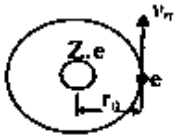
نظرية بور والقيم التي نتجت عنها:-

كما ذكرنا سابقاً فانه نتج عن نظرية بور العديد من القيم الرياضية الخاصة بالذرة حيث اختار بور ذرة الهيدروجين كنموذج ويعود السبب في ذلك لأنها ابسط الذرات التي يمكن دراستها وكما في الشكل المبسط التالي



حيث انهاعبارة عن إلكترون وحيد يدور بسرعة مقدارها (v) في مدار دائري حول نواة فيها بروتون واحد (العدد الذري Z= 1). ويؤثّر على هذا الإلكترون في أثناء دورانه حول النّواة نوعان من القوى يعمل أحدهما على إبعاد الإلكترون عن النواة ويمثل القوة الطاردة (F1) التي يولّدها دوران الإلكترون حول النّواة، وتُعطى بالعلاقة التالية ($F_1= m_e.V^2/ r$).

وأمّا النوع الآخر من القوى المؤثّرة على الإلكترون، فيعمل على تقريبه من النّواة ويتمثّل بقوّة التجاذب الكهربائي (F2) بين النّواة ذات الشّحنة الموجبة والإلكترون ذي الشّحنة السّالبة وهي تعرف بالعلاقة التالية ($F_2=Z. e^2 /r^2$) حيث تمثل (Z) العدد الذري و (e) شحنة الالكترون و(r) المسافة بين الالكترون والنواة او ما يدعى بنصف قطر المدار.

ولثبات الالكترون وتوازنه على مداره يجب ان تتساوى القوتان (F1) و (F2). وبما ان العدد الذري لذرة الهيدروجين (1) فان المعادلة تصبح كالتالي: ($m_e. V^2 = e^2 /r$). وباستخدام شرط العزم الزاوي لنظرية بور وبالتعويض عن قيمة نصف المدار (r) امكن حساب قيمة نصف قطر المدار الأول والثاني والثالث لذرة الهيدروجين.

وبالتعويض عن قيمة نصف المدار امكن حساب سرعة الالكترون (V) مع الاخذ بنظر الاعتبار شرط العزم الزاوي وقد تم إيجاد قيمة سرعة الالكترون في المدار الأول والثاني والثالث حيث لوحظ ان سرعة الالكترون تتناقص كلما ازداد البعد عن النواة وهذا يعني ان قيمة سرعة الالكترون في المدار الأول اعلى من الثاني والثاني اعلى من الثالث.

ان الطاقة الكلية للالكترون (E) وهو يدور حول نفسه وحول النواة تساوي مجموع الطاقة الحركية (E_k) والطاقة الكامنة (E_p). وتعرف الطاقة الحركية بانها الطاقة الناشئة عن عزم حركة الالكترون والتي تم احتسابها مسبقا واما الطاقة الكامنة فهي الناتجة عن التجاذب الكهربائي بين الالكترون والنواة ويتم

احتسابها عن طريق حساب قيمة الشغل الذي يبذله الالكترون عندما يقترب من النواة، وباستخدام العديد من المعادلات الرياضية امكن احتساب طاقة الالكترون وهو في المدار (n).

أوجه النجاح والقصور في نموذج بور :-

نجح نموذج بور في:

أولاً: تفسير الاطياف الذرية لذرة الهيدروجين وللذرات والايونات المشابهة مثل طيف الديتيريوم وايون الهيليوم وحساب طاقة التاين لهذه الذرات.

ثانياً: استخدم بور فكرة الكم في تحديد طاقة الإلكترونات في مستويات الطاقة المختلفة.

ثالثاً: التوفيق بين نموذج راذرفورد ونظرية ماكسويل حيث أكد نموذج بور أن الإلكترونات أثناء دورانها حول النواة في الحالة المستقرة لا تشع طاقة وبالتالي لا تسقط في النواة.

اما أوجه القصور التي كانت لدى نموذج بور فهي:

1- لم يستطع نموذج بور تفسير أطياف الذرات الأكثر تعقيدا من ذرة الهيدروجين التي تحتوي على اكثر من إلكترون واحد.

