Machine Translated by Google

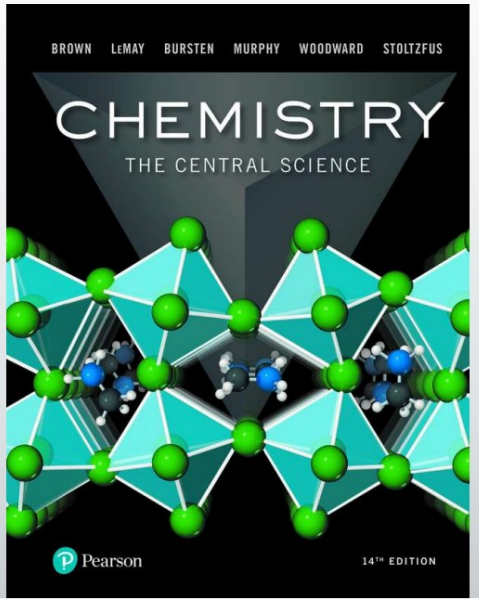
Chapter 6

Electronic Structure of Atoms

Dr. Morad Mustafa

Department of Pharmacy

Al-Zaytoonah University of Jordan



Machine Translated by Google

6.5ميكانيكا الكم والمدارات الذرية

المدارات والأعداد الكمومية

الحل لمعادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين يعطي
مجموعة من الدوال الموجية تسمى المدارات.

يستخدم النموذج الميكانيكي الكمومي ثلاثة أرقام كمية، n،

l، m_ℓ

يمكن أن يكون للعدد الكمي الرئيسي، nقيم صحيحة موجبة
1، 2، 3، . . . . .

مع زيادة n، يصبح المدار أكبر، ويقضي الإلكترون
مزيد من الوقت بعيدًا عن النواة.

زيادة في n تعني أيضًا أن الإلكترون لديه طاقة أعلى
وبالتالي يكون ارتباطه بالنواة أقل إحكامًا.

Machine Translated by Google

يمكن أن يكون للعدد الكمومي للزخم الزاوي، ، عدد صحيح l

لكل قيمة من n إلى $(n-1)$

هذا العدد الكمومي يحدد شكل المدار.

Value of l	0	1	2	3
Letter used	s	p	d	f

يمكن أن يكون لها قيم صحيحة m_l، العدد الكمي المغناطيسي، بين $-l$ و $+l$، بما في ذلك الصفر.

يصف هذا الرقم الكمي اتجاه المدار في فضاء.

Machine Translated by Google

6.5ميكانيكا الكم والمدارات الذرية

- في أي لحظة معينة، يتم وصف الإلكترون في ذرة الهيدروجين بواسطة مدار واحد فقط من هذه المدارات؛ لذلك، نقول أن الإلكترون يشغل مدارًا معينًا.

- المدارات المتبقية غير مشغولة في تلك الحالة الخاصة لذرة الهيدروجين.

- مجموعة المدارات التي لها نفس قيمة n تسمى غلاف الكتروني.

- مجموعة المدارات التي لها نفس قيم l و n تسمى غلاف فرعي.

Machine Translated by Google

6.5ميكانيكا الكم والمدارات الذرية

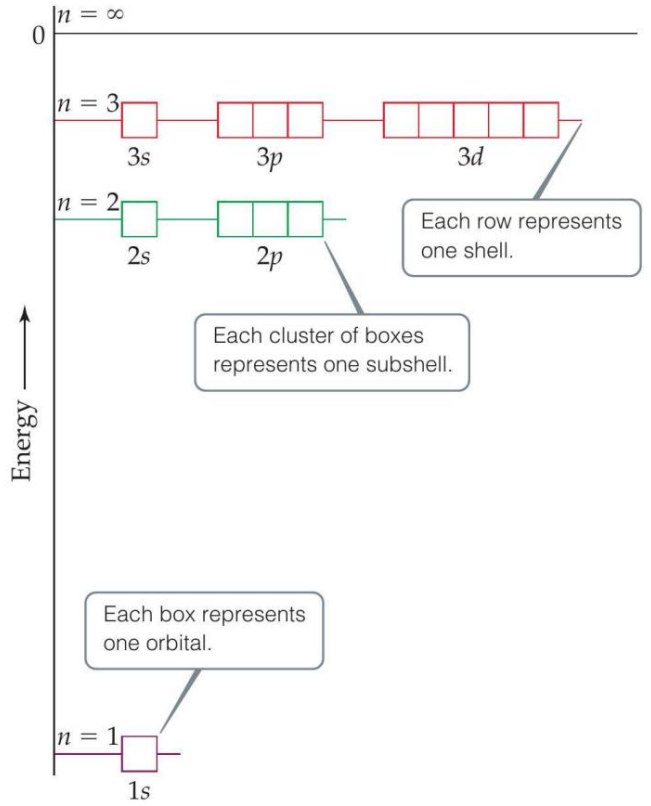
TABLE 6.2 Relationship among Values of n, l, and m_l through $n = 4$

n	Possible Values of l	Subshell Designation	Possible Values of m_l	Number of Orbitals in Subshell	Total Number of Orbitals in Shell
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	
	1	2p	1, 0, −1	3	4
3	0	3s	0	1	
	1	3p	1, 0, −1	3	
	2	3d	2, 1, 0, −1, −2	5	9
4	0	4s	0	1	
	1	4p	1, 0, −1	3	
	2	4d	2, 1, 0, −1, −2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, −1, −2, −3	7	16

Machine Translated by Google

6.5ميكانيكا الكم والمدارات الذرية

- الغلاف ذو العدد الكمي الرئيسي
  يتكون n من nغلاف فرعي بالضبط.
- كل غلاف فرعي يتكون من عدد محدد
  من المدارات، وكل مدار يتوافق مع
  قيمة مختلفة مسموح بها لـ m_l .
  - لقيمة معينة من القيمة المسموح بها l، هناك $(2l + 1)$
    لـ m_l .
- العدد الإجمالي للمدارات في الغلاف هو n2 .



$n = 1$ shell has one orbital
$n = 2$ shell has two subshells composed of four orbitals
$n = 3$ shell has three subshells composed of nine orbitals

▲ Figure 6.18 Energy levels in the hydrogen atom.

