

Term Symbols (Russell-Saunders Terms) (رموز الحالة)

يعطى كل ترتيب الكتروني رمز يستخدم هذا الرمز لإستخراج خصائص معينة بالذرة أو الأيون كالإنتقالات الألكترونية أو مستوى الطاقة... الخ. ولأي نظام يمتلك عدد من الألكترونات n electrons ممكن إستخراج رمز الحالة كما يلي:

الزخم الزاوي الأوربتالي الكلي ML وهو مجموع الزخوم الزاوية الأوربتالية لكل الألكترونات في الغلاف المدرس

$$ML = m_{l_1} + m_{l_2} + m_{l_3} + \dots + m_{l_n}$$

الزخم الزاوي البرمي الكلي MS وهو مجموع الزخوم الزاوية البرمية لكل الألكترونات في الغلاف المدرس

$$MS = m_{s_1} + m_{s_2} + m_{s_3} + \dots + m_{s_n}$$

$$2S+1 \quad \mathbf{L}_J$$

وهناك صيغة ترابط بين L و ML وأيضا S و MS وكما يلي:

$$ML = L, L-1, L-2, \dots, -L$$

$$MS = S, S-1, S-2, \dots, -S$$

L = Total orbital angular momentum.

S = Total spin

$$J = |L+S|, \dots, |L-S|$$

(small letters always reserved for individual electrons)

$$L=0 \rightarrow (\mathbf{S}); \quad L=1 \rightarrow (\mathbf{P}); \quad L=2 \rightarrow (\mathbf{D});$$

$$L=3 \rightarrow (\mathbf{F}); \quad L=4 \rightarrow (\mathbf{G}); \quad L=5 \rightarrow (\mathbf{H})$$

مثال (١-٢٣) / إستخرج رمز الحالة للحالة الأكثر إستقراراً للنتروجين ؟



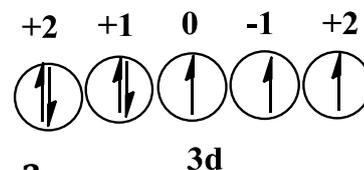
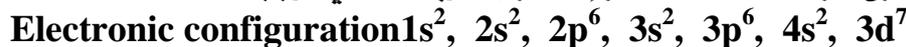
$$S = 1/2 + 1/2 + 1 = 3/2 \quad \longrightarrow \quad 2S+1 = 2 \times \frac{3}{2} + 1 = 4$$

$$L = +1 + 0 + (-1) = 0$$

$$J = |0 + 3/2|, \dots, |0 - 3/2| = 3/2$$

$$\begin{array}{l} 2S+1 \longrightarrow 4 \\ L \longrightarrow \mathbf{S} \\ J \longrightarrow \frac{3}{2} \end{array}$$

مثال (١-٢٤) / إستخرج رمز الحالة للحالة الأكثر إستقراراً للكوبلت الثنائي الموجب ؟



$$S = +1/2 + (-1/2) + 1/2 + 1/2 + 1 = 3/2 \quad \longrightarrow \quad 2S+1 = 2 \times \frac{3}{2} + 1 = 4$$

$$L = 4 + 2 + 0 - 1 - 2 = 3$$

$$\begin{array}{l} 2S+1 \longrightarrow 4 \\ L \longrightarrow \mathbf{F} \\ J \longrightarrow \frac{9}{2} \end{array}$$

More than half filled orbital $J = 3 + \frac{3}{2} = \frac{9}{2}$

مثال (١-٢٥) / استخراج رمز الحالة للحالة الأكثر استقراراً وكذلك رموز حالات الإثارة لذرة الكربون؟

جدول (١-٧) استخراج رمز حالة السكون ورموز الإثارة بطريقة الجدول

Electronic configuration $1s^2, 2s^2, 2p^2$

برمين الى الأعلى

بـرم متعكس

برمين الى الاسفل



MS ML	1	0	-1	
+2	$\begin{matrix} + & + \\ (1,1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} + & - \\ (1,1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} - & - \\ (1,1) \end{matrix}$ 	$1s$
+1	$\begin{matrix} + & + \\ (1,0) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} + & - \\ (1,0) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} - & + \\ (1,0) \end{matrix}$ 	2nd E.S
0	$\begin{matrix} + & + \\ (1,-1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} + & - \\ (1,-1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} - & + \\ (1,-1) \end{matrix}$ 	$1D$
		$\begin{matrix} + & - \\ (0,0) \end{matrix}$ 		1st E.S
-1	$\begin{matrix} + & + \\ (0,-1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} + & - \\ (0,-1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} - & + \\ (0,-1) \end{matrix}$ 	$3P$
-2	$\begin{matrix} + & + \\ (-1,-1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} + & - \\ (-1,-1) \end{matrix}$ 	$\begin{matrix} - & - \\ (-1,-1) \end{matrix}$ 	G.S

1. نختار أولاً أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة ترافقها من (S) وهنا (+1) (+1)
2. نستخرج $(2L+1) \times (2S+1)$ وهنا $(3) \times (3) = (9)$ يعني تسعة حالات دقيقة مشتقة من هذه الحالة.
3. نحذف من الجدول ثلاث حالات (MS=+1) وثلاث حالات عشوائية من (MS=0) وثلاث حالات من (MS=-1).
4. لما كان (L=1) و (S=1) اذن رمز الحالة 3P .
5. نختار أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة ترافقها من (S) من القيم المتبقية بعد الحذف وهنا (L=2) و (S=0).

