الجامعة السورية الخاصة
SYRIAN PRIVATE UNIVERSITY

الجامعة السورية الخاصة
كلية الصيدلة

الكيمياء العضوية الصيدلانية (1)
Organic Pharmaceutical Chemistry(1)

Dr.Amna Aloush

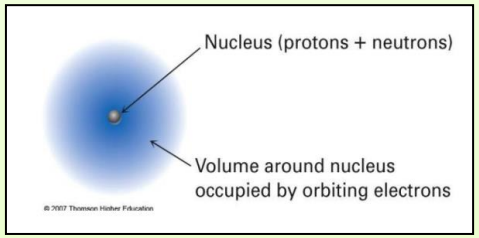
المحاضرة الثانية: البنية الذرية

Atomic structure البنية الذرية

- **تتألف الذرة من :**

نواة مشحونة إيجابياً محاطة وعلى مسافة كبيرة نسبياً بإلكترونات مشحونة سلباً .

- **تتألف النواة من:**



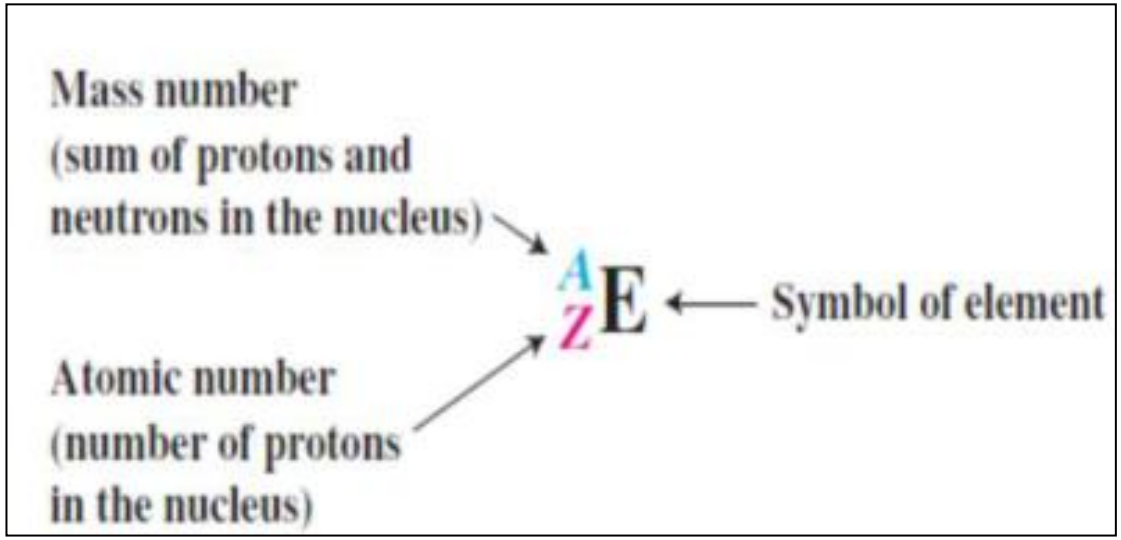
1) جزيئات صغيرة تدعى (النترونات) معتدلة كهربائياً.
2) بروتونات مشحونة إيجاباً .

- **نتيجة:** إن الذرة **متعادلة كهربائياً** لأن عدد البروتونات الموجودة في النواة يكون مساوياً لعدد الإلكترونات السالبة الشحنة والتي تدور حول النواة.
- يعود معظم كتلة الذرة إلى كتلة النواة(لأن البروتونات والنترونات تمتلك الكتلة ذاتها تقريباً وهي أكبر من كتلة الالكترونات ب 1800 مرة).
- بينما **تشغل الالكترونات معظم حجم الذرة** لذلك يتم التركيز على الالكترونات لأنها التي تشكل الروابط الكيميائية.