Machine Translated by Google

تمرين نموذجي 6.6

أ. توقع عدد الأغلفة الفرعية في الغلاف الرابع، أي بالنسبة إلى 4 □ .4 = n

ب. أعطِ التسمية لكل من هذه القذائف الفرعية.

4s، 4p، 4d، و4f□

ج. ما عدد المدارات في كل من هذه الأغلفة الفرعية؟ □بالنسبة لـ 1، 4s □

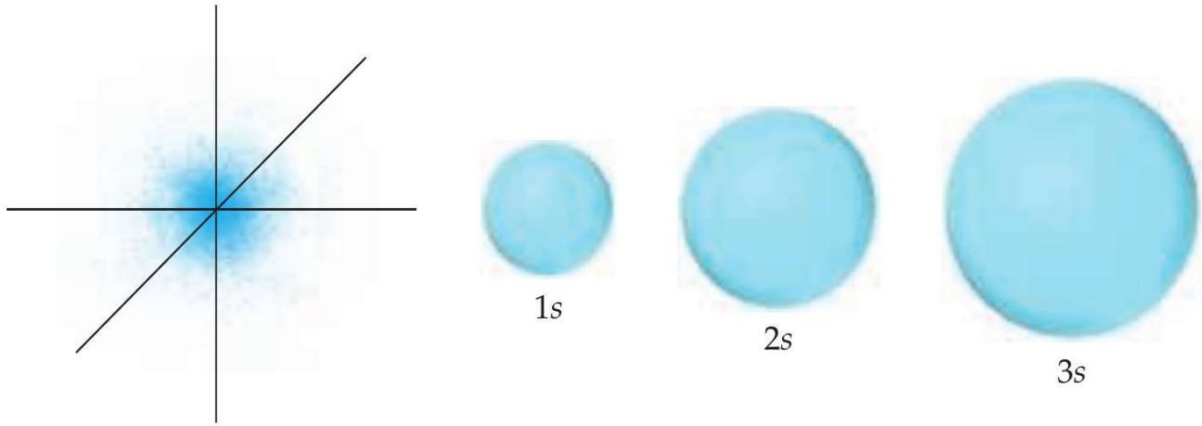
وبالنسبة لـ 3، 4p □ وبالنسبة لـ 5، 4d □ وبالنسبة لـ 7. 4f □

Machine Translated by Google

6.6تمثيل المدارات

المدارات s

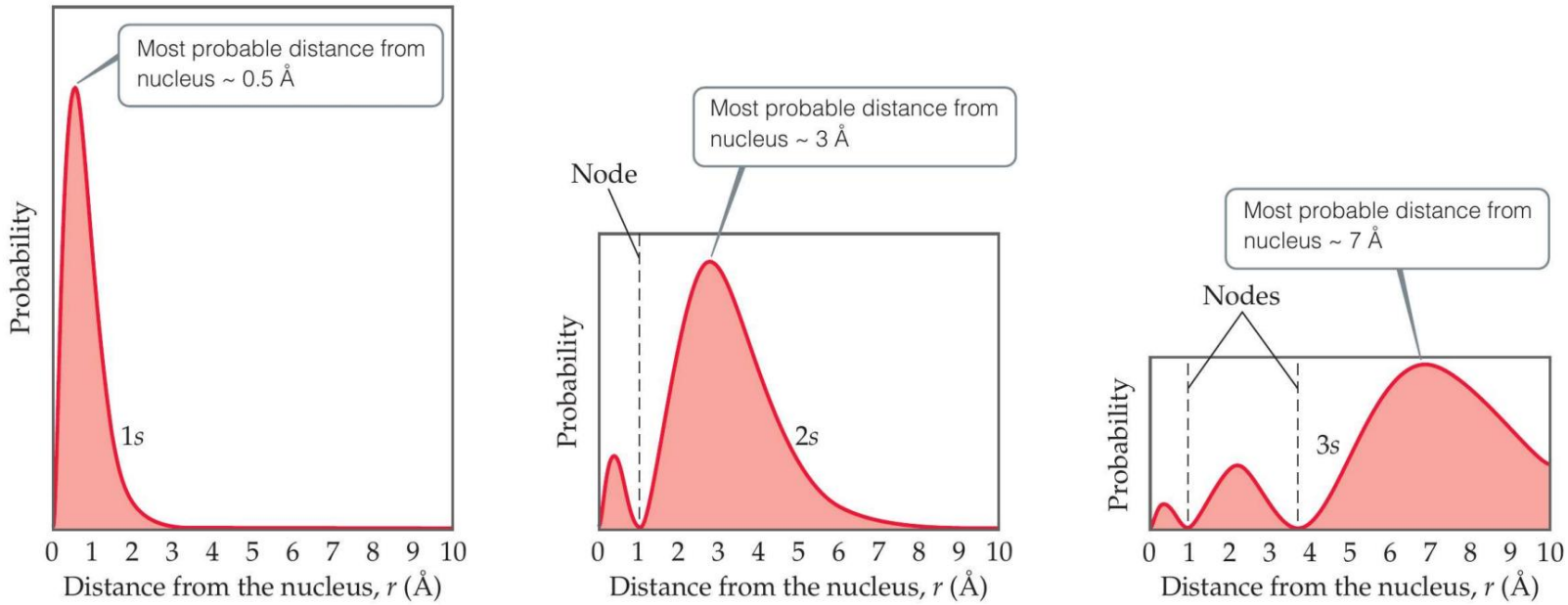
أول شيء نلاحظه حول كثافة الإلكترون للمدار sهو أنه متماثل كرويًا، بمعنى آخر أن كثافة الإلكترون على مسافة معينة من النواة هي نفسها بغض النظر عن الاتجاه الذي ننطلق منه من النواة.