2- أفترض أن الإلكترون يدور في مدارات محددة وفي مستوى واحد حول النواة مما يعني أن ذرة الهيدروجين مسطحة مما ينافى مع ما ثبت بعد ذلك من أن الذرة مجسمة.

3- أفترض ان الإلكترون جسيم مادي ولم يعتبر الطبيعة الموجية للإلكترونات.

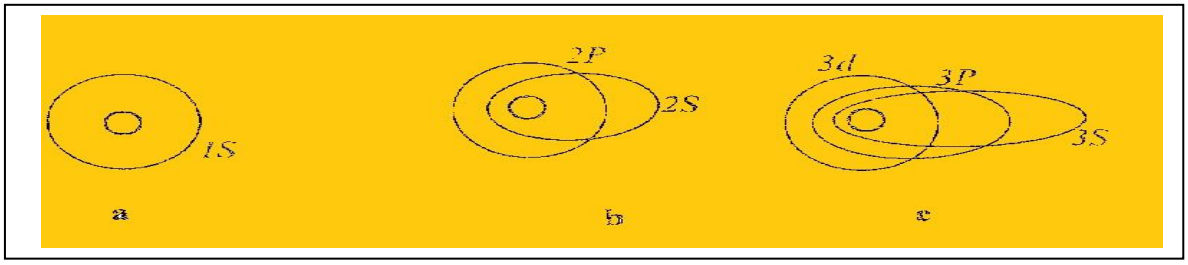
4- أفترض أن يمكن تعيين كلا من مكان وسرعة الإلكترون في نفس الوقت بدقة وهذا عمليا مستحيل لأن جهاز القياس المستخدم سوف يغير المكان أو السرعة.

5- لم يعتبر بور احتمال تجاوز الإلكترون للمدارات الثابتة التي حددها واحتمال وجوده في منطقة حول هذا المدار الثابت.

6- ربطت بين نظريّة الكمّ وقوانين الفيزياء الكلاسيكية دون معرفة أساس لهذا الربط.

نموذج سمر فيلد الذري:-

يعتبر نموذج سمر فيلد (1916) نموذجاً محسناً عن نموذج بور حيث اتفق مع بور في فرضياته باستثناء المدارات الدائرية لحركة الالكترونات واستناداً لنموذج سمر فيلد فانه من اجل قيمة خاصة ل(n) فهنالك العدد نفسه من الأغلفة الفرعية الخارجية بحيث أن مدارا واحدا يكون دائريا والبقية (n-1) تكون أهليلجية الشكل يمكن فهم ذلك بشكل أفضل من خلال الأمثلة التالية



في مستوى الطاقة الأول (n=1) هناك فقط مدار وحيد أو غلاف فرعي للإلكترون وهذا المدار دائري كما في الشكل (a)، وبشكل مشابه فمن أجل مستوى الطاقة الثاني (n=2) هنالك غلافان فرعيان للالكترونات واحد دائري والأخر اهليلجي كما في الشكل (b) ومن أجل مستوى الطاقة الثالث (n=3) هناك ثلاثة أغلفة فرعية للإلكترون واحد دائري والآخران اهليليجيان كما في الشكل (c).

ان كل المدارات الفرعية محددة بحرف (L)، ومن اجل القيمة الخاصة ب(n) فهنالك عدد كمي خاص بالمدارات الفرعية (ℓ) وان له قيم تتراوح من (0, 1, 2,….., n-1).

حيث يمثل (n) عدد الكمي الرئيسي و (ℓ) العدد الكمي المداري.

ان مستوى الطاقة للمدار (n) والغلاف الفرعي (ℓ) يرتبطان بالعلاقة الرياضية التالية:

$$b/a = (\ell+1)/n$$

حيث تمثل (a , b) انصاف المحاور الرئيسية والثانوية للمدار الاهليجي، ويمكن أن نلاحظ أنه عندما تكون قيمة (n=1) تكون قيمة ($\ell=0$) بمعنى ان قيم (a = b) في هذه الحالة نجد بأن محوري الشكل متساويان وبنتيجة ذلك فالمدار الموافق (n = 1) يكون دائرياً ويرمز لهذا الغلاف الفرعي (S- sub shell)، وهذا الغلاف الفرعي الذي ينتمي الى (n = 1) محدد ب (1S). وبنفس الطريقة فعندما تكون قيمة (n=2) فانه تظهر للعدد الكمي المداري قيمتان هما (ℓ = 0 , 1) فان قيمة (0) للاوربيتال الفرعي تكون (2S) وهو المدار الاهليجي اما قيمة (1) فتكون قيمة المدار الفرعي (2P) وهو المدار الدائري.

