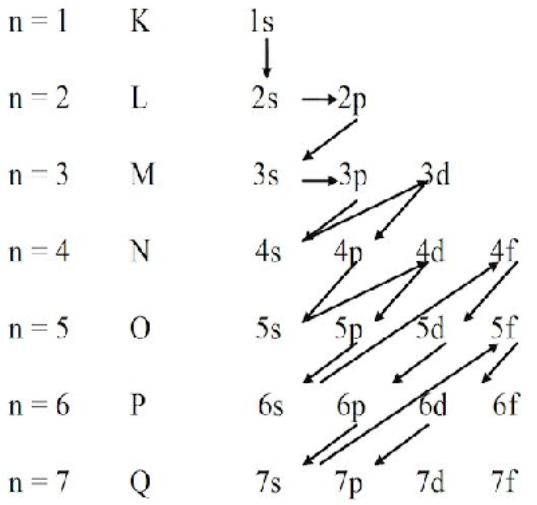
مثال :

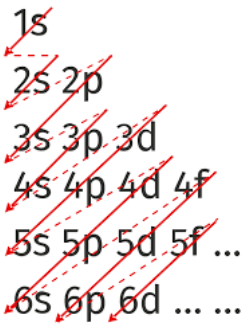
لدينا المدارين التاليين :



- **إذا كانت n + l متطابقة , يتم التوزيع حسب n المتزايدة.**
- **مثال :**
- لدينا المدارين التاليين :







قاعدة Klechkowski

مثال :

$_{14}$**Si**: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$; $_{14}Si: K^2\ L^8\ M^4$

$_{13}$**Al**: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^1$; $_{13}Al: K^2\ L^8\ M^3$

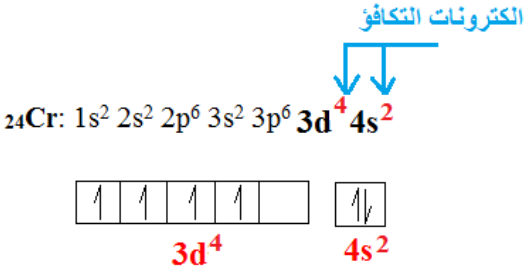
$_{8}$**O**: $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$; $_{8}O: K^2\ L^6$

ملاحظة :

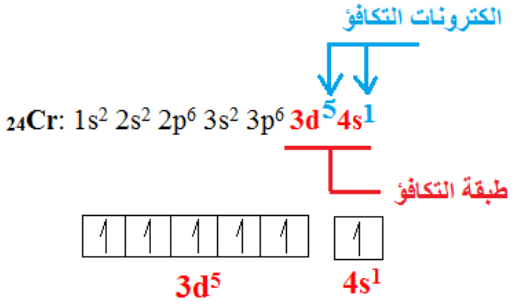
يوجد بعض الاستثناءات تخص الطبقة الفرعية d

- إن امتلاء الطبقة الفرعية نصفيا يحقق استقرارا ما للعنصرحسب قاعدة هاند

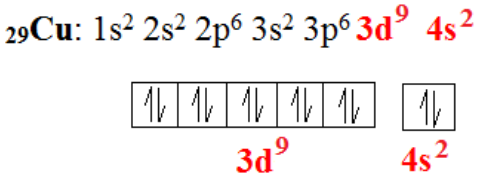
مثال :



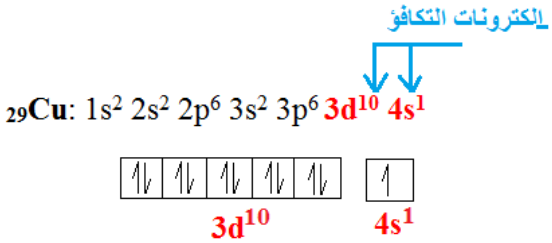
الصيغة الأكثر استقرارا :



- إن امتلاء الطبقة d يحقق للذرة استقرارا كبيرا للعنصر.



الصيغة الأكثر استقرارا:



في الحالتين تم استعمال إلكترون من الطبقة s لملء الطبقة d بهدف تحقيق استقرار اكبر للذرة.

3. التوزيع و التشكيل الإلكتروني

1.3. التوزيع الإلكتروني

يسمى ترتيب الطبقات الفرعية حسب قاعدة كلاتشكوفسكي بالتوزيع الإلكتروني.

2.3. التشكيل الإلكتروني

يسمى ترتيب الطبقات الفرعية حسب قيمة n المتزايدة بالتشكيل الإلكتروني و يستنتج من التوزيع الإلكتروني.

العنصر		التوزيع الإلكتروني	التشكيل الإلكتروني
Z < 20	$_{7}N$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^3$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^3$
	$_{14}Si$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$
	$_{19}K$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$
Z > 20	$_{21}Sc$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^1$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^1\ 4s^2$
	$_{29}Cu$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1\ 3d^{10}$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^1$
	$_{47}Ag$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6\ 4d^{10}\ 5s^1$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6\ 5s^1\ 4d^{10}$

ملاحظة : حتى العنصر **Z=20** التوزيع الإلكتروني هو نفسه التشكيل الإلكتروني.

3.3. التوزيع الإلكتروني باستعمال الغاز الخامل

الغاز الخامل هو الغاز الذي تكون طبقته الخارجية مشبعة بالإلكترونات' هذه الأخيرة لا تشارك في التفاعل الكيميائي.