(a) An electron density model **(b)** Contour models

Machine Translated by Google

6.6تمثيل المدارات



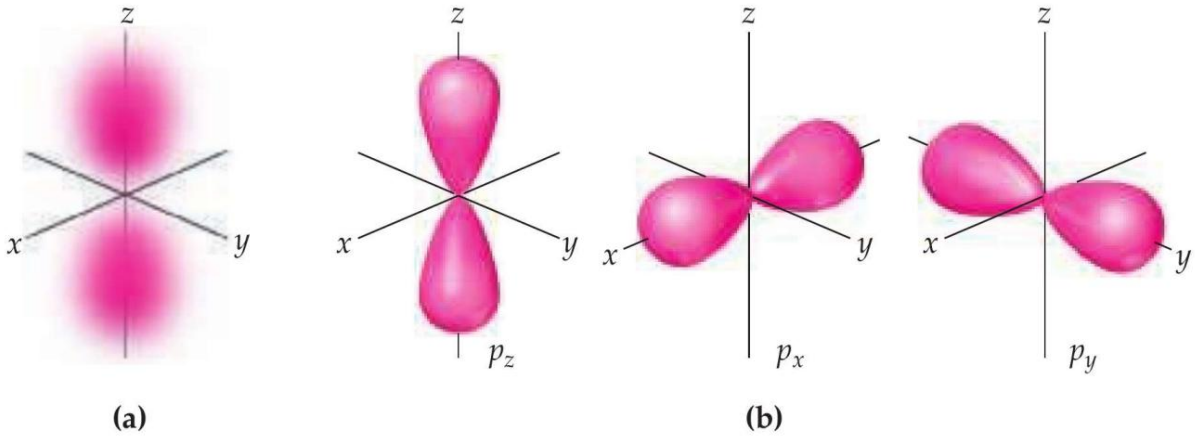
▲ **Figure 6.19 Radial probability functions for the 1*s*, 2*s*, and 3*s* orbitals of hydrogen.** These plots show the probability of finding the electron as a function of distance from the nucleus. As *n* increases, the most likely distance at which to find the electron (the highest peak) moves farther from the nucleus.

كل منحنى ناتج هو دالة الاحتمال الشعاعية لـ
مداري.

Machine Translated by Google

6.6تمثيل المدارات

المدارات p



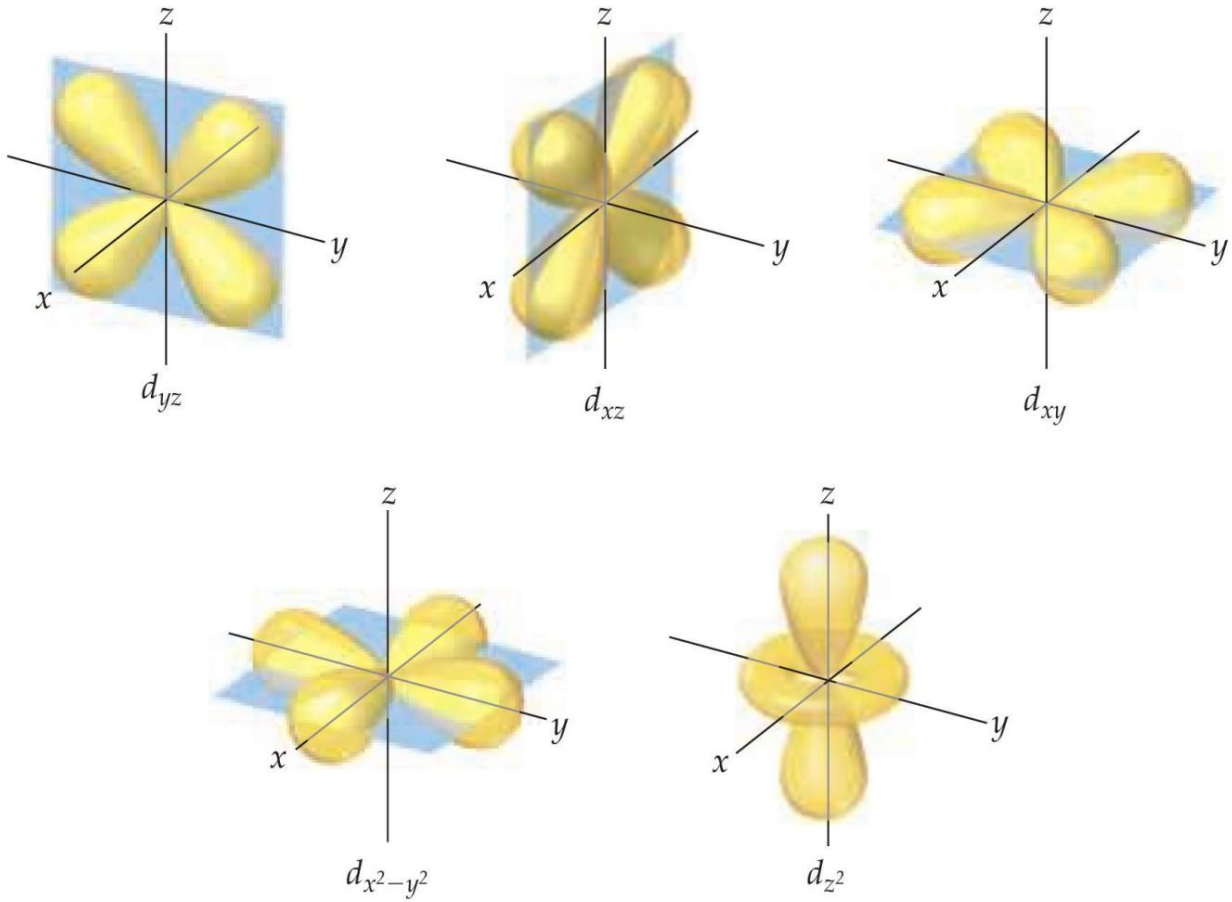
▲ **Figure 6.23** **The *p* orbitals.** (**a**) Electron-density distribution of a 2*p* orbital. (**b**) Contour representations of the three *p* orbitals. The subscript on the orbital label indicates the axis along which the orbital lies.

- المدار على شكل دمبل يحتوي على فصين.
- تزداد المدارات pفي الحجم عندما ننتقل من 2pإلى 3pإلى ،4pوهكذا إلى الأمام.

Machine Translated by Google

6.6تمثيل المدارات

المدارات d



▲ **Figure 6.24** Contour representations of the five *d* orbitals.