- **العدد الذري atomic number Z:** هو عدد البروتونات في نواة الذرة (وهو نفسه عدد الالكترونات).
- **مثال:**

العدد الذري للكربون 6 أي يملك 6 بروتونات و6 الكترونات

- **العدد الكتلي mass number A :** هو مجموع عدد البروتونات والنترونات



- **الكتلة الذرية atomic weight :** هو متوسط الكتلة مقدراً بـamu التي هي وحدة كتلة ذرية للنظائر الموجودة في الطبيعة .
- **الوزن الجزيئي molecular weight:** مجموع الأوزان الذرية لجميع الذرات في الجزيئة.
- **النظائر isotopes:** ذرات لنفس العنصر تمتلك نفس عدد البروتونات وتختلف بعدد النترونات وبالتالي تمتلك النظائر نفس العدد الذري تختلف بالعدد الكتلي.
- مثال : (12C 13C)

تمرين:

يمتلك الأوكسجين ثلاثة نظائر بعدد الكتلة 16,17,18فإذا علمت أن العدد الذري للأوكسجين 8 ما هو عدد البروتونات والنترونات للنظائر الثلاثة؟

المدارات الذرية Atomic orbitals

- تحاط النوى الموجبة الشحنة بالإلكترونات المرتبة في طبقات أو سويات طاقة متطابقة المركز.

المدار orbital: هو المكان من الفراغ الذي يحتمل وجود الالكترون فيه (حدود هذا الالكترون).

- هناك أنواع مختلفة من المدارات تختلف بمقاساتها وأشكالها وتتوضع حول النواة بطرق محددة.
- هنالك أربعة انماط للمدارات يشار اليها ب s,p,d,f ولكل منها شكل خاص ومن بين هذه المدرات الأربعة سوف نهتم بشكل أساسي بالمدارين S,P لأنهما المدارين الأكثر شيوعاً في الكيمياء العضوية والحيوية.

مستويات الطاقة

- تنتظم مدارات الذرة في **طبقات الكترونية** مختلفة متزايدة بالحجم والطاقة فالإلكترونات موجودة في المدارات، والمدارات موزعة ضمن طبقات إلكترونية.
- تحتوي الطبقات الالكترونية أعداداً وأنماطاً مختلفة من المدارات .
- كل مدار ضمن طبقة ما يمكن أن يُشغل **بإلكترونين فقط.**
- كل طبقة أبعد عن النواة تكون طاقتها **أكبر** وحجمها **أكبر** وعدد المدارات فيها **أكثر** وتتميز بأشكال وأنماط مختلفة.

مستويات الطاقة
توزع الإلكترونات في الذرة

تتوزع الالكترونات حول النواة الموجبة في طبقات shells رئيسية متتالية (K,L,M,N,O) وتحتوي كل طبقة على عدد محدد من المدارات orbitals

- ✓ تحتوي **الطبقة الأولى K** مداراً واحداً من النوع 1s ويتسع لإلكترونين.
- ✓ تحتوي **الطبقة الثانية L** على أربعة مدارات : واحد من النوع 2s وثلاثة من النوع 2p ويتسع ل 8 إلكترونات.
- ✓ تحتوي **الطبقة الثالثة M** على تسعة مدارات: واحد من النوع 3s وثلاثة من النوع 3p وخمسة من النوع 3d ويتسع ل 18 إلكتروناً.
- ✓ تحتوي **الطبقة الرابعة N** على ستة عشر مداراً : واحد من النوع 4s وثلاثة من النوع 4p وخمسة من النوع 5d وسبعة من النوع 4f ويتسع ل 32 إلكتروناً.