٦. نستخرج $(2L+1)(2S+1)$ وهنا $(5)=(1) \times (5)$ يعني خمس حالات دقيقة مشتقة من هذه الحالة .
٧. نحذف من الجدول خمس حالات $(MS=0)$.
٨. لما كان $(L=2)$ و $(S=0)$ اذن رمز الحالة (^1D) .
٩. نختار أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة ترافقها من (S) من القيم المتبقية بعد الحذف وهنا $(L=0)$ و $(S=0)$
١٠. اذن هنا حالة واحدة لما كان $(L=0)$ و $(S=0)$ اذن رمز الحالة (^1S) .
١١. يتم ترتيب الحالات حسب طاقتها (الاقل طاقة ثم الاعلى) [فالوطاً طاقة هو الاعلى قيمة $(2S+1)$ واذا تساوت قيم التعددية فالوطاً طاقة هو الاعلى قيمة لـ (L)].
١٢. اذن اصبح التسلسل $(^1S < ^1D < ^3P)$ ورمز حالة السكون (^3P) ground state is
- إختيار قيمة J:**

أ. إذا كان الغلاف **أكثر** من نصف مشبع نختار قيمة **J** المساوية لمجموع الزخمين الكليين البرمي والأوربتالي. $[J=L+S]$.

ب. إذا كان الغلاف **أقل** من نصف مشبع نختار قيمة **J** المساوية لمجموع لفرق بين الزخمين الكليين الأوربتالي والبرمي $[J=L-S]$

ت. إذا كان الغلاف **نصف مشبع** نختار قيمة **J** المساوية لـ $[J=S]$ ، لأن $L=0$.

عدد الحالات الدقيقة Number of microstates

يمكن استخراج الحالات الدقيقة وهي مجموع الحالات التي يمكن ان تتوزع فيها الألكترونات لتكوين رموز الحالة المستقرة والمثارة وذلك باستخدام القانون التالي :

$$\text{Number of microstates} = \frac{n!}{e!h!}$$

حيث **h** تساوي عدد الألكترونات الكلي التي يمكن ان يستوعبها الأوربتال مطروحاً منه عدد

الألكترونات الموجودة فعلاً في الأوربتال $(h = n - e)$ ، $e = \text{number of electrons}$ ، $n = 2 \times \text{number of orbitals}$ وهكذا:

$$\text{For } ^6\text{C(G.S) Number of microstates} = \frac{(2 \times 3)!}{2! \times (6-2)!} = \frac{720}{48} = 15$$

مثال (١-٢٦) / استخراج رمز الحالة للحالة الأكثر إستقراراً وكذلك رموز حالات الإثارة لأيون الفناديوم الثلاثي V^{3+} كم هي عدد الحالات الدقيقة التي يتضمنها الترتيب الألكتروني لهذا الأيون ؟

Electronic configuration $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^0, 3d^2$

$$\text{Number of microstates} = \frac{(2 \times 5)!}{2! \times (10-2)!} = \frac{3628800}{2 \times 40320} = 45$$

طريقة اشتقاق رموز الحالة Russel-Saunders وفقاً لطريقة الحذف:

V^{3+} electronic configuration $= 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^0, 3d^2$

جدول (٨-١) استخراج رمز حالة السكون ورموز الإثارة بطريقة الحذف

$M_s \backslash m_l$	+2	+1	0	-1	-2	ML		
0	↑↓					4	←	G
1	↑	↑				3	—	F
1	↑		↑			2	—	F
1	↑			↑		1	—	F
1	↑				↑	0	—	F
0		↑↓				2	◇	D
1		↑	↑			1	—	P
1		↑		↑		0	—	P
1		↑			↑	-1	—	F
0			↑↓			0	○	S
1			↑	↑		-1	—	P
1			↑		↑	-2	—	F
0				↑↓		-2	◇	D
1				↑	↑	-3	—	F
0					↑↓	-4	←	G
0	↑	↓				3	F
0	↑		↓			2	F
0	↑			↓		1	F
0	↑				↓	0	F
0	↓	↑				3	←	G
0	↓		↑			2	←	G
0	↓			↑		1	—	P
0	↓				↑	0	—	P

$M_s \backslash m_l$	+2	+1	0	-1	-2	ML		
0		↑	↓			+1	←	G
0		↑		↓		0	←	G
0		↑			↓	-1	F
0		↓	↑			+1	◇	D
0		↓		↑		0	◇	D
0		↓			↑	-1	—	P
0			↑	↓		-1	←	G
0			↑		↓	-2	←	G
0			↓	↑		-1	◇	D
0			↓		↑	-2	F
0				↑	↓	-3	F
0				↓	↑	-3	←	G
-1	↓	↓				+3	☆	F
-1	↓		↓			+2	☆	F
-1	↓			↓		+1	☆	F
-1	↓				↓	0	☆	F
-1		↓	↓			+1	○	P
-1		↓		↓		0	○	P
-1		↓			↓	-1	○	P
-1			↓	↓		-1	☆	F
-1				↓	↓	-2	☆	F
-1					↓	-3	☆	F

- ١- نختار أولاً أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة ترافقها من (S) وهنا (+3) (+1)
- ٢- نستخرج $(2L+1) \times (2S+1) = 21$ وهنا $(2L+1)(2S+1) = (2 \times 3 + 1)(2 \times 1 + 1) = 21$ states
يعني واحد وعشرين حالة دقيقة مشتقة من هذه الحالة .
- ٣- نحذف من الجدول $7(M_s=1)$ و $7(M_s=0)$ و $7(M_s=-1)$
لما كان (L=3) و (S=1) إذن رمز الحالة 3F .
- ٤- نختار أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة ترافقها من (S) من القيم المتبقية بعد الحذف وهنا (L=1) و (S=1).
- ٥- نستخرج $(2L+1)(2S+1) = 9$ وهنا $(2L+1)(2S+1) = (2 \times 1 + 1)(2 \times 1 + 1) = 9$ states
يعني خمس حالات دقيقة مشتقة من هذه الحالة .
- ٦- نحذف من الجدول تسع حالات
- ٧- لما كان (L=1) و (S=1) إذن رمز الحالة $({}^3P)$.

