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).

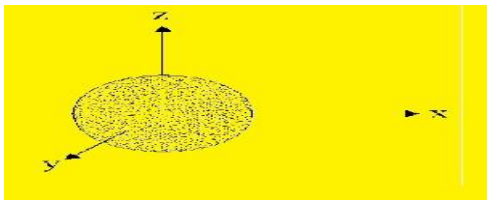
2- **العدد الكمي المداري** (L) Orbital Quantum Number: يعطي هذا العدد الكمي معلومات حول شكل المستوى الفرعي لمستوى الطاقة الرئيسي الذي ينتمي له الالكترون، فيأخذ هذا العدد أيضاً فقط قيما صحيحة لكن قيمته تعتمد على (n) وانه ل (L) قيم مختلفة تتراوح من (0) الى (n-1). وكما في الجدول التالي

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.

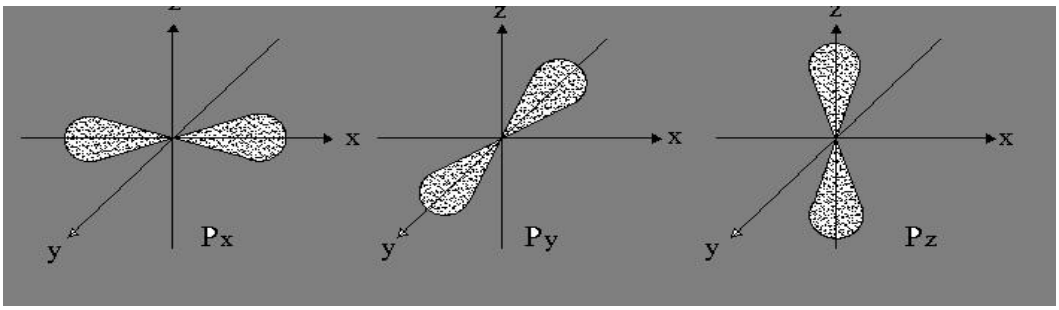
3- العدد الكمي المغناطيسي (m_ℓ) Magnetic Quantum Number: يقدم هذا العدد الكمي معلومات حول توجيه أو ترتيب المستوى الفرعي Sub level في الفراغ الذي ينتمي له الالكترون. وتحدد قيمه بواسطة قيمة (L) والمجال لهذه القيم هو (+L, 0, -L) والكلي هو ($2\ell + 1$)، فعندما تكون قيمة (L=1) فان هنالك ثلاث قيم ل (m_ℓ)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

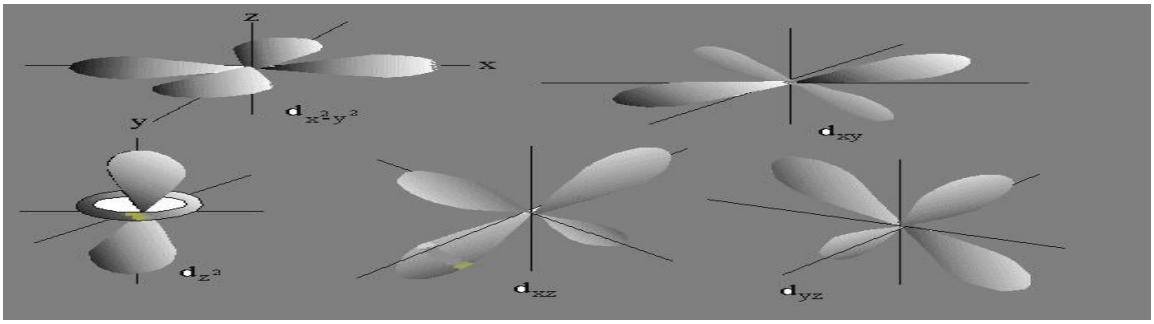


وضع السحابة الالكترونية للمدار S في الفراغ

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 (m_s) 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) (m_s) 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 اهليليجيه.

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).