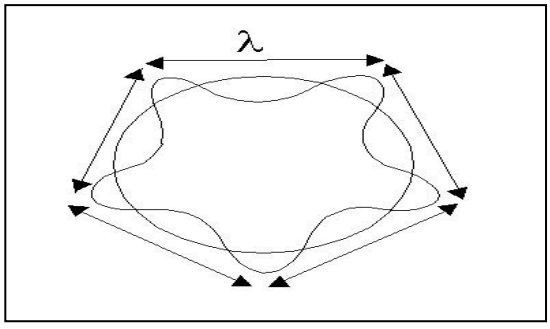
لم يكن نموذج بور - سمر فيلد الجواب النهائي لمسالة التركيب الذرّي، وكان لا بد من البحث عن نظريّة أفضل من سابقاتها، تتجنّب التناقض بين نظريّة الكمّ والنّظرية الكهرومغناطيسية، وتتوصل إلى وضع نموذج صحيح حول بنية الذرّة.

نظرية البناء الذري الكمية (بور المطورة):-

كانت انطلاقة العالم الفرنسي دي بروغلي(1924) لوضع حجر الأساس لعلم جديد في الفيزياء النّظرية، يُرسي القواعد والأسس الصحيحة لتفسير خطوط الطّيف ، والعديد من خواصّ الذرة وهو ما يعرف اليوم ب (علم الميكانيك الكمي). وتعتمد الفكرة اساساً على امتلاك الجسيمات المايكرونية كالفوتون والالكترون خصائص موجية وقد اثبت الطبيعة الموجية للالكترون واستطاع قياس الأمواج الناتجة عنها وذلك باستخدام النظرية النسبية لآينشتاين التي تمثل الربط بين طاقة الفوتون وكتلته وكذلك باستخدام نظرية العالم ماكس بلانك التي تربط بين طاقة الفوتون وتردده وباستعمال العلاقة الرياضية استطاع إيجاد العلاقة النهائية لحساب الخصائص المادية والموجية للالكترون وهي:

$$(\lambda = h / m_e . V)$$

فلو اردنا ان نحسب قيمة طاقة الكترون له كتلة معلومة وسرعة معلومة فاننا نستطيع بسهولة حسابها حسب العلاقة الرياضية السابقة الذكر، ولكي يتمكن الالكترون من تحقيق مدار بور الدائري لموجة الكترونية في المدار الخامس سوف تكون بالشكل التالي



موجه الكترونية مستقرة في المدار الخامس

ممّا تقدّم يتضح أنّ الإلكترونات تمتلك خواصّ الدقائق المادّية أو الجّسيمات، وفي الوقت ذات تمتلك الطبيعة الموجيّة لذلك يمكن القول بأنّ الإلكترونات ذات طبيعة مزدوجة جسيمية - موجيّة (Particle - wave nature). حيث يلاحظ انه تبدو الخواصّ الجّسيميّة مهمّة جدّا ، عندما نتطرق إلى وصف خواصّ الأجسام الكبيرة نسبيّا ، بينما تكون الخواصّ الموجيّة أكثر أهمية عند وصف خواصّ المواد أو الأجسام المتناهية في الصغر.

مبدأ الشك او قاعدة اللادقة (قاعدة هايز نبرغ):-

يمثل هذا المبدأ الذي أشتقه عالم الفيزياء الألماني هايز نبرغ (1927) احدى النتائج المهمّة للطبيعة الموجيّة - الجّسيمية للمادّة .وينصّ هذا المبدأ على (أنّه من المستحيل تعيين موقع الإلكترون وغيره من الدقائق المايكرونية وكمية حركته أو سرعته بدقّة في آن واحد وذلك لأنّ تعيين أحدهما (الموقع على سبيل المثال) بدرجة متناهية من الدقّة تجعل تعيين الآخر (كمية الحركة) بدرجة من الدقة أقل بكثير ممّا هو عليه الحال بالنسبة إلى الأول (الموقع) والعكس صحيح).