٨- نختار أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة تراقفها من (S) من القيم المتبقية بعد الحذف وهنا (L=4) و (S=0)

$$(2L+1)(2S+1)=(2 \times 4+1)(2 \times 0+1)=9 \text{ states}$$

٩- إذن هنا تسع حالات لما كان (L=4) و (S=0) إذن رمز الحالة (1G).

١٠- نختار أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة تراقفها من (S) من القيم المتبقية بعد الحذف وهنا (L=2) و (S=0)

$$(2L+1)(2S+1)=(2 \times 2+1)(2 \times 0+1)=5 \text{ states}$$

١١- إذن هنا خمس حالات لما كان (L=2) و (S=0) إذن رمز الحالة (1D).

١٢- نختار أعلى قيمة لـ (L) وأعلى قيمة تراقفها من (S) من القيم المتبقية بعد الحذف وهنا (L=0) و (S=0)

$$(2L+1)(2S+1)=(2 \times 0+1)(2 \times 0+1)=1 \text{ state}$$

١٣- إذن هنا حالة واحدة لما كان (L=0) و (S=0) إذن رمز الحالة (1S).

١٤- يتم ترتيب الحالات حسب طاقتها (الاقبل طاقة ثم الاعلى) [فالواطأ طاقة هو الاعلى قيمة ($2S+1$) وإذا تساوت قيم التعددية

فالواطأ طاقة هو الاعلى قيمة لـ (L).

$$^3F < ^3P < ^1G < ^1D < ^1S$$

إذن اصبح التسلسل

جدول (١-٩) استخراج رمز حالة السكون ورموز الإثارة بطريقة الجدول

M _S \ M _L	1	0	-1
4		$(\overset{+}{2}, \overset{-}{2})$	
3	$(\overset{+}{2}, \overset{+}{1})$	$(\overset{+}{2}, \overset{-}{1})$ $(\overset{-}{2}, \overset{+}{1})$	$(\overset{-}{2}, \overset{-}{1})$
2	$(\overset{+}{2}, \overset{0}{0})$	$(\overset{+}{2}, \overset{0}{0})$ $(\overset{-}{2}, \overset{+}{0})$ $(\overset{+}{1}, \overset{-}{1})$	$(\overset{-}{2}, \overset{0}{0})$
1	$(\overset{+}{1}, \overset{+}{0})$ $(\overset{+}{2}, \overset{-}{1})$	$(\overset{+}{1}, \overset{-}{0})$ $(\overset{+}{1}, \overset{-}{0})$ $(\overset{-}{2}, \overset{-}{1})$ $(\overset{-}{2}, \overset{-}{1})$	$(\overset{-}{1}, \overset{-}{0})$ $(\overset{-}{2}, \overset{-}{1})$
0	$(\overset{+}{2}, \overset{-}{2})$ $(\overset{+}{1}, \overset{-}{1})$	$(\overset{+}{2}, \overset{-}{2})$ $(\overset{+}{2}, \overset{-}{2})$ $(\overset{-}{1}, \overset{-}{1})$ $(\overset{-}{1}, \overset{-}{1})$ $(\overset{0}{0}, \overset{0}{0})$	$(\overset{-}{2}, \overset{-}{2})$ $(\overset{-}{1}, \overset{-}{1})$
-1	$(\overset{+}{-1}, \overset{+}{0})$ $(\overset{+}{1}, \overset{-}{2})$	$(\overset{+}{-1}, \overset{0}{0})$ $(\overset{+}{-1}, \overset{0}{0})$ $(\overset{-}{1}, \overset{-}{2})$ $(\overset{-}{1}, \overset{-}{2})$	$(\overset{-}{-1}, \overset{-}{0})$ $(\overset{-}{1}, \overset{-}{2})$
-2	$(\overset{+}{-2}, \overset{+}{0})$	$(\overset{+}{-2}, \overset{-}{0})$ $(\overset{+}{-2}, \overset{-}{0})$ $(\overset{-}{-1}, \overset{-}{1})$	$(\overset{-}{-2}, \overset{0}{0})$
-3	$(\overset{+}{-1}, \overset{-}{2})$	$(\overset{+}{-1}, \overset{-}{2})$ $(\overset{-}{-1}, \overset{-}{2})$	$(\overset{-}{-1}, \overset{-}{2})$
-4		$(\overset{+}{-2}, \overset{-}{2})$	

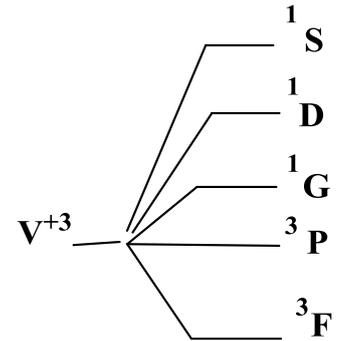
$1S$

$1D$

$1G$

$3P$

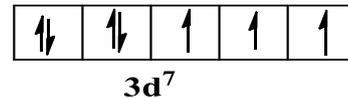
$3F$



مثال (١-٢٧) / استخراج رمز الحالة لـ V^{+3} باستخدام الجدول التالي (١٠) (٢٧) =27)