Machine Translated by Google

6.7ذرات متعددة الإلكترونات

على الرغم من أن أشكال المدارات في الذرة المدارات وطاقاتها

تختلف من

الذرة ذات الإلكترونات المتعددة هي نفس الذرة

بالنسبة للهيدروجين، وجود المزيد

إن أكثر من إلكترون واحد يغير بشكل كبير

طاقات المدارات.

في ذرة الهيدروجين، 3s و3p و3d

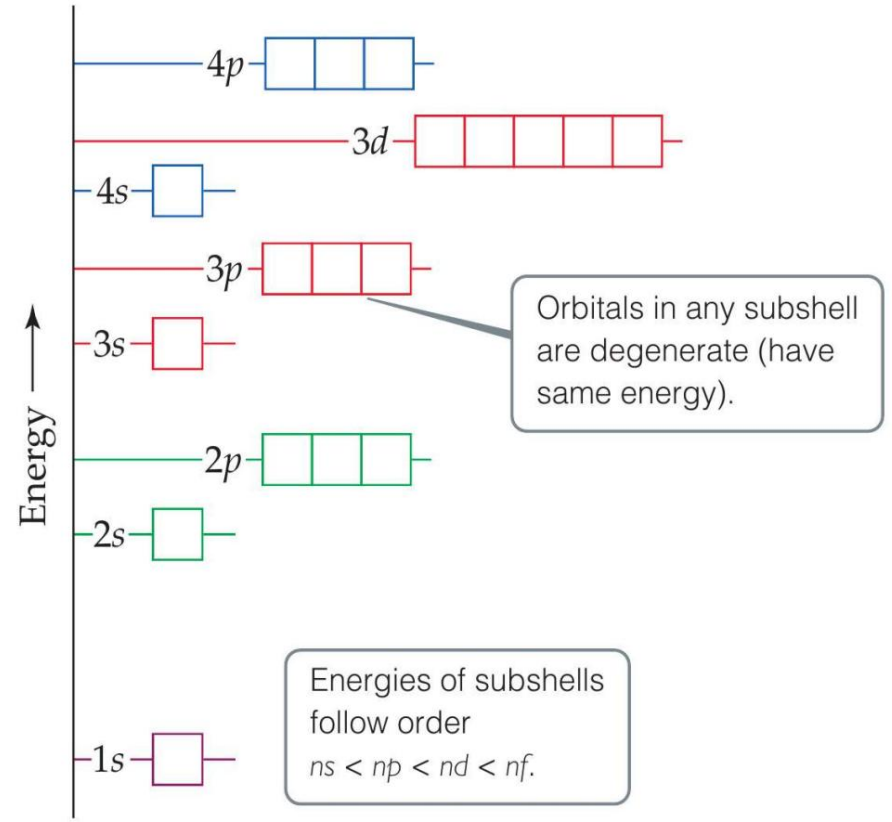
بينما في الذرة ذات جميع الأغلفة الفرعية لها نفس الطاقة.

الإلكترونات المتعددة،

ومع ذلك، فإن الطاقات المختلفة

تختلف القذائف الفرعية في قذيفة معينة

بسبب التنافر بين الإلكترونات.



▲ **Figure 6.25** General energy ordering of orbitals for a many-electron atom.

Machine Translated by Google

6.7ذرات متعددة الإلكترونات

في ذرة متعددة الإلكترونات، لقيمة معينة من ،nطاقة
تزداد المدارات بزيادة قيمة . على سبيل المثال، مع ،n = 3تزداد المدارات في الطاقة
بالترتيب

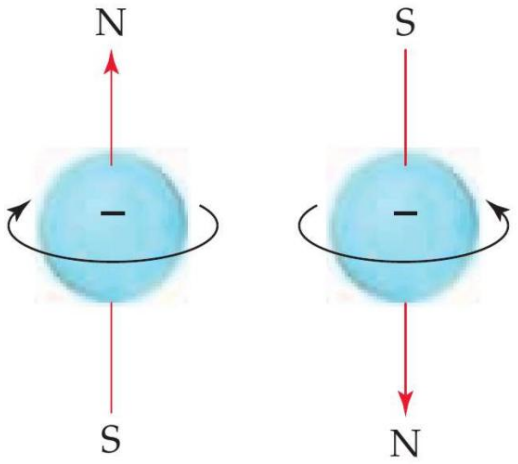
3ث <3ص <3د.

جميع المدارات في غلاف فرعي معين (مثل المدارات (dلها نفس
الطاقة؛ لذلك، يقال إن المدارات التي لها نفس الطاقة هي
منحط.

Machine Translated by Google

6.7ذرات متعددة الإلكترونات

دوران الإلكترون ومبدأ استبعاد باولي تمتلك الإلكترونات خاصية جوهرية تسمى دوران الإلكترون، والتي تجعل كل إلكترون يتصرف كما لو كان كرة صغيرة تدور حول محورها الخاص.



▲ **Figure 6.26** **Electron spin.** The electron behaves as if it were spinning about an axis, thereby generating a magnetic field whose direction depends on the direction of spin. The two directions for the magnetic field correspond to the two possible values for the spin quantum number, m_s. The magnetic fields that emanate from materials, like iron, arise because there are more electrons with one spin direction than the other.

يتم الإشارة إلى رقم كمي جديد، وهو رقم الكم المغناطيسي المغزلي، بالرمز ms . هناك قيمتان محتملتان مسموح بهما لـ ، ms

$+\frac{1}{2}$

أو $-\frac{1}{2}$.

Machine Translated by Google

6.7ذرات متعددة الإلكترونات

- تنتج الشحنة الدوارة مجالًا مغناطيسيًا.
- تنص مبدأ استبعاد باولي على أنه لا يوجد إلكترونين في الذرة

يمكن أن يكون لها نفس مجموعة الأعداد الكمية الأربعة ، ،nبالنسبة لمدار معين، تكون قيم ، ،nو ثابتة.

$$l \qquad m_l$$

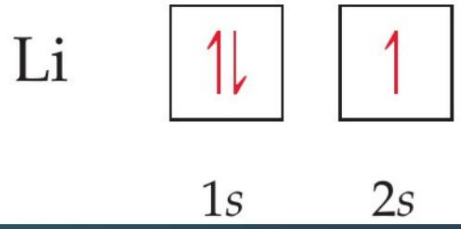
- يمكن للمدار أن يحتوي على إلكترونين كحد أقصى ويجب أن يكون لديهما دورات معاكسة.