لهذا فإنّه من الخطّأ أن نتصوّر الإلكترون كجسيم يتحرّك من نقطة إلى أخرى على المدار بسرعة معيّنة (محددة) تماماً عند كل نقطة. والأصح من ذلك هو أن نتحدثّ عن كثافة احتمال تواجد الإلكترون عند أيّة نقطة. ولهذا فإنّ لا يمكن رسم صورة لمدار الإلكترون في مستوى طاقة معين حول النّواة. ولكننا لو تصوّرنا الإلكترون يتحرّك كموجة فإنّ طول الموجة يعين سرعة الإلكترون استناداً لعلاقة دي بروغلي. كما أن سعة الموجة في أيّة منطقة من الفراغ تدلّ على الاحتمال النسبي لوجود الإلكترون في تلك المنطقة.

النموذج الذري الحديث:-

وهذا النموذج الذري قد لاقى قبولاً من العلماء في الوقت الحاضر، واما القواعد الأساسية له فهي:

1- تتكون الذرة من ثلاث جزيئات أساسية، الكترونات، بروتونات، ونيترونات. فالالكترونات ذات الشحنة السالبة والبروتونات ذات شحنة موجبة والنيوترونات لا تملك شحنة فهي حيادية كهربائيا.

2- تتموضع البروتونات والنيوترونات في نواة صغيرة في مركز الذرة بسبب وجود البروتونات فالنواة تكون ذات شحنة موجبة.

3- تدور الإلكترونات حول النواة في مسارات دائرية واهليجية ثابتة تعرف بمستويات الطاقة الأساسية أو الاغلفة الرئيسية، وتمثل هذه المستويات بالأحرف (K, L, M, N, O, P and Q) وتعد هذه المستويات من النواة باتجاه الخارج.

4- يقسم كل مستوى طاقة أو غلاف إلى أغلفة فرعية (مدارات ثانوية) تمثل هذه المدارات الفرعية بالأحرف (S, P, d and f) كما تقسم هذه المدارات الفرعية إلى مدارات أخرى (Sub sub shell).

5- يقرن كل مستوى طاقة بكمية ثابتة من الطاقة، فمستوى الطاقة الأقرب إلى النواة ذو طاقة أصغريه ، بينما مستوى الطاقة الأبعد عن النواة يكون ذا طاقة أعظمية.

6- ليس هناك أي تغير في طاقة الإلكترون طالما بقي يدور في مستوى الطاقة نفسه وتبقى الذرة مستقرة .

7- لكن عندما يقفز من مستوى طاقة أقل إلى مستوى طاقة أعلى أو عندما يسقط من مستوى طاقة أعلى إلى مستوى طاقة أدنى فان يحدث تغيرا في طاقة الإلكترون.

8- تحتل الإلكترونات المتحركة في مستويات طاقة مختلفة الفراغ حول النواة بسرعة .فالتكدس الكلي للالكترونات يشكل سحابة الكترونية حول النواة بسبب قوة التجاذب الكهروستاتيكي بينهم.

9- إن عدد البروتونات يساوي عدد الالكترونات في الذرة العادية لهذا تكون النواة حيادية (متعادلة) كهربائياً.

الاعداد الكمية (Quantum numbers):-

اوضحت الدراسات الطيفية مؤخرا بأن الطاقة لكل الإلكترونات التي تنتمي لمستوى طاقة معين ليست واحدة بل تختلف من واحد للآخر .لذلك استنتج بأنه من غير الممكن التوصيف الكامل لطاقة وموقع الإلكترون في الذرة بمساعدة عدد كمي واحد (n).

فقد بينت الدراسات المتقدمة بأن هناك أعداد كمية توضح بشكل كامل طاقة الالكترونات وموقعها في الذرة، وهذه الاعداد الكمية الأربعة هي:-

1- **العدد الكمي الرئيسي** (n) Principal Quantum Number: ويعطي هذا العدد الكمي معلومات حول مستوى الطاقة الرئيسي الذي ينتمي له الإلكترون فيأخذ هذا العدد فقط قيما صحيحه (1، 2، 3،....) وهكذا فمن اجل مستوى الطاقة الأول (n = 1) ومن اجل مستوى الطاقة الثاني (n = 2).