$$Co=1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^7$$

$$Co^{2+}=1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^0, 3d^7$$



$$\sum m_l = 4+2+0-1-2=3 \rightarrow L=3 \rightarrow F$$

- ◆ تتشابه عناصر المجموعة الواحدة في الخصائص، والتركيب الإلكتروني في المدار الأخير .
 - ◆ تميل عناصر المجموعة الأولى والثانية والثالثة لفقدان الإلكترونات، لتصبح أكثر كهروموجبية .
 - ◆ تميل المجموعة الرابعة والخامسة والسادسة والسابعة لكسب الإلكترونات، وتصبح أكثر كهروسالبيية .
 - ◆ تنتهي كل دورة في الجدول **بعنصر نبيل**، ويتميز بأنه ممتلئ المدار الأخير
 - ◆ تحدد إلكترونات التكافؤ، أو عدد إلكترونات المدار الأخير **رقم الدورة** التي ينتمي إليها العنصر في الجدول الدوري
 - ◆ تقع في أسفل الجدول الدوري سلسلتان طويلتان من العناصر، ويُطلق على السلسلة الأولى **لانتانيدات**، والثانية **الأكتيديات**، وتحتوي كل سلسلة ١٤ **عنصرًا**، وتنتمي إلى مجموعة العناصر المعدنية الانتقالية .
 - ◆ تصنف عناصر الجدول الدوري إلى: **فلزات** (معادن)، ولا فلزات (لامعادن)، و**أشباه الفلزات** (لها خصائص مشتركة بين النوعين).
 - ◆ تقل الكهروسالبيية عند الانتقال من اليمين إلى اليسار في عناصر الجدول الدوري.
- تقسيم الجدول الدوري الى المناطق التالية:**
- ١- العناصر المثلثة وهي على نوعين: أ- عناصر بلوك **S** وتضم عناصر الطائفة الأولى والثانية (العناصر القلوية والعناصر القلوية الترابية) وترقم على شكلين القديم **(2A, 1A)**.
 - والحديث **(2, 1)**. ب- عناصر بلوك **P** وهي العناصر الطوائف التي تبتدئ بالرقم **(3A)** والحديث **(13)** (طائفة البورون) الى الطائفة **(7A)**. (الهالوجينات) والحديث **(17)**
 - ٢- عناصر بلوك **d** وهي العناصر التي تبتدئ بالسكانديوم (المجموعة **3B**) أو **(3)** ثم التيتانيوم **(4B)** أو **(4)** ثم الفناديوم **(5B)** أو **(5)** ثم الكروميوم والمنغيز أو **(7B)** **(6, 7)** أو **(6B)**، على التوالي تليها المجموعة البلاتينية وتشمل الحديد الكوبلت والنيكل وترقم بـ **(8B)** أو **(8, 9, 10)** . ثم مجموعة النحاس المرقمة **(1B)** أو **(11)** ومجموعة الزنك المرقمة **(2B)** . أو **(12)** وفق الترقيم الحديث.
 - ٣- عناصر بلوك **f** وهي العناصر التي تبتدئ باللانثانيوم والأكتينيوم وعدد كل سلسلة **(14)** عنصر.
 - ٤- عناصر البلوك **0** وهي العناصر التي يكون غلافها مملوء بالإلكترونات وتسمى أيضاً العناصر النبيلة وتبتدئ الهليوم وتنتهي بالردون. وترقم قديماً بـ **أو (8A)** وحديثاً بـ **أو (18)**.

نصف القطر التساهمي Covalent Radius

هو باختصار نصف المسافة بين نواتي الذرتين المترابطتين بأصرة تساهمية مفردة.

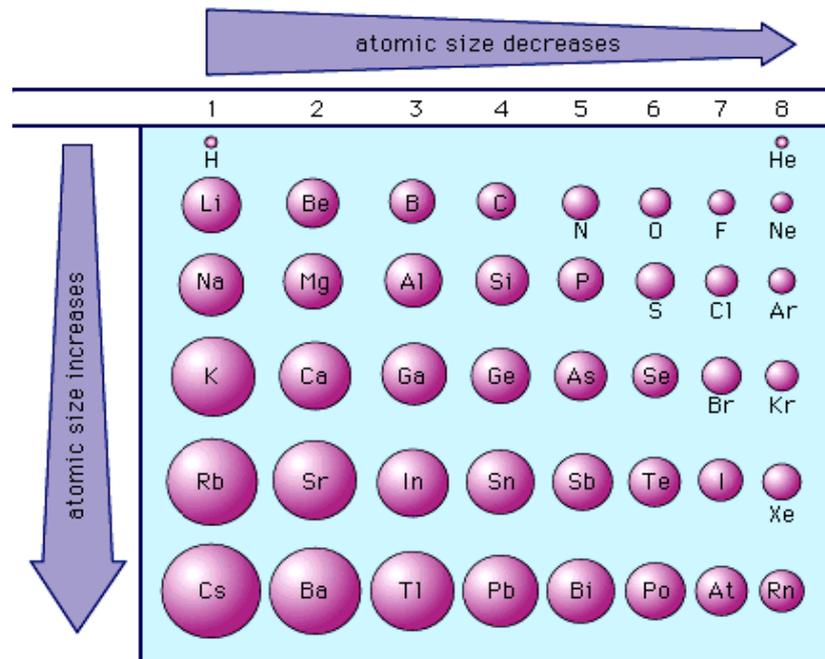
جدول (١ - ١٠) استخراج نصف القطر التساهمي

Element	Bond length(pm)	Atomic radius (pm)
H ₂	74	37*
F ₂	142	71*
Cl ₂	199	99
C (diamond)	154	77
Si	234	117
*Accepted values are H: 29 ; F: 64 pm		

في حالة الذرات التي لا تكون أصرة مفردة. في حالة ترتيبها كعناصر ممكن حساب نصف قطرها التساهمي من قياس طول الأصرة الظاهري الذي تكونه خلال تأصرها مع عناصر أخرى معلومة النصف قطر فمثلاً طول الأصرة Si-C في المركب $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ مساوي الى (77+117) 194 بيكومتر لذى فإننا نلاحظ ان نصف القطر لم يختلف عن المركب التساهمي. عند اختلاف سالبية الذرات المترابطة ذلك يؤدي الى قصر في الأصرة وقد اعطى العالمان شوماخر Schomaker وستيفنسن Stevenson العلاقة التالية لجزيئة متكونة من ذرتين AB ويكون فرق السالبية بينهما χ_A and χ_B

$$r_{A-B} = r_A + r_B - 0.09(\chi_A - \chi_B)$$

تعدد الأواصر أيضاً يسبب قصر في طول الأصرة وعادة الأصرة المزدوجة أقل بحوالي 86% والأصرة الثلاثية أقل بحوالي 78% لناصر الدورة الثانية (Li.....F)

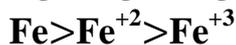
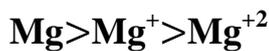


شكل (٢٦-١) تغير انصاف الأقطار الذرية حسب الدورات والطوائف

نصف القطر الأيوني Ionic Radius

هو نصف المسافة المؤثرة بين نواة أحد الأيونين حتى يمكنه تكوين أصرة أيونية .