توزيع الإلكترونات في الطبقات الأربعة المحيطة بالنواة

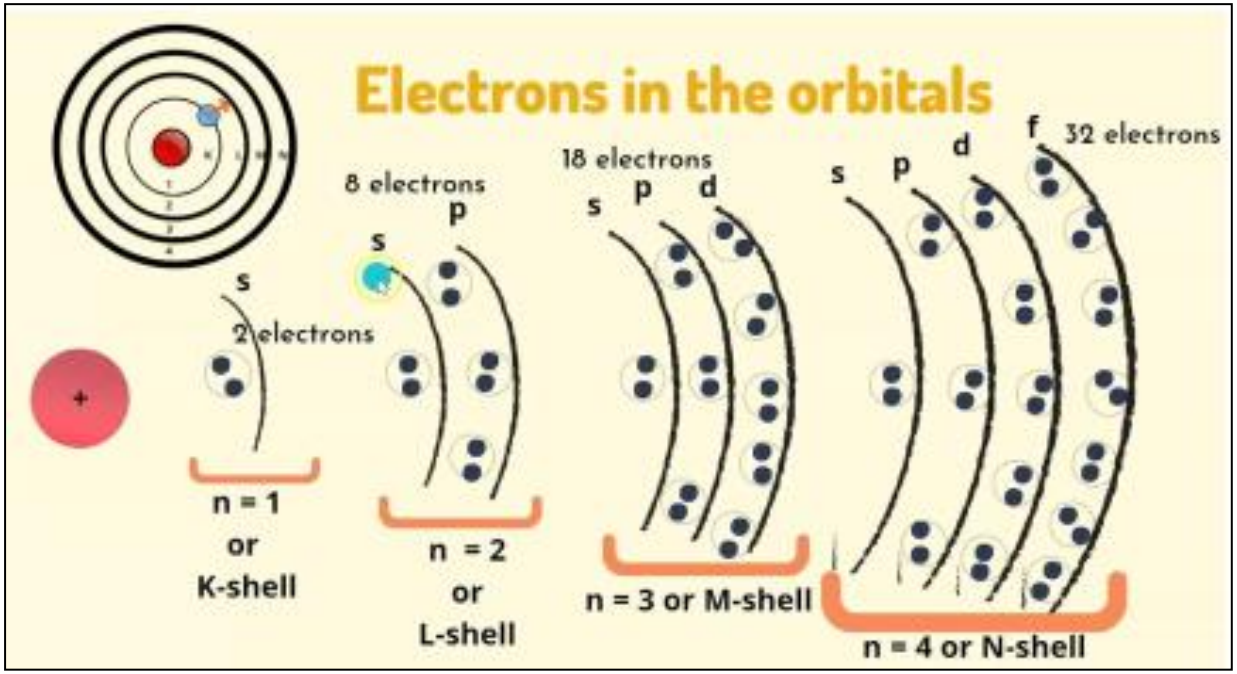
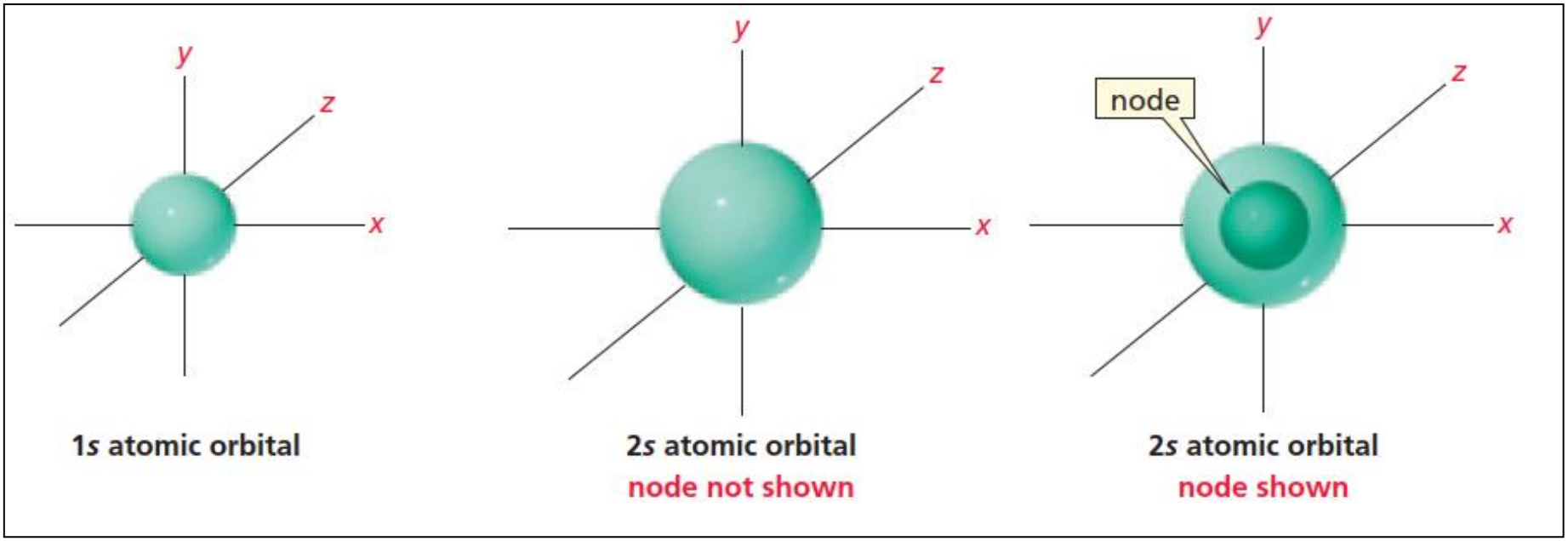