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

الطريقة التي يتم بها توزيع الإلكترونات بين المدارات المختلفة للذرة تسمى الذرة بالتوزيع الإلكتروني للذرة.

التكوين الإلكتروني الأكثر استقرارًا، الحالة الأساسية، هو الذي تكون فيه الإلكترونات في أدنى مستويات الطاقة الممكنة. تمتلئ المدارات بترتيب تزايد الطاقة، مع عدم وجود أكثر من إلكترونين لكل مدار. على سبيل المثال، ضع في اعتبارك ذرة الليثيوم: . 1s2 2s1يمكننا أيضًا إظهار ترتيب الإلكترونات في التمثيل الذي يسمى بالمخطط المداري:



Machine Translated by Google

(1) في تمثيل الرسم البياني المداري، يوجد نصف سهم يشير إلى الأعلى

يمثل إلكترونًا له دوران مغناطيسي كمي موجب

الرقم ونصف السهم المشير إلى الأسفل يمثل $\left(m_s = +\frac{1}{2}\right)$،

إلكترون ذو عدد كمي مغناطيسي ذو دوران سلبي $\left(m_s = -\frac{1}{2}\right)$

يشير الكيميائيون إلى حالتي الدوران الممكنتين باسم "الدوران لأعلى" و"الدوران لأسفل" المتوافقة مع اتجاهات نصف الأسهم.

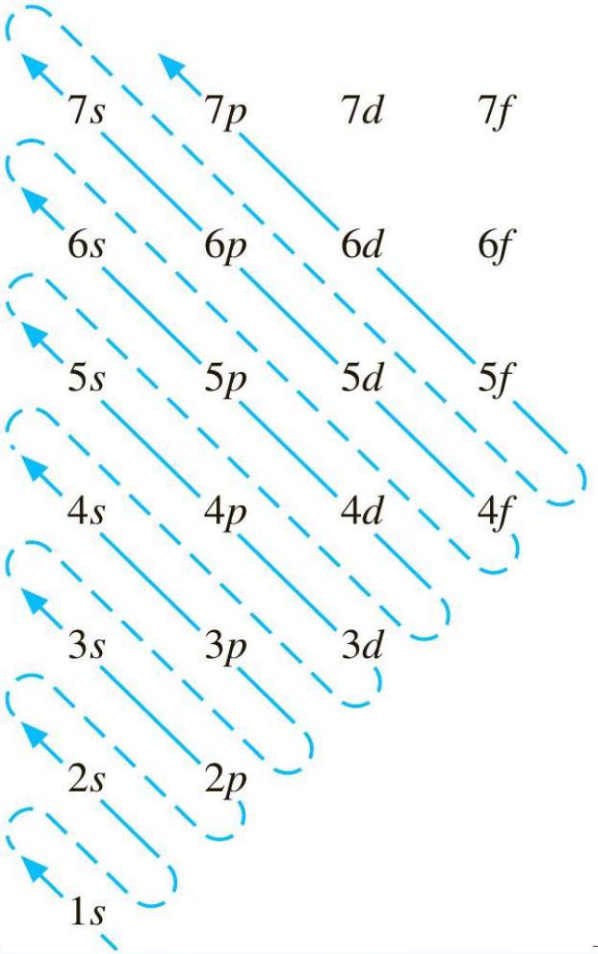
يقال أن الإلكترونات التي لها دوران متعاكس تكون مقترنة عندما تكون في نفس المدار (1ك).

الإلكترون غير المقترن هو الإلكترون الذي لا يصاحبه شريك له دوران معاكس.

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

مبدأ البناء (مبدأ أوفباو) مخطط يستخدم لإعادة إنتاج التكوينات الإلكترونية للحالات الأرضية للذرات عن طريق ملء الأغلفة الفرعية على التوالي بالإلكترونات في ترتيب معين (ترتيب البناء).



1ث، 2ث، 2ص، 3ث، 3ص، 4ث، 3د، 4ص، 5ث، 4د، 5ص، 6ث، 4و، 5د، 6ص، 7ث، 5و.

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

قاعدة هوند

تنص قاعدة هوند على أن

عند ملء التحلل
المدارات الأدنى

يتم الحصول على الطاقة عندما
عدد الالكترونات

أن يكون له نفس الدوران
تم تعظيمه.

الإلكترونات مرتبة في

ويقال أن هذه الطريقة لها

دورات متوازية.

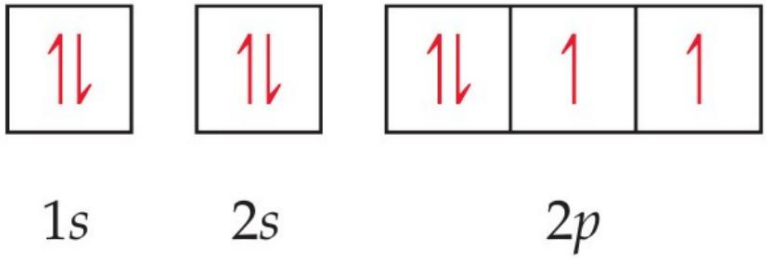
TABLE 6.3 Electron Configurations of Several Lighter Elements

Element	Total Electrons	Orbital Diagram				Electron Configuration
		1*s*	2*s*	2*p*	3*s*	
Li	3	↿⇂	↿			$1s^2 2s^1$
Be	4	↿⇂	↿⇂			$1s^2 2s^2$
B	5	↿⇂	↿⇂	↿		$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	↿⇂	↿⇂	↿ ↿		$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	↿⇂	↿⇂	↿ ↿ ↿		$1s^2 2s^2 2p^3$
Ne	10	↿⇂	↿⇂	↿⇂ ↿⇂ ↿⇂		$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	11	↿⇂	↿⇂	↿⇂ ↿⇂ ↿⇂	↿	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Machine Translated by Google

تمرين نموذجي 6.7

ارسم مخطط المدار للتوزيع الإلكتروني لذرة الأكسجين التي لها العدد الذري .8ما عدد الإلكترونات غير المزدوجة التي تمتلكها ذرة الأكسجين؟



يتم كتابة التوزيع الإلكتروني المقابل على النحو التالي: . 1s2 2s2 2p4تحتوي الذرة على إلكترونين غير مقترنين.