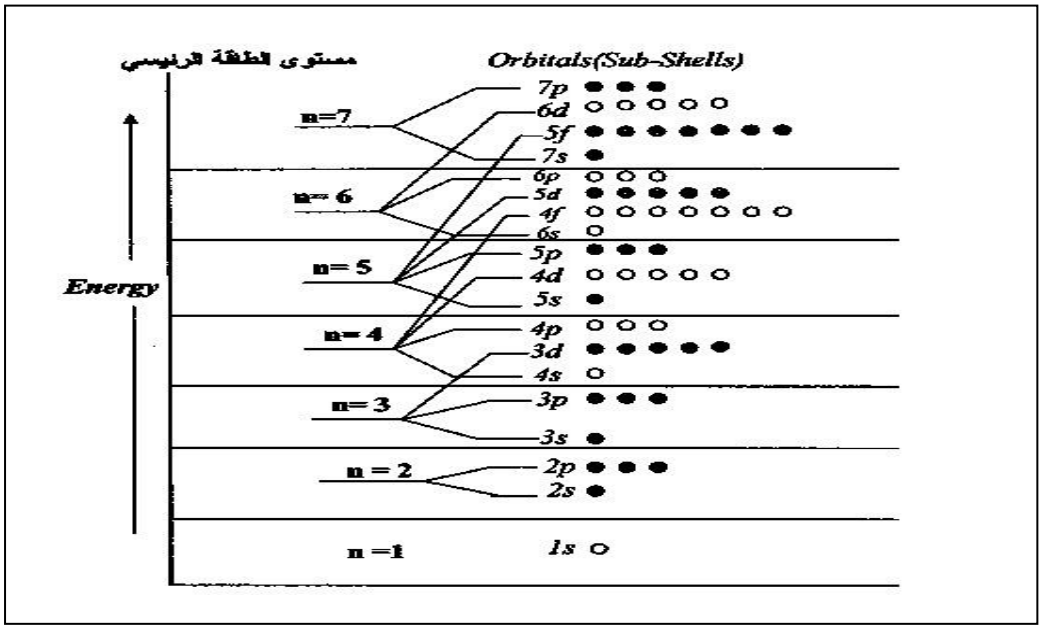
5- عدد المدارات الفرعية في كلّ مدار رئيسي يساوي (n^2).

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 ($S = + ½$) وللالكترون الثاني تكون ($S = - ½$) 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		

ولمعرفة العدد الكلي للالكترونات في المدارات الرئيسية فيتم احتسابه حسب القاعدة $(2n^2)$ حيث تمثل (n) المدار الرئيسي. وعلى الكل معرفة انه ان بازدياد المدار عن (n=4) فانه لا يمكن احتساب العدد الكلي للالكترونات وذلك لان اعداد الالكترونات لا تزيد عن 32 والسبب في ذلك هو تداخل مستويات الطاقة، كما في الشكل التالي حيث تلاحظون ان مستوى الطاقة (4S) ينخفض عن مستوى الطاقة (3d) وهكذا.