Table 1.1 Distribution of Electrons in the First Four Shells That Surround the Nucleus

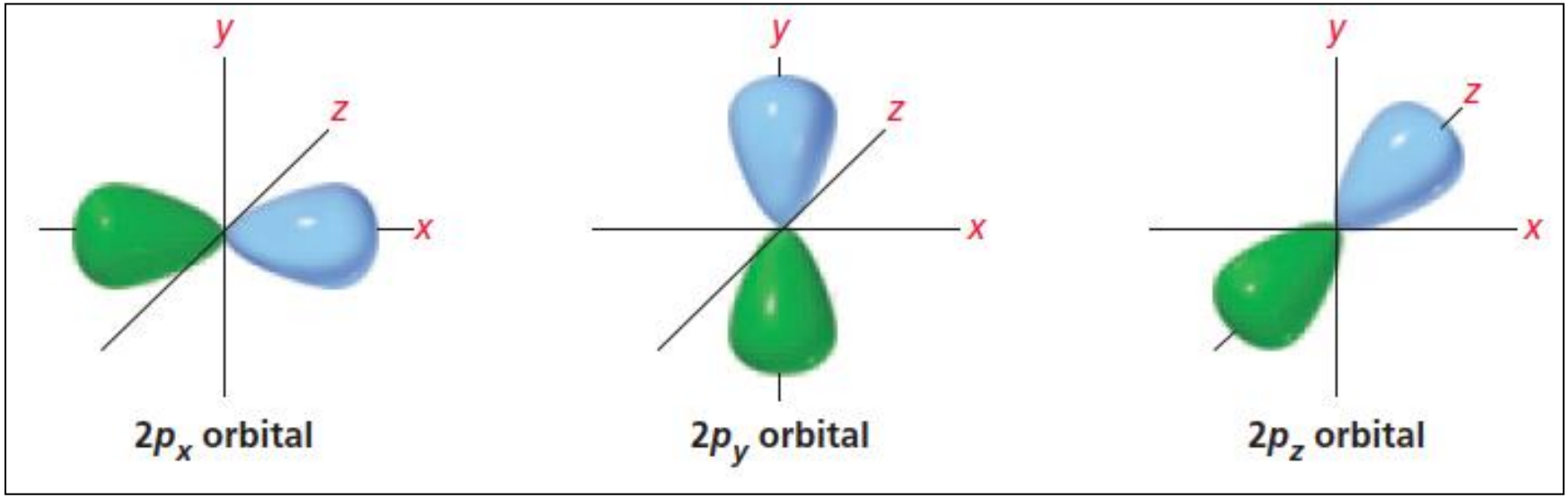
	First shell	Second shell	Third shell	Fourth shell
Atomic orbitals	*s*	*s*, *p*	*s*, *p*, *d*	*s*, *p*, *d*, *f*
Number of atomic orbitals	1	1, 3	1, 3, 5	1, 3, 5, 7
Maximum number of electrons	2	8	18	32