◆ نصف قطر الأيون الفلزي (الأيون الموجب) أقل من نصف قطر الذرة وذلك لأنه في الغالب إزالة الغلاف الخارجي للذرة عند تكوين أيون الموجب.



◆ نصف قطر الأيون اللافلزي (الأيون السالب) هو أكبر من نصف قطر الذرة .

$$O^{-2} > O^{-1} > O \quad F^{-1} > F \quad I^{-1} > I > I^{+}$$

◆ أنصاف الأقطار للفصائل المتشابهة الكترونياً **Isoelectronic species** هنا يعتمد نصف قطر الفصائل على شحنة النواة حيث يقل نصف القطر بزيادة شحنة النواة (شحنة النواة الكبيرة تسبب جذب كبير للعدد المتساوي من الألكترونات مما يؤدي الى تقلص حجم الفصائل).

$$N^{-3}, O^{-2}, F^{-1}, Na^{+1}, Mg^{+2}, Al^{+3}, Si^{+4} \propto \frac{1}{Z}$$

Thus greater the value of (e/z), greater the size of isoelectronic species

جدول (١-١) نصف القطر للمركبات المتشابهة الكترونياً

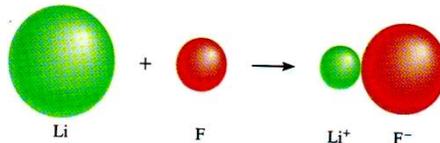
Ion	Z	No. Electrons	e/z
N ⁻³	7	10	1.43
O ⁻²	8	10	1.25
F ⁻¹	9	10	1.11
Na ⁺	11	10	0.91
Mg ⁺²	12	10	0.83
Al ⁺³	13	10	0.77
Si ⁺⁴	14	10	0.71

◆ في الدورات الرئيسية للعناصر الممثلة فإن نصف القطر يزداد كلما نزلنا الى الأسفل وذلك لإزداد عدد الأغلفة.

$$\begin{array}{ccc} Li^{+} & Na^{+} & K^{+} \\ 76 \text{ pm} & 102 \text{ pm} & 138 \text{ pm} \end{array}$$

◆ في الدورات الرئيسية للعناصر الممثلة فإن نصف القطر يقل كلما إتجهنا من اليسار الى اليمين وذلك لإزداد شحنة النواة.

$$\begin{array}{ccc} Na^{+} & Mg^{+2} & Al^{+3} \\ 102 \text{ pm} & 72 \text{ pm} & 53.5 \text{ pm} \end{array}$$



الحجب Shielding

لأن تأثير الألكترونات في الأغلفة المختلفة على قوة جذب النواة الموجبة على الألكترونات الخارجية يختلف في مقداره لذا توجب دراسة الحجب الذي توفره هذه الأغلفة وبالتالي معرفة شحنة النواة المؤثرة على الألكترونات الخارجية وكما يلي:

تأثير الحجب والشحنة المؤثرة للنواة Shielding(Screening) Effect and Effective Nuclear Charge

دعنا أولاً نراجع معادلة بور Bohr's equation لحساب طاقة الألكترون

$$E = - \frac{2\pi^2 m_e z^2 e^4}{n^2 h^2}$$

وهكذا فطاقة الألكترون تعتمد على الألكترون $\frac{z^2}{n^2}$ وفي الحقيقة إن زيادة شحنة النواة (z) عن المعدل في عدد كمي معين (n) تزيد الطاقة اللازمة للتأين وكذلك فإن نقصان الأغلفة يؤدي أيضاً الى زيادة طاقة التأين باعتبار ان المعادلة مسبوقه بإشارة سالبة ، لاحظ المعادلة

$$IP_H(13.6eV) \gg IP_{Li}(5.4eV)$$

هذا يعني إن الألكترونات الخارجية لا تشعر مباشرة بقوة النواة

$$Z^* = Z - S \text{ where } S = \text{Screening constant}$$

ولحساب الحجب والشحنة المؤثرة للنواة نتبع مايلي:

- أكتب الترتيب الألكتروني **electronic configuration** للعنصر و حسب قاعة الملاء الألكتروني. **Aufbau principle** كما مبين أدناه:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d

- ضع الألكترونات التي حصلت على ترتيبها في الخطوة السابقة وبنفس أغلفتها ولكن بالترتيب الآتي:

(1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p) (5d)...

لتحصل على مجاميع جديدة محصورة بين أقواس.

- أي الكترون يقع الى يمين الألكترون المطلوب حساب الحجب لا يدخل في الحساب.

- ثابت الحجب الكلي يتكون من مجموع الخطوات اللاحقة وكما يلي:

- كل الألكترونات المحصورة بين الأقواس التي تضم الألكترون المدروس تحجب 0.35 من شحنة النواة. ماعدا اقواس الغلاف 1s فهي تحجب فقط 0.30 من شحنة النواة.

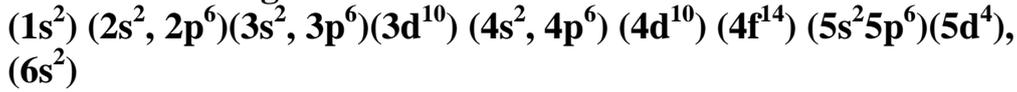
- إذا كان الغلاف من نوع [s, p] فكل الألكترونات المحصورة بين الأقواس التي تضم الألكترون المدروس تحجب 0.85 من شحنة النواة للأغلفة (n-1) و 1.00 من شحنة النواة للأغلفة (n-2) فما دون.