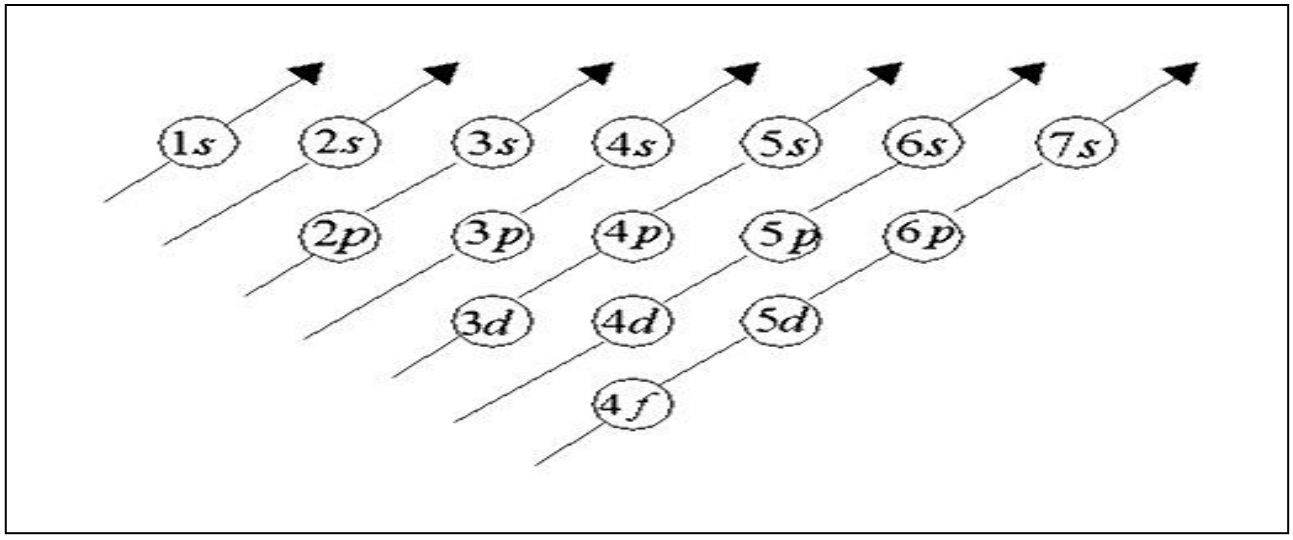
اما لمعرفة العدد للالكترونات في الاغلفة الفرعية فيتم احتسابه حسب القاعدة ((2(2L+1)) فان كانت قيمة المدار (L=0) فان عدد الالكترونات (2) وهكذا. كما نجد ان كل الاغلفة الفرعية معرفة برمز يخصها او Sub sub shell فالاوربيتال الفرعي (L=0) هو معروف بالرمز (S) فتكون هنالك (1S, 2S, 3S &4S) اما الاوربيتال الفرعي (L=1) فهو معروف بالرمز (P) وتكون هنالك (2P, 3P&4P)، اما قيمة الاوربيتال الفرعي (L=2) فهو معروف بالرمز (d) وتكون هنالك (3d, 4d & 5d).

ومن المهم جداً معرفة ان هنالك عددا غير محدد من مستويات الطاقة الرئيسية في الذرة لكن في ضوء المعرفة الحالية فان توزيع الإلكترونات يتم في سبع مستويات طاقية رئيسية فقط (n=1 حتى n=7) بمعنى ان توزيع الإلكترونات يتم من المستوى الأقل في الطاقة إلى المستوى الأعلى في الطاقة.

إن تسلسل ملء الإلكترونات في الأغلفة الفرعية المختلفة أو المدارات يتم وفق مجموعة القواعد التالية:

1- تضاف الإلكترونات الواحد بعد الأخر إلى المدارات عند الحركة من عنصر إلى العنصر التالي بنظام تزايد العدد الذري.

2- تملأ المدارات بالتتابع وفق نظام زيادة طاقتهم .تزداد الطاقات وفق النظام 1S, 2S, 2P, 3S, 3P, 4S, 3d, 4P, 5S, 4d, 5P, 6S, 4f, 5d, 6P, 7S وهكذا والأرقام (1, 2, 3&4) تشير الى مستوى الطاقة الرئيسي. ويمكن توضيح الترتيب بشكل دوائر مرتبة بشكل هرمي معكوس وتملأ المدارات ابتداءاً من (1S) وتماشياً مع الأسهم المتوازية كما في المخطط التالي:



3- زوج الالكترونات في أي مدار (S, P, d or f) غير ممكن حتى تحوي كل المدارات المتاحة للمجموعة المعطاة إلكترونا واحدا في كل منها.

4- يتسع مدار الغلاف الجزئي في العدد الكمي الأساسي لعدد أعظمي من الإلكترونات مقداره 2 بدوران متعاكس، وهذا يعني انه لا يوجد مدار يمكن ان يتسع لالكترونين باتجاه الدوران نفسه وحسب مبدأ باولي.