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

التكوينات الإلكترونية المكثفة عند كتابة التكوين الإلكتروني المكثف لعنصر ما، يتم تمثيل التكوين الإلكتروني لأقرب عنصر غاز نبيل ذي عدد ذري أقل برمزه الكيميائي بين قوسين. مثال: يمكننا اختصار التكوين الإلكتروني للصوديوم

مثل:

$$^{11}\mathrm{Na}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \equiv [\mathrm{Ne}]3s^1$$

نشير إلى الإلكترونات التي يمثلها الرمز الموجود بين قوسين باعتبارها جوهر الغاز النبيل في الذرة.

تُسمى الإلكترونات الموجودة في الغلاف الداخلي بالإلكترونات الأساسية.

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

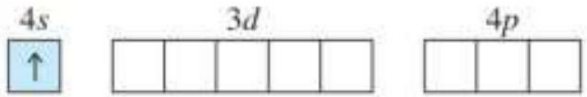
- تسمى الإلكترونات المعطاة بعد نواة الغاز النبيل بإلكترونات الغلاف الخارجي.

- تتضمن الإلكترونات الموجودة في الغلاف الخارجي الإلكترونات المشاركة في التفاعلات الكيميائية الرابطة، والتي تسمى بإلكترونات التكافؤ.

المعادن الانتقالية

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

Atomic Number	Element	Partial Orbital Diagram (4s, 3d, and 4p Sublevels Only)	Full Electron Configuration	Condensed Electron Configuration
19	K		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^1$	[Ar] $4s^1$
20	Ca		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2$	[Ar] $4s^2$
21	Sc		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^1$	[Ar] $4s^2 3d^1$
22	Ti		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^2$	[Ar] $4s^2 3d^2$
23	V		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^3$	[Ar] $4s^2 3d^3$
24	Cr	سلوك شاذ	$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^1 3d^5$	[Ar] $4s^1 3d^5$
25	Mn		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^5$	[Ar] $4s^2 3d^5$
26	Fe		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^6$	[Ar] $4s^2 3d^6$
27	Co		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^7$	[Ar] $4s^2 3d^7$
28	Ni		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^8$	[Ar] $4s^2 3d^8$
29	Cu	سلوك شاذ	$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^1 3d^{10}$	[Ar] $4s^1 3d^{10}$
30	Zn		$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^{10}$	[Ar] $4s^2 3d^{10}$

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

اللانثانيدات والأكتينيدات

العناصر الـ 14المقابلة لملء المدارات 4fتُعرف إما بالعناصر اللانثانيدية أو بالعناصر الأرضية النادرة.

نظرًا لأن طاقات المدارات 4fو5d قريبة جدًا من بعضها البعض، فإن التكوينات الإلكترونية لبعض اللانثانيدات تنطوي على إلكترونات 5d.

$^{57}\text{Lanthanum: } [\text{Xe}]6s^2 5d^1$

$^{58}\text{Cerium: } [\text{Xe}]6s^2 4f^1 5d^1$

$^{59}\text{Praseodymium: } [\text{Xe}]6s^2 4f^3$

$^{60}\text{Neodymium: } [\text{Xe}]6s^2 4f^4$

Machine Translated by Google

6.8تكوينات الإلكترون

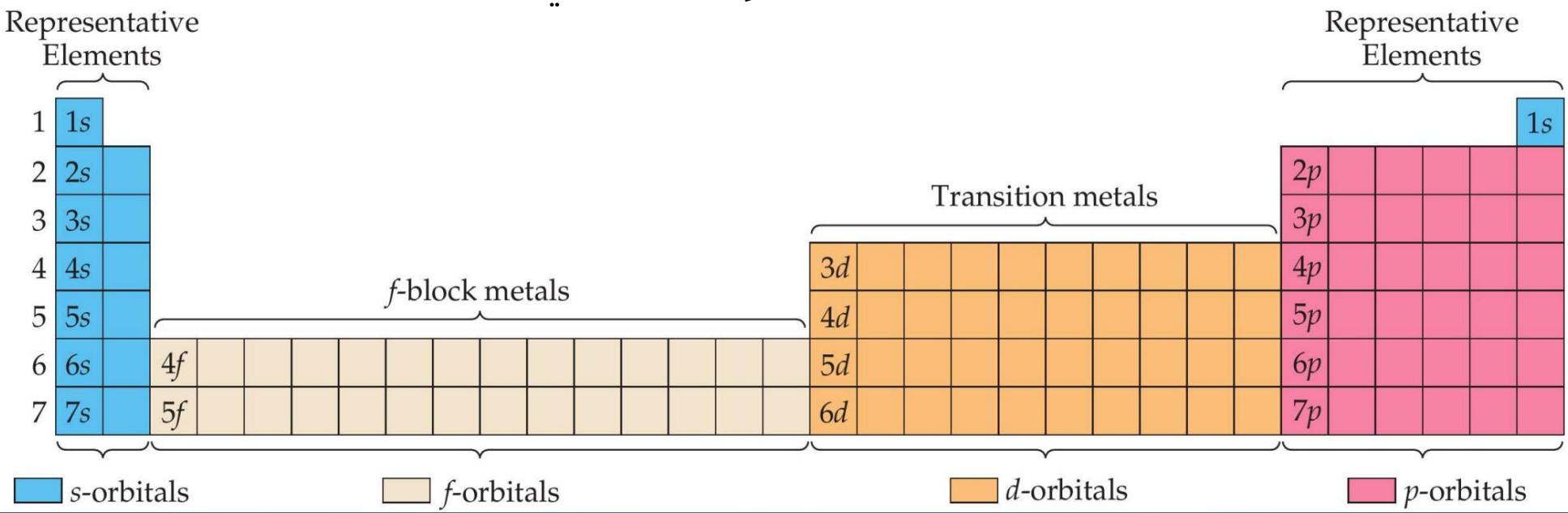
- يبدأ الصف الأخير من الجدول الدوري بملء المدارات 7s. يتم بعد ذلك بناء عناصر الأكتينيدات، والتي يعتبر اليورانيوم (U، العنصر 92) والبلوتونيوم (Pu، العنصر 94) الأكثر شهرة منها، عن طريق إكمال المدارات 5f.