- إذا كان الغلاف من نوع [d, f] فكل الألكترونات المحصورة بين الأقواس التي تضم الألكترون المدروس تحجب 0.35 من شحنة النواة والأغلفة (n-1) (n-2) الخ تحجب 1.00 من شحنة النواة.

مثال (١ - ٢٨) / احسب الشحنة المؤثرة للنواة على أحد الكترونات 6s في التنكستن (العدد الذري للتنكستن

=74) ؟

Electronic configuration-



$$\sigma = (0.35 \times 1) + (0.85 \times 12) + (1 \times 60) = 70.55$$

$$Z^* = Z - \sigma = 74 - 70.55 = 3.45$$

مثال (٢٩ - ١) / احسب الشحنة المؤثرة للنواة على أحد الكترونات 4s والكترون 3d في الزنك (العدد الذري للزنك = 30) ؟

Electronic configuration- $(1s^2) (2s^2, 2p^6)(3s^2, 3p^6)(3d^{10})(4s^2)$.

For 4s electron,

$$\sigma = (0.35 \times 1) + (0.85 \times 18) + (1 \times 10) = 25.65$$

$$Z^* = Z - \sigma = 30 - 25.65 = 4.35$$

For 3d electron,

$$\sigma = (0.35 \times 9) + (1 \times 18) = 21.15$$

$$Z^* = Z - \sigma = 30 - 21.15 = 8.85$$

مثال (٣٠ - ١) / احسب الشحنة المؤثرة للنواة على أحد الكترونات 3p في السيليكون (العدد الذري السيليكون = 14) ؟

Electronic configuration- $(1s^2) (2s^2, 2p^6)(3s^2, 3p^2)$.

$$\sigma = (0.35 \times 3) + (0.85 \times 8) + (1 \times 2) = 9.85$$

$$Z^* = Z - \sigma = 14 - 9.85 = 4.15$$

مثال (٣١ - ١) / احسب الشحنة المؤثرة للنواة على أحد الكترونات 2p في النتروجين (العدد الذري للنتروجين = 7) ؟

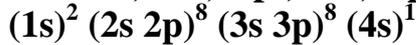
Electronic configuration- $(1s^2) (2s^2, 2p^3)$.

$$\text{Screening constant, } \sigma = (0.35 \times 4) + (0.85 \times 2) = 3.10$$

$$\text{Effective nuclear charge, } Z^* = Z - \sigma = 7 - 3.10 = 3.90$$

مثال (٣٢ - ١) / احسب الشحنة المؤثرة للنواة على أحد الكترونات 4s في البوتاسيوم (العدد الذري البوتاسيوم = 19) ؟

¹⁹K $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^1$

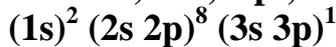


$$S = (8 \times 0.85) + (10 \times 1) = 16.8$$

$$Z^* = Z - S = 19 - 16.8 = 2.2$$

مثال (٣٣ - ١) / احسب الشحنة المؤثرة للنواة على أحد الكترونات 4s في الصوديوم (العدد الذري الصوديوم = 11) ؟

¹¹Na. $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$



$$S = (8 \times 0.85) + (2 \times 1) = 8.8$$

$$Z^* = Z - S = 11 - 8.8 = 2.2$$

طاقة التأين Ionization energy

تعرف طاقة التأين بأنها أقل طاقة تستخدم لإزالة الكترون من ذرة في حالتها المستقرة



الطاقة يجب أن تصرف على الذرة للتغلب على قوة جذب النواة للألكترون وبالتالي إفلاته وحصول التأين وتعتمد طاقة التأين على الغلاف الذي يتواجد فيها الألكترون:

$$(IP \propto \frac{Z^2}{n^2})$$

◆ إذا إزدادت الشحنة المؤثرة للنواة (Z^*) فإن طاقة التأين تزداد.

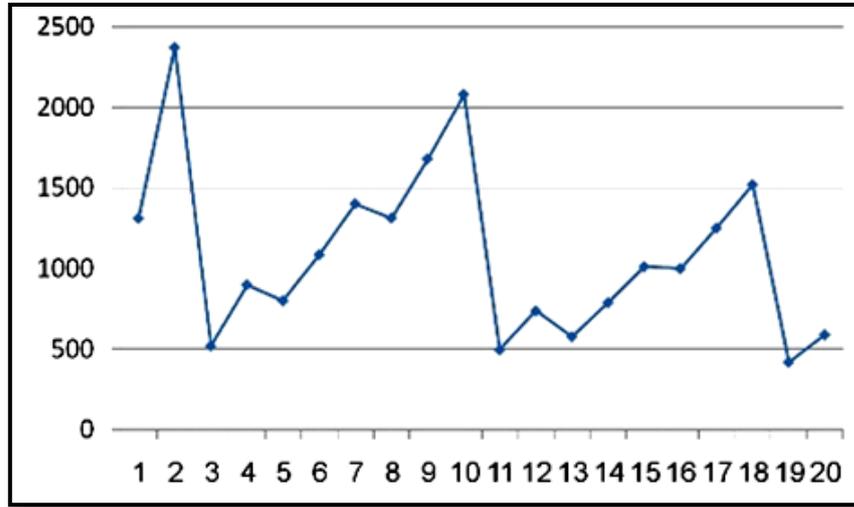
◆ ان طاقة التأين الثاني اكبر من الأول وذلك لأن التغلب على قوة جذب نواة موجبة اكبر من القوة اللازمة للتغلب على قوة جذب نواة متعادلة وهكذا...

$$I^3 > I^2 > I^1.$$

◆ الطاقة اللازمة لإزالة الكترون من غلاف مشبع (الغازات النادرة) أكبر بكثير من تلك المستخدمة في إزالة الكترون من غلاف غير مشبع.