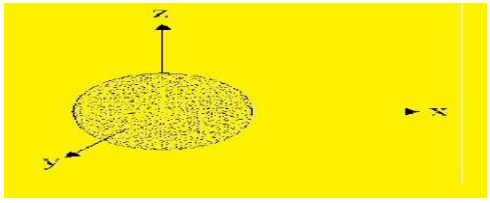
2- **العدد الكمي المداري** (L) Orbital Quantum Number: يعطي هذا العدد الكمي معلومات حول شكل المستوى الفرعي لمستوى الطاقة الرئيسي الذي ينتمي له الالكترون، فيأخذ هذا العدد أيضاً فقط قيما صحيحة لكن قيمته تعتمد على (n) وانه ل (L) قيم مختلفة تتراوح من (0) الى (n-1). وكما في الجدول التالي

العدد الكمي الرئيسي(n)	1	2	3
الطبقة الالكترونية الرئيسية	K	L	M
العدد الكمي الثانوي (ℓ)	0	1	2
المدار الثانوي	1S	2S, 2P	3S, 3P, 3d

وللتمييز بين إلكترونات المدارات الثّانوية يُصطلح ، عادة ، على تسمية الإلكترونات بأسماء المدارات الثانوية ذاتها فنقول الالكترونات (S) والالكترونات (P) والالكترونات (d). وتتميز المدارات الثانوية (S, P, d) بأشكالها المختلفة المطابقة لأشكال السّحابات الإلكترونية العائدة لإلكترونات هذه المدارات.

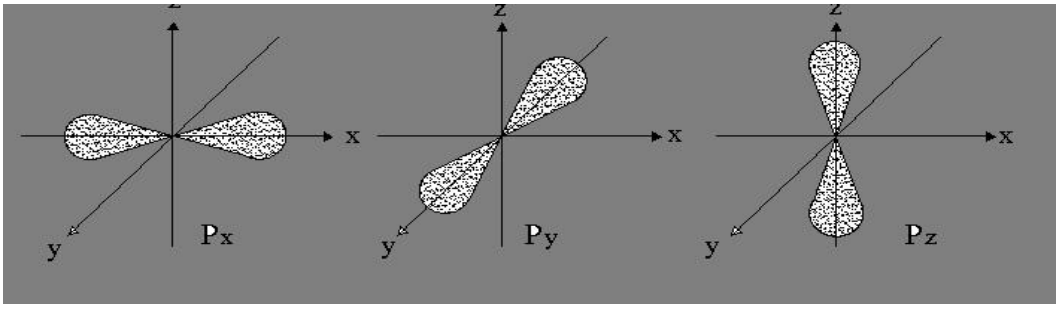
3- العدد الكمي المغناطيسي Magnetic Quantum Number (m_ℓ): يقدم هذا العدد الكمي معلومات حول توجيه أو ترتيب المستوى الفرعي Sub level في الفراغ الذي ينتمي له الالكترون. وتحدد قيمه بواسطة قيمة (L) والمجال لهذه القيم هو (+L, 0, -L) والكلي هو ($2\ell + 1$)، فعندما تكون قيمة (L=1) فان هنالك ثلاث قيم ل (m_ℓ) ومقدارها (+1, 0, -1).

وعلى هذا الأساس فان الأوضاع التي تتخذها المدارات الثانوية (S, P, d) في الفراغ له قيمة ($2\ell + 1$) وهو ما يدعى بالتعددية، وعليه فالالكترونات في المدار الثانوي (S) والذي قيمة (L=0) فتكون قيمة عدد الكم المغناطيسي له (m_ℓ=0) فان ذلك يعني وجود موضع واحد للسحابة الالكترونية وكما في الشكل التالي