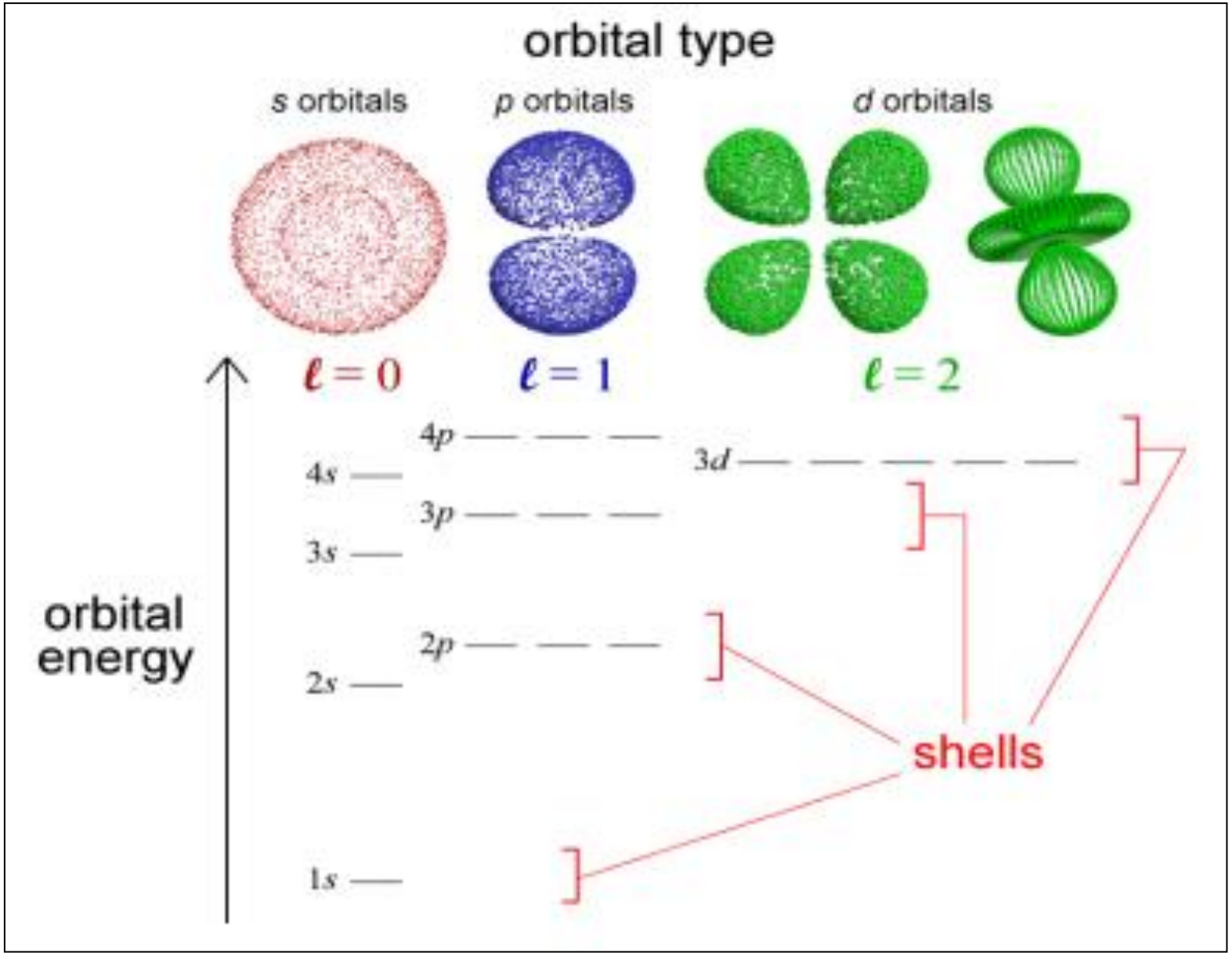
أشكال المدارات

- المدار 1s هو كرة ينطبق مركزها على نواة الذرة.
- المدار 2s يملك الشكل نفسه ولكن حجمه أكبر من 1s .



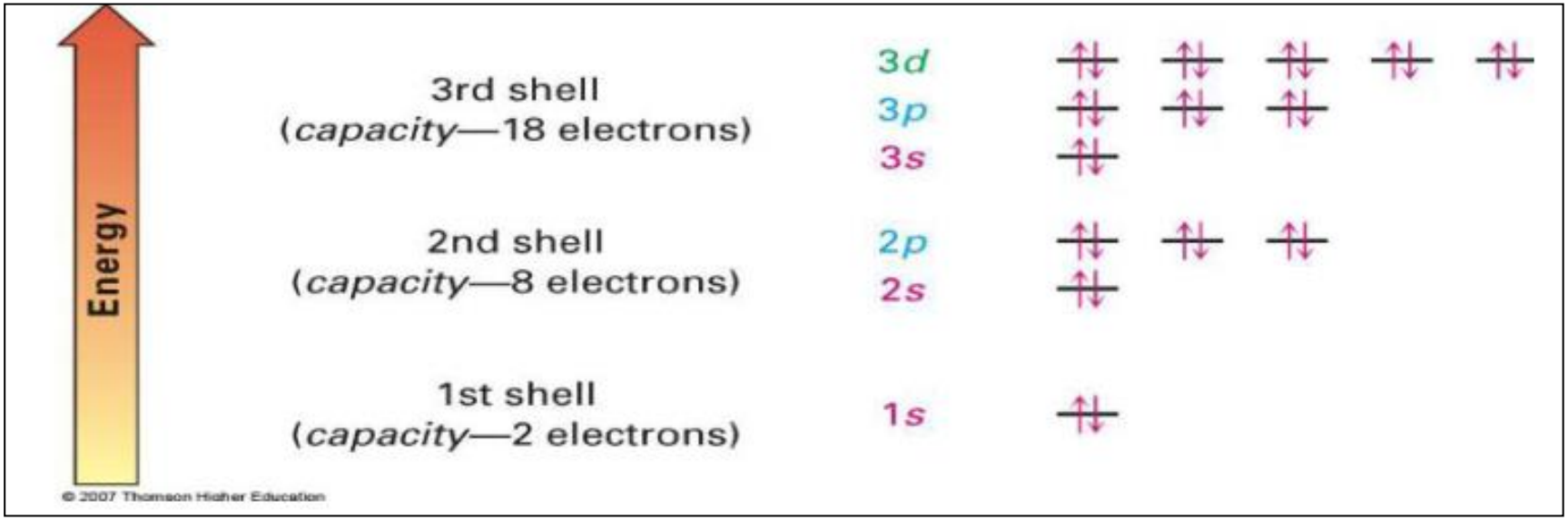
- المدارات 2p وهو عبارة عن انتفاخين تقع بينهما النواة **(مغزلية الشكل)** تتوزع في الفراغ وفق ثلاثة محاور ($2p_x, 2p_y, 2p_z$) وهي ذات طاقة متساوية أي أن المدار p هو عبارة عن ثلاثة مدارات متشابهة من حيث الشكل المغزلي.




orbital type
s orbitals
p orbitals
d orbitals
ℓ = 0
ℓ = 1
ℓ = 2
orbital energy
4p
4s
3p
3s
3d
2p
2s
1s
shells

يوضح الشكل التالي المجموعات المدارية ومستوياتها الطاقية

- العدد الأعظمي للإلكترونات $2n^2$ حيث n هو ترتيب السوية الطاقية.