◆ نظراً لأن الغلاف نصف المشبع مستقر نسبياً فإن الطاقة اللازمة لإزالة الكترون من غلاف نصف مشبع أكبر من تلك المستخدمة في إزالة الكترون من غلاف غير مشبع .

◆ طاقة التأين تقل خلال المجموعة الواحدة فنزولاً يزداد عدد الأعلفة وتبتعد الألكترونات عن قوة جذب النواة وبذلك تقل طاقة التأين.



شكل (١-٢٧) طاقات التأين لبعض العناصر الممثلة

مثال (١-٣٤) / أعطيت الطاقات اللازمة لإزالة الكترون من غلاف ذرة ما من الذرة الثالثة 3 period

بوحدة كيلوجول/مول (KJmol) إذكر اسم العنصر واكتب ترتيبه الألكتروني.

IE ₁	IE ₂	IE ₃	IE ₄	IE ₅	IE ₆
1012	1403	2910	4956	6277	22230

من ملاحظة الأرقام نجد ان هناك قفزة في الأرقام بعد طاقة التأين الخامسة لذا فإن العنصر من الطائفة

الخامسة ولديه خمسة الكترونات في غلاف التكافؤ وهكذا يكون ترتيبه الألكتروني $1s^2, 2s^2, 2p^6,$

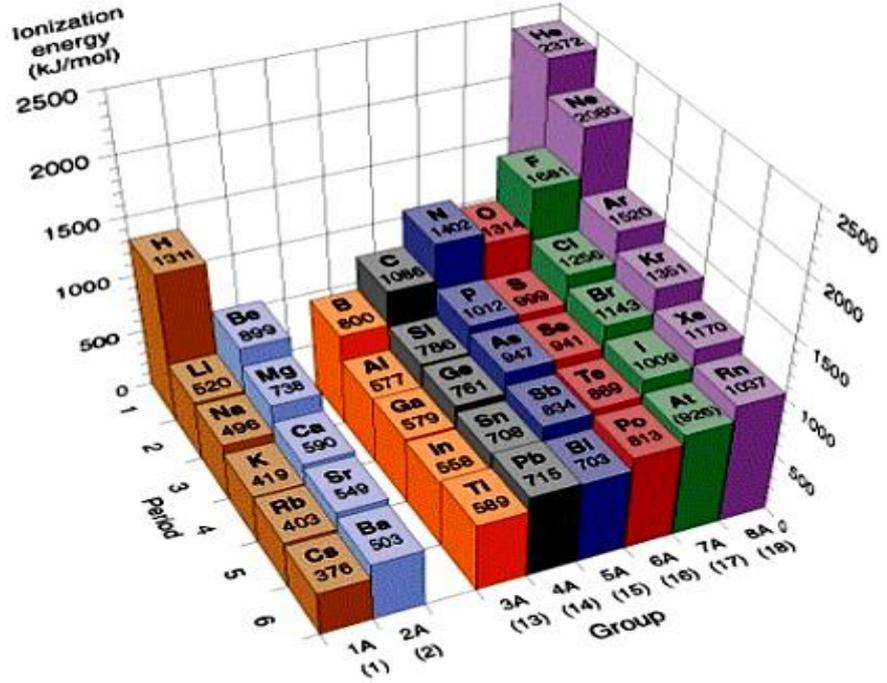
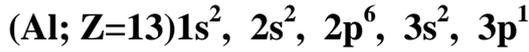
$3s^2, 3p^3$ وبذلك يكون عدده الذري 15 وهو الفسفور

phosphorous(P; Z=15) $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^3$

مثال (١-٣٥) / أعطيت الطاقات اللازمة لإزالة الكترون من غلاف ذرة ما من الدورة الثالثة period 3 بوحدة كيلوجول/مول (KJmol⁻¹) إذكر اسم العنصر واكتب ترتيبه الألكتروني.

IE ₁	IE ₂	IE ₃	IE ₄	IE ₅	IE ₆
577	1816	2744	11576	14829	18375

من ملاحظة الأرقام نجد ان هناك قفزة في الأرقام بعد طاقة التأين الثالثة لذا فإن العنصر لديه ثلاثة إلكترونات في غلاف التكافؤ وهكذا يكون ترتيبه الألكتروني 1s², 2s², 2p⁶, 3s², 3p¹ وبذلك يكون عدده الذري 13 وهو الألمنيوم



شكل (١-٢٨) جهود التأين العناصر الممثلة □

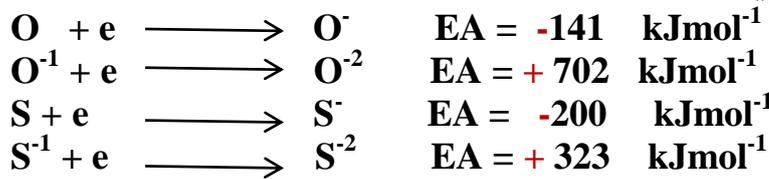
الألفة الألكترونية (EA) Electron affinity

تعرف الألفة الألكترونية بأنها الطاقة المصاحبة لإضافة مول من الكترولونات الى مول من الذرات أو الأيونات في حالتها الغازية.