الغازات الخاملة الموجودة هي :

$_{2}He$	$_{10}Ne$	$_{18}Ar$	$_{36}Kr$	$_{54}Xe$	$_{86}Rn$	$_{118}Og$
الهيليوم	النيون	الأرغون	الكربتون	الكزينون	الرادون	أوقانيسون

مثال :

$_{Z}X$	التوزيع الإلكتروني	التوزيع الإلكتروني باستعمال الغاز الخامل
$_{3}Li$:	$1s^2\ 2s^1$	$[_2He]\ 2s^1$
$_{11}Na$:	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$	$[_{10}Ne]\ 3s^1$
$_{19}K$:	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$	$[_{18}Ar]\ 4s^1$
$_{35}Br$:	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$	$[_{18}Ar]\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$
$_{51}Sb$:	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6\ 5s^2\ 4d^{10}\ 5p^3$	$[_{36}Kr]\ 5s^2\ 4d^{10}\ 5p^3$

4.3. التوزيع الإلكتروني للأيونات

للقيام بذلك ، يجب أولا تحديد التوزيع الإلكتروني للعنصر في الحالة المستقرة ، إذا كان العنصر أكتسب إلكترونًا واحدًا أو أكثر (أنيونًا) ، في هذه الحالة يتم إضافة الإلكترونات المكتسبة إلى الطبقة الخارجية (طبقة إلكترونًات التكافؤ) ، أما إذا كان فقد العنصر إلكترونًا واحدًا أو أكثر(كاتيونًا) ففي هذه الحالة يتم إزالة الإلكترونات المفقودة من الطبقة الخارجية.

ملاحظة:

على العموم العناصر تميل إلى اكتساب أو فقدان الكترونات للحصول على البنية الإلكترونية للغاز الخامل الأقرب إليها ما يعطيها استقرارا أكبر (أنظر الأمثلة اللاحقة).

مثال :

العنصر	الكاتيونات
$_{11}Na : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$	$_{11}Na^+ : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^0$
$_{13}Al : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2 3p^1$	$_{13}Al^{3+} : : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^0 3p^0$
$_{19}K : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$	$_{19}K^+ : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^0$
	الأيونات
$_{35}Br : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$	$_{35}Br^- : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6 \equiv [_{36}Kr]$
$_{17}Cl : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5$	$_{17}Cl^- : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6 \equiv [_{18}Ar]$

هذه هي الأيونات الأكثر استقرارًا التي من المحتمل أن تتشكل من أجل الحصول على الهيكل المستقر الأقرب للغاز النبيل.

4. إلكترونات القلب

هي عبارة عن إلكترونات الغاز الخامل الذي يحتويه العنصر بالإضافة إلى إلكترونات الطبقتين nf و nd إذا كانت مشبعة أي d يمتلك 10الكترونات في طبقته الخارجية (d^{10}) و f يمتلك 14 إلكترونا في طبقته الخارجية (f^{14}).

5. إلكترونات التكافؤ

هي إلكترونات الطبقات الخارجية (طبقة التكافؤ) و تشكل البنية الإلكترونية الخارجية و هي التي تساهم في تشكيل الروابط الكيميائية. على العموم إلكترونات التكافؤ هي مجموع إلكترونات الطبقتين s و pمشبعتين و غير مشبعتين بالإضافة إلى إلكترونات الطبقتين nf و nd إذا كانت غير مشبعة أي d يمتلك أقل من 10 إلكترونات في طبقته الخارجية كذلك f غير مشبع الكترونيا أي يمتلك أقل من 14 إلكترونا في طبقته الخارجية.

مثال 1:

$_ZX$	التوزيع الإلكتروني	التوزيع الإلكتروني الغاز الخامل باستعمال
$_3$Li :	$1s^2\ 2s^1$	$[_2He]$ **$2s^1$**
$_{11}$Na :	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$	$[_{10}Ne]$ **$3s^1$**
$_{19}$K :	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$	$[_{18}Ar]$ **$4s^1$**
$_{35}$Br :	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$	$[_{18}Ar]$ **$4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$**
$_{51}$Sb :	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6\ 5s^2\ 4d^{10}\ 5p^3$	$[_{36}Kr]$ **$5s^2\ 4d^{10}\ 5p^3$**

مثال 2:

$_ZX$	التشكيل الإلكتروني	إلكترونات القلب	إلكترونات التكافؤ
$_3$Li :	$[_2He]$ **$2s^1$**	2	1
$_{11}$Na :	$[_{10}Ne]$ **$3s^1$**	10	1
$_{19}$K :	$[_{18}Ar]$ **$4s^1$**	18	1
$_{35}$Br :	$[_{18}Ar]$ **$3d^{10}4s^2\ 4p^5$**	28	7
$_{51}$Sb :	$[_{36}Kr]$ **$4d^{10}5s^2\ 5p^3$**	46	5
$_{29}$Cu :	$[_{18}Ar]\ 3d^{10}4s^1$	28	1
$_{47}$Ag :	$[_{36}Kr]\ 4d^{10}5s^1$	46	1
$_{42}$Mo :	$[_{36}Kr]\ 4d^5\ 5s^1$	36	6

Dr. BOUANIMBA NOUR