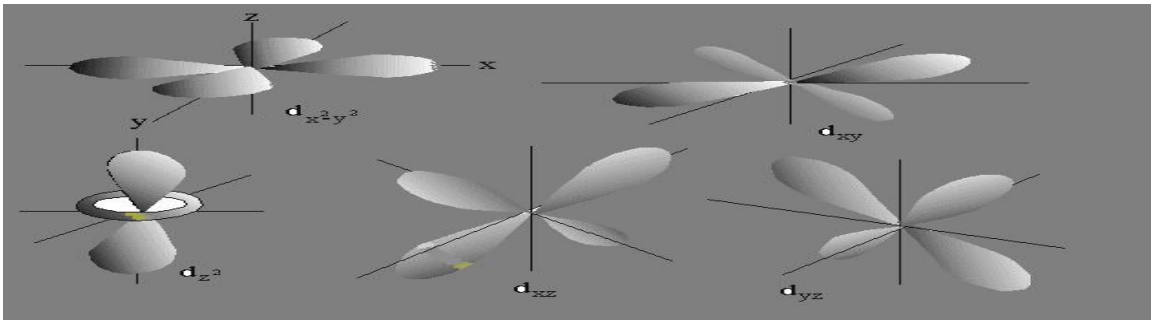


وضع السحابة الالكترونية للمدار S في الفراغ

اما المدارات الثانوية (P) فتكون كالشكل التالي في الفراغ



اما للمدارات الثانوية (d) فتكون كالشكل التالي في الفراغ



نجد من الاشكال الخاصة بالمدارات الثانوية (P, d) ان الكثافة الالكترونية تتمحور حول المحاور الديكارتية (X, Y, Z)، وان كل اوربيتال من هذه الاوربيتالات يستطيع امتلاك اثنان من الالكترونات ولا غيرها.

4- العدد الكمي البرمي (ms) Spin Quantum Number: يقدم هذا العدد الكمي معلومات حول دوران الالكترونات حول محورها الخاص في المدار فيما إذا كان الدوران مع عقارب الساعة أو بعكسها فهناك قيمتان فقط للعدد الكمي المحوري(الدوراني) (ms) هما ($m_s = + ½$) & ($m_s = - ½$).

تتحرك الالكترونات حول النواة في نوعين من الحركة:

1- حركة دورا نية حول النواة في مدارات دائرية أو اهليليجية.

2- حركة كل إلكترون حول محوره Spin.

وتلخيصاً لكل ما ذكر سابقاً يمكن ان نستنتج التالي:

1- كلّ مدار فرعي يستوعب إلكترونين كحد أقصى.

2- كلّ مدار ثانوي يحتوي على $(2\ell + 1)$ او $(n+1)$ من المدارات الفرعية.

3- كلّ مدار ثانوي يستوعب $2(2\ell + 1)$ من الالكترونات.

4- عدد أنواع المدارات الثّانوية في كلّ مدار رئيسي يساوي (n).

5- عدد المدارات الفرعية في كلّ مدار رئيسي يساوي (n^2).

6- عدد الإلكترونات في كلّ مدار رئيسي يساوي $(2n^2)$ كحد اقصى.

وللتذكير فانه يُستعاض، عادة عن المدارات الفرعية بحُجيرات مربعة الشّكل [ ] والتي تعرف في بعض الأحيان باسم الحجيرات الكمومية أو الكوانتية. وتتّسع كل حجيرة لإلكترونين متعاكسين باللف الذّاتي حيث تكون للالكترون الأول ($S = + \frac{1}{2}$) وللالكترون الثاني تكون ($S = - \frac{1}{2}$) ويسميان بالمزدوجات الالكترونية ويشار لهما بالرمز [↑↓] . والجدول التالي يوضح اعداد الكم الأربعة بالإضافة الى اعداد الالكترونات التي تستوعبها المدارات الرئيسية والثانوية.

الجدول أعداد الكم (n,l,m,s) وحالة الإلكترونات في الذرّة الجدول								أعداد الكم (n,l,m,s) وحالة الكم (n)
السعة الإلكترونية للطبقة الرّئيسة $(2n^2)$	$2(2l+1)$	الفرعية $(2l+1)$	(s)				الرّئيسة	
2	2	1	±1/2	0	1s	0	K	1
8	2	1	±1/2	0	2s	0	L	2
	6	3	±1/2	-1, 0, +1	2p	1		
18	2	1	±1/2	0	3s	0	M	3
	6	3	±1/2	-1, 0, +1	3p	1		
	10	5	±1/2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	2		
32	2	1	±1/2	0	4s	0	N	4
	6	3	±1/2	-1, 0, +1	4p	1		
	10	5	±1/2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	2		
	14	7	±1/2	-3, -2, -1,0,+1,+	4f	3		