في أغلب الحالات يطلق على الطاقة اللازمة لإضافة اول الكترولون يطلق عليها الأولى EA_1 واسوة بالطاقة الحرة فإنها تأخذ قيمة سالبة ولكن الطاقة الثانية EA_2 تكون موجبة لأنها إضافة الكترولون الى أيون سالب. وهناك عوامل تؤثر على الألفة الألكترونية:

- ◆ حجم الذرة : حيث ان زيادة حجم الذرة يقلل من قيمة الألفة الألكترونية.
- ◆ تنافر الكترولون – الكترولون: نعني بذلك تنافر الألكترولون المضاف مع الكترولون الأوربتال. (هناك فرق بين إضافة الكترولون الى اوربتال فارغ او مشبع أو نصف مشبع).
- ◆ إن القيم السالبة الكبيرة للألفة الألكترونية يعني ان الأيون السالب المتولد مستقر جداً.
- ◆ ان عناصر المجموعة الثانية (IIA) تمتلك غلاف ثانوي ممتلي (ns^2) ولكنها أيضاً موجبة.
- ◆ خير مثال على الألفة الألكترونية هو إضافة الألكترولون الثاني وبذلك نحصل على تنافر كبير بين الألكترولون المضاف والأيون السالب المتكون

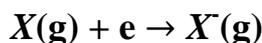


جدول (١-١٢) الألفة الألكترونية بوحدة كيلوجول لكل مول لبعض العناصر المثلة في الجدول الدوري

1A (EA)	2A (EA)	3A (EA)	4A (EA)	5A (EA)	6A (EA)	7A (EA)	8A (EA)
H (-72.8)							He (+21)
Li (-59.6)	Be (+241)	B (-26.7)	C (-122)	N (0)	O (-141)	F (-328)	Ne (+29)
Na (-52.9)	Mg (+230)	Al (-42.5)	Si (-134)	P (-78)	S (-200)	Cl (-344)	Ar (+34)
K -48.4	Ca (+156)	Ga (-28.5)	Ge (-119)	As (-78.2)	Se (-195)	Br (325)	Kr (+34)
Rb (-46.9)	Sr (+167)	In (-28.9)	Sn (-107)	Sb (-103)	Te (-190)	I (-295)	Xe (+40)
Cs (-45.5)	Ba (+52)	Tl (-19.3)	Pb (-35.1)	Bi (-91.3)	Po (-183)	At (-270)	Rn (+41)

Electronegativity(EN) السالبية الكهربية

باولنك هو أول عالم أدخل مصطلح السالبية الكهربية عام (1932) ووضع تقديراً كميّاً لقياس ميل العنصر لإجتذاب الكاتيونات



♦ في الجزيئات ، تعد عملية جذب الكاتيونات الأصرة *attract bonding pair* من قبل ذرة ما باتجاهها هي تعبير عن كهروسالبيتها *attract bonding pair*

♦ عند الإنتقال الى اسفل المجموعة ، يزداد رقم الغلاف (n) والقوة على جذب الكاتيونات من قبل النواة تصبح ضعيفة أي تقل السالبية

$[F = \frac{k Z e^2}{r^2}]$, therefore .(EN) decreases moving down the group.

♦ عند الإنتقال ضمن الدورة من اليسار الى اليمين العدد الذري يزداد وشحنة النواة تزداد (Z) ونصف قطر الذرة يقل والقوة على جذب الكاتيونات من قبل النواة تصبح اكبر أي تزداد السالبية

$[F = \frac{k Z e^2}{r^2}]$ increases, hence,(EN) increases along a period.



اقترح باولنك بأن هناك استقرارية إضافية تنشأ من عدم تكافؤ المشاركة الألكترونية لتكوين الأصرة بين

$$\chi_X - \chi_H = 0.208\sqrt{\Delta_{H-X}}$$

ذرتين A و B

الرمز (chi) χ (chi) يرمز الى الكهروسالبية بينما Δ_{H-X} هي طاقة الأصرة بوحدة كيلوسعرة لكل مول kcal mol⁻¹

$$\Delta_{H-X} = E_{H-X} - \sqrt{E_{H-H}E_{X-X}}$$

E_{H-X} , E_{H-H} and E_{X-X} represent bond energy of H-X, H-H and X-X bonds respectively.

Converting the equation to SI units

$$\chi_X - \chi_H = 0.102\sqrt{\Delta_{H-X}} \text{ (where } \Delta_{H-X} \text{ is measured in kJ mol}^{-1}\text{)}$$

مثال (١ - ٣٦) / إذا علمت بأن السالبية الكهربية للهيدروجين حسب مقياس باولنك هي 2.1 ، استخدم

تعريف باولنك للسالبية لاشتقاق سالبية الكلورين إذا كان لديك المعلومات التالية. طاقة التحلل للأصرة H-Cl هي 427 kJ mol⁻¹ والأصرة H-H هي 432 kJ mol⁻¹ والأصرة Cl-Cl هي 239 kJ mol⁻¹

$$\chi_X - \chi_H = 0.102 \sqrt{\Delta_{H-X}}$$

$$\Delta_{H-Cl} = E_{H-Cl} - \sqrt{E_{H-H}E_{Cl-Cl}}$$

Thus, for hydrogen chloride,

$$\chi_{Cl} - \chi_H = 0.102 \times \{427 - 1/2(432 + 239)\}^{1/2} = 0.98$$

Thus, because we know that chlorine is more electronegative than hydrogen

$$\chi_{Cl} = \chi_H + (\chi_{Cl} - \chi_H)$$

$$\chi_{Cl} = \chi_H + 0.98 = 2.1 + 1.0 = 3.1$$

جدول (١-١٣) كهروسالبيات العناصر حسب مقياس باولنك لعناصر الجدول الدوري

المجموعة	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
الدورة																		
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.6
6	Cs 0.79	Ba 0.89	Lu 1.27	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn
7	Fr 0.7	Ra 0.9	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

السالبية الكهربائية حسن نظرية الرد – روكاو Allred-Rochow's Electronegativity

عرف العالمان الرد وروكاو السالبية الكهربائية على إنها القوة التي تبديها النواة لذرة ما للتمسك بالكترونات تكافؤها.

$$(E-N)_{A-B} = \frac{0.3590 Z_{effective}}{r^2} + 0.744$$

$Z_{effective}$ الشحنة المؤثرة للنواة ، R هو نصف القطر التساهمي بالأنكسروم ($^{\circ}A$)