نظريةLewis:(قاعدةالثمانية)

الذرات تكون أكثر ثباتاً عندما تكون طبقتها السطحية الخارجية مكتملة إلكترونياً **(حاوية على 8 الكترونات)**

لذا تسعى الذرات لكسب، خسارة أو مشاركة الالكترونات وذلك للوصول إلى 8 إلكترونات في الطبقة الخارجية

التشكيل الالكتروني
قواعد توزع الإلكترونات في الذرة

- هناك ثلاث قواعد لتعيين كيفية توزع الالكترونات في الذرة، أي تعيين التشكيل الالكتروني لذرة ما

1) - aufbau principle (building up) :

تملأ المدارات **الأخفض طاقياً أولاً** تبعاً للترتيب:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f$$

2)- مبدأ الاستبعاد لباولى pauli exclusion principle:

- لا يمكن لأكثر من **الكترونين** شغل اي مدار ذري واحد.
- يجب أن يكون لهذين الالكترونين **لفان ذاتيان متعاكسان.**

TABLE 1.2 The Ground-State Electronic Configurations of the Smallest Atoms

Atom	Name of element	Atomic number	1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$	3s
H	Hydrogen	1	↑					
He	Helium	2	↑↓					
Li	Lithium	3	↑↓	↑				
Be	Beryllium	4	↑↓	↑↓				
B	Boron	5	↑↓	↑↓	↑			
C	Carbon	6	↑↓	↑↓	↑	↑		
N	Nitrogen	7	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	
O	Oxygen	8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	
F	Fluorine	9	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	
Ne	Neon	10	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	
Na	Sodium	11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑

- **3)- قاعدة Hund: قاعدة هوند:**
- عندما يكون هناك (مدارين أو أكثر لها نفس الطاقة) فالإلكترونات ستملأ المدارات الفارغة أولاً قبل أن تتزاوج مع الكترون آخر، بحيث تكون هذه المدارات نصف ممتلئة وتكون اتجاهات دوران هذه الالكترونات متوازية وبهذه الحالة نقلل من تنافر الإلكترونات.
- **أي لا يشغل مدار ما بزوجين من الالكترونات حتى تشغل المدارات الأخرى ذات الطاقة المتكافئة بإلكترون واحد.**

TABLE 1.2 The Ground-State Electronic Configurations of the Smallest Atoms

Atom	Name of element	Atomic number	1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$	3s
H	Hydrogen	1	↑					
He	Helium	2	↑↓					
Li	Lithium	3	↑↓	↑				
Be	Beryllium	4	↑↓	↑↓				
B	Boron	5	↑↓	↑↓	↑			
C	Carbon	6	↑↓	↑↓	↑	↑		
N	Nitrogen	7	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	
O	Oxygen	8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	
F	Fluorine	9	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	
Ne	Neon	10	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	
Na	Sodium	11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑

تمرين:

العدد الذري للبوتاسيوم (19) ويمتلك الكترون غير متزاوج، ما هو المدار الذي يشغله هذا الإلكترون؟

تمرين:

ارسم التوزع الإلكتروني لكل من:

1) Cl العدد الذري 17
2) Br العدد الذري 35
3) Ca العدد الذري 20

الكترونات النواة

core electrons

- وهي الالكترونات المتواجدة في المدارات الداخلية (المدارات الموجودة أسفل المدارات الخارجية)