Machine Translated by Google

6.9توزيعات الإلكترونات والجدول الدوري

تتوافق التكوينات الإلكترونية للعناصر مع مواقعها في الجدول الدوري. وبالتالي، فإن العناصر الموجودة في نفس العمود من الجدول لها تكوينات خارجية ذات صلة

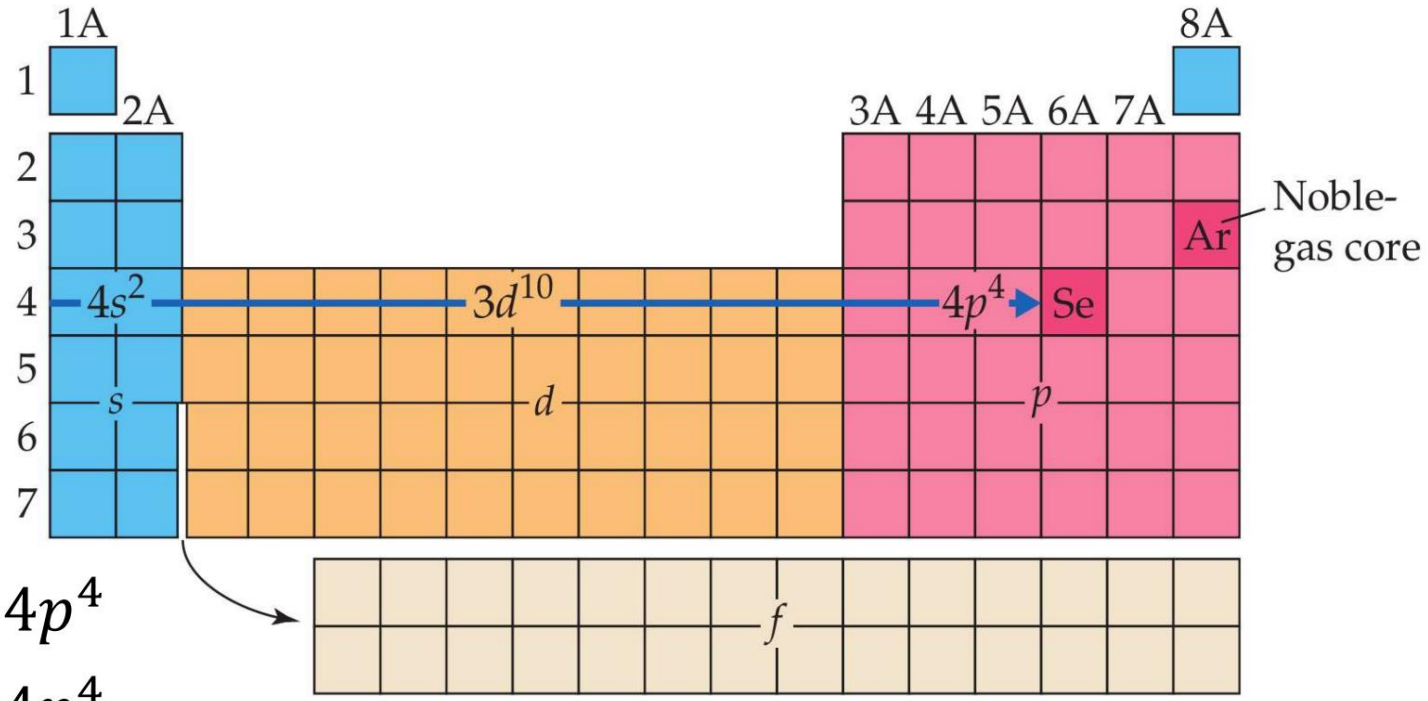
تكوينات الإلكترونات في الغلاف (التكافؤ).



Machine Translated by Google

6.9توزيعات الإلكترونات والجدول الدوري

يمكنك كتابة التوزيع الإلكتروني لعنصر بناءً على
حول موقعه في الجدول الدوري.