5- تميل المدارات في المستوى الفرعي نفسه لتصبح مملوءة أو نصف مملوءة بالإلكترونات لأنها تمثل ترتيب مستقر للالكترونات.

6- إذا كان هناك مداران أو أكثر لمجموعة معطاة (P, d & f) تحوي إلكترونا واحدا في كل منها فهي تميل لتكون باتجاه موحد للدوران (لهما نفس العدد البرمي).

وعلى هذا الأساس فانه يتم توزيع إلكترونات الذرّة على المدارات الثّانوية المحيطة بالنواة، وذلك بالاعتماد على قواعد البناء الالكتروني ومنها

مبدأ باولي للاستبعاد:

وينصّ هذا المبدأ على (أنّه لا يمكن لإلكترونين في ذرّة واحدة أن يملكا أعداد الكمّ الأربعة نفسها. فلو وُجد إلكترونان يملكان أعداد الكمّ الثلاثة (n, ℓ & m) نفسها في الذرة فلابد ان يختلفا في العدد الكمي البرمي(S)). أي أنّه يشترط عند تواجد إلكترونين في حجيرة كوانتية أن يكونا متعاكسين باللف الذّاتي أي مزدوجان (Paired)، وهذا ما يمثّل بسهمين متوازيين ومتعاكسين في الاتّجاه (↑↓).

فلو اخذنا على سبيل المثال غاز الهيليوم (He) المستقر (العدد الذري (Z) هو 2) فتكون اعداد الكم الأربعة للالكترونين كالتالي:

للالكترون الأول $n=1 , \ell=0 , m=0 , s= +½$

وللالكترون الثاني $n=1 , \ell=0 , m=0 , s= -½$

فتكون البنية الالكترونية له (He 2) تمثل بالشكل التالي ↑↓ .

قاعدة هوند:

و تنصّ على (أنّ الإلكترونات التي لها الطّاقة نفسها (لها العددين الكمّيين n و ℓ نفسهما) تتوزع على الحجيرات الكوانتية بشكل يكون معه عدد الإلكترونات التي يكون لها العدد الكمّي البرمي(s) نفسه اعظمياً، شريطة عدم الإخلال بمبدأ الاستبعاد .وتعرف هذه الإلكترونات باسم الإلكترونات المنفردة (Unpaired)).

وبمعنى آخر، فقاعدة هوند تقول بأنّ الإلكترونات تتوزّع بصورة فردية على المدارات الثّانوية المنحلّة (المتساوية بالطاقة) بشكل تتحقق معه التعددية القصوى (2S+1) (Maximum Multiplicity) دون الاخلال بمبدأ الاستبعاد، حيث تمثل (S) مجموع برم الالكترونات المنفردة او الفردية.

فلو افترضنا الاوربيتال (P) يمتلك ثلاث الكترونات منفردة فتكون اعداد البرم الخاصة بكل الكترون هي (S1, S2, S3) وان قيمة (S) الكلية هي (S= S1+ S2+ S3).

نجد أنّ الإلكترونات الفردية لها أهمية خاصّة في تحديد الصفات المغناطيسية للذرّة، حيث إنّ وجود إلكترون فردي أو أكثر في الذرّة يجعلها ذات صفات بارامغناطيسية (Paramagnetic)، واذا ما احتوت فقط على الإلكترونات المزدوجة تكون ذات صفات ديامغناطيسية (Diamagnetic). والمواد البارامغناطيسية تتفاعل بشدّة مع المجال المغناطيسي، أما المواد الديامغناطيسية فيكون تأثّرها بهذا المجال ضعيفاً.

وكنتيجة لقاعدة هوند (للتعددية 2S+1 اقصى ما يمكن) فإنّ المدارات الممتلئة بالإلكترونات أو نصف الممتلئة تزيد من استقرار الذرّة. وبنا ءاً على ذلك تظهر بعض المفارقات في البناء الإلكتروني.