^{34}Se: $[Ar]4s^2 3d^{10} 4p^4$

^{34}Se: $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^4$

Machine Translated by Google

تمرين نموذجي 6.8

ما هو التوزيع الإلكتروني التكافؤي المميز لعناصر المجموعة 7A، الهالوجينات؟

$^{9}\mathrm{F}: [\mathrm{He}]2s^2 2p^5$

$^{17}\mathrm{Cl}: [\mathrm{Ne}]3s^2 3p^5$

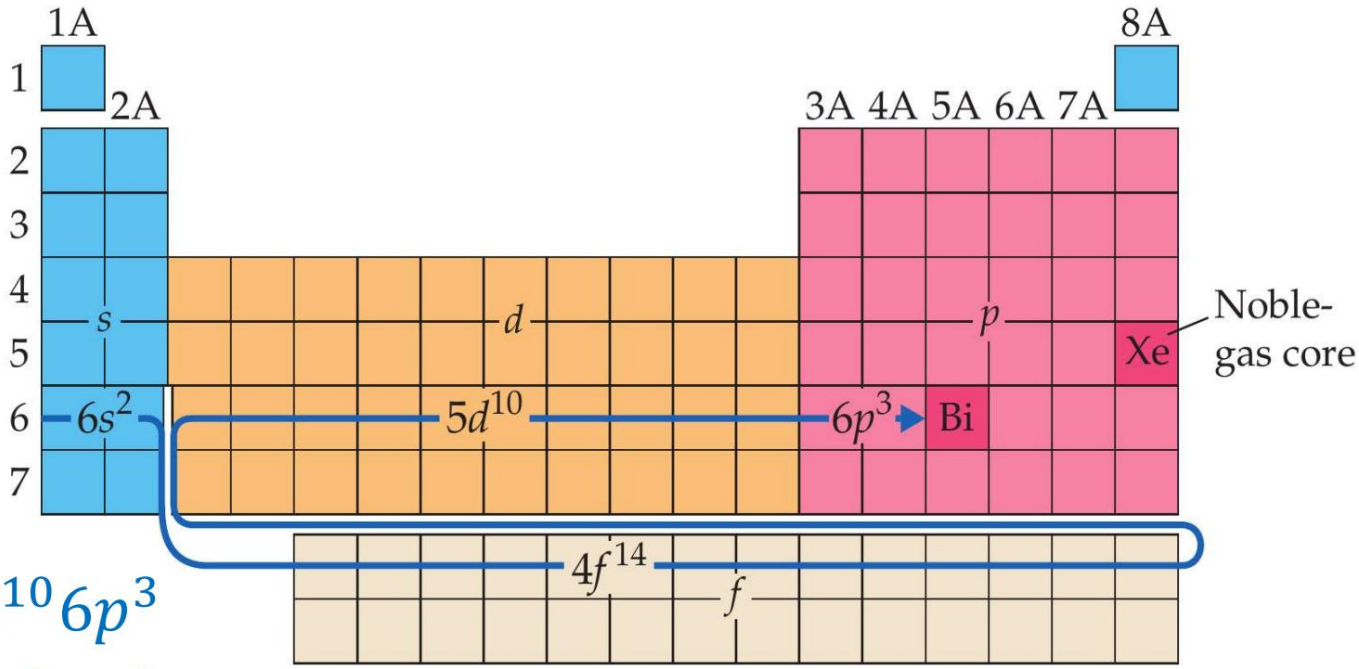
- التوزيع الإلكتروني التكافؤي المميز للهالوجين هو ns2np5 ، حيث يتراوح n من 2 في حالة الفلور إلى 6 في حالة الأستاتين.

Machine Translated by Google

تمرين نموذجي 6.9

أ. بناءً على موقعه في الجدول الدوري، اكتب الصيغة المكثفة

التوزيع الإلكتروني للعنصر 83من البزموت.



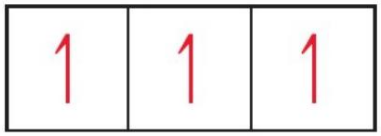
$^{83}\mathrm{Bi}: [\mathrm{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$

$^{83}\mathrm{Bi}: [\mathrm{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$

Machine Translated by Google

تمرين نموذجي 6.9

ب. ما عدد الإلكترونات غير المزدوجة الموجودة في ذرة البزموت؟



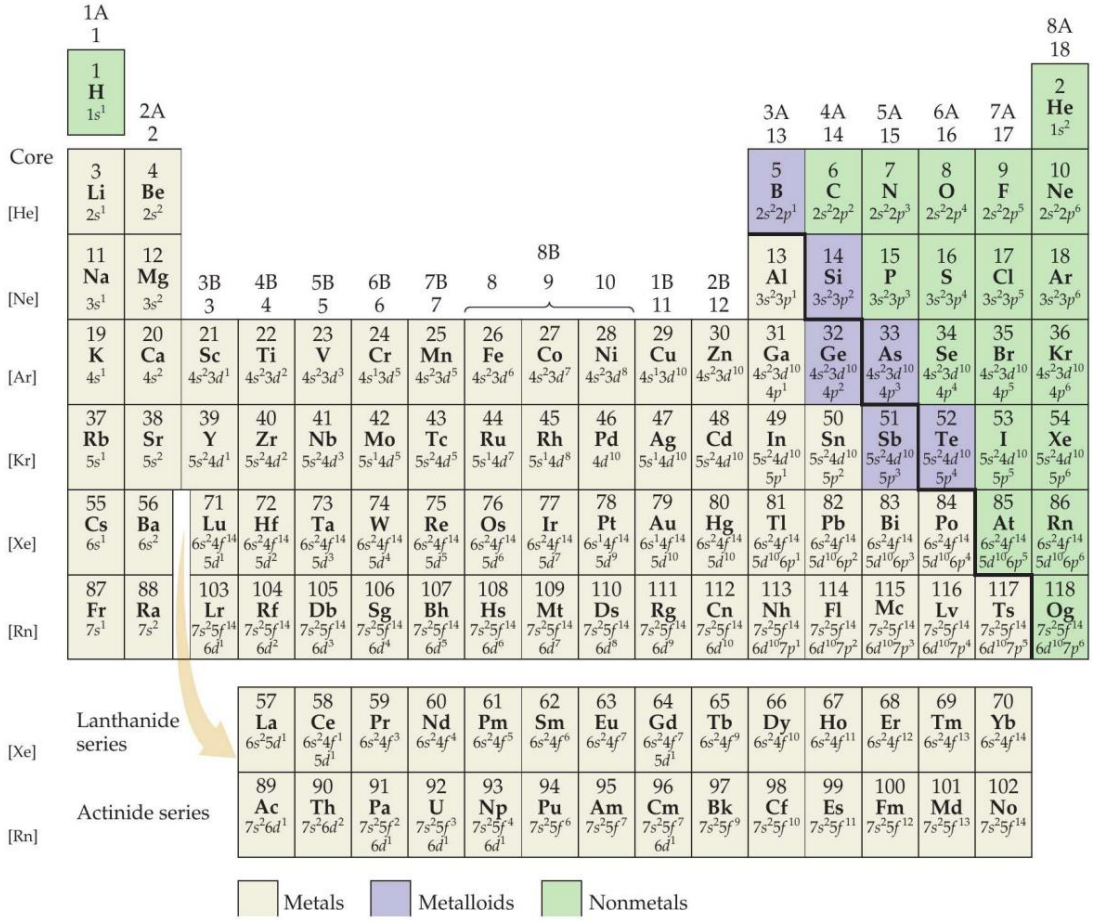
هناك ثلاثة إلكترونات غير مقترنة في ذرة البزموت.

Machine Translated by Google

6.9توزيعات الإلكترونات والجدول الدوري

بالنسبة للعناصر التمثيلية، لا نعتبر الإلكترونات الموجودة في الغلاف الفرعي d أو f الممتلئ بالكامل إلكترونات تكافؤ. بالنسبة للعناصر الانتقالية، لا نعتبر الإلكترونات الموجودة في الغلاف الفرعي f الممتلئ بالكامل إلكترونات تكافؤ.

9



▲ Figure 6.31 Outer-shell electron configurations of the elements.