الالكترونات التكافؤية

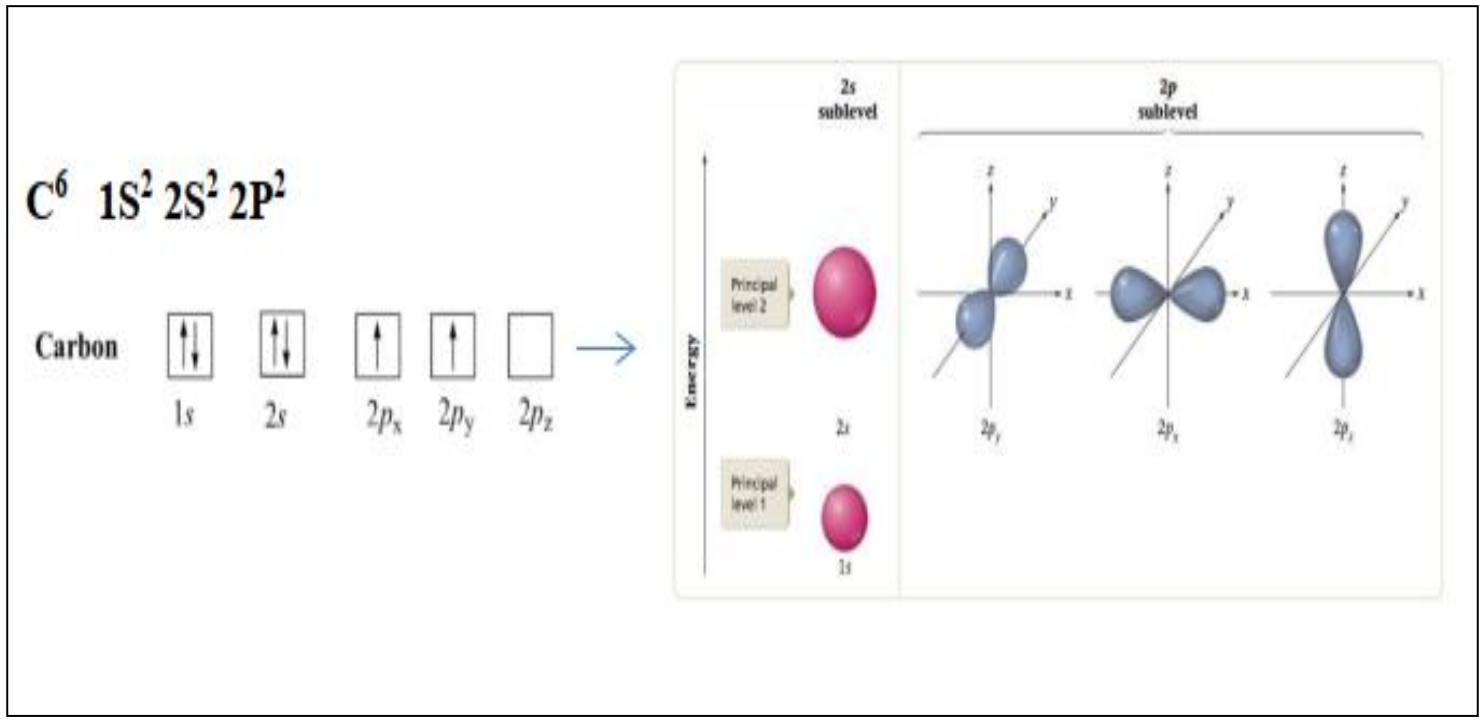
valence electrons

- هي الالكترونات الموجودة في المدارات الخارجية
- مثال: يمتلك الكربون الكترونين للنواة واربعة الكترونات تكافؤية

لذرة **الكربون** **أربعة إلكترونات تكافؤية** ($2s^2,2p^2$) وبالتالي فهو يحتاج إلى أربعة إلكترونات إضافية لتصل إلى حالة الاستقرار (الطبقة الأخيرة ممتلئة بثمانية إلكترونات) فتشكل **أربعة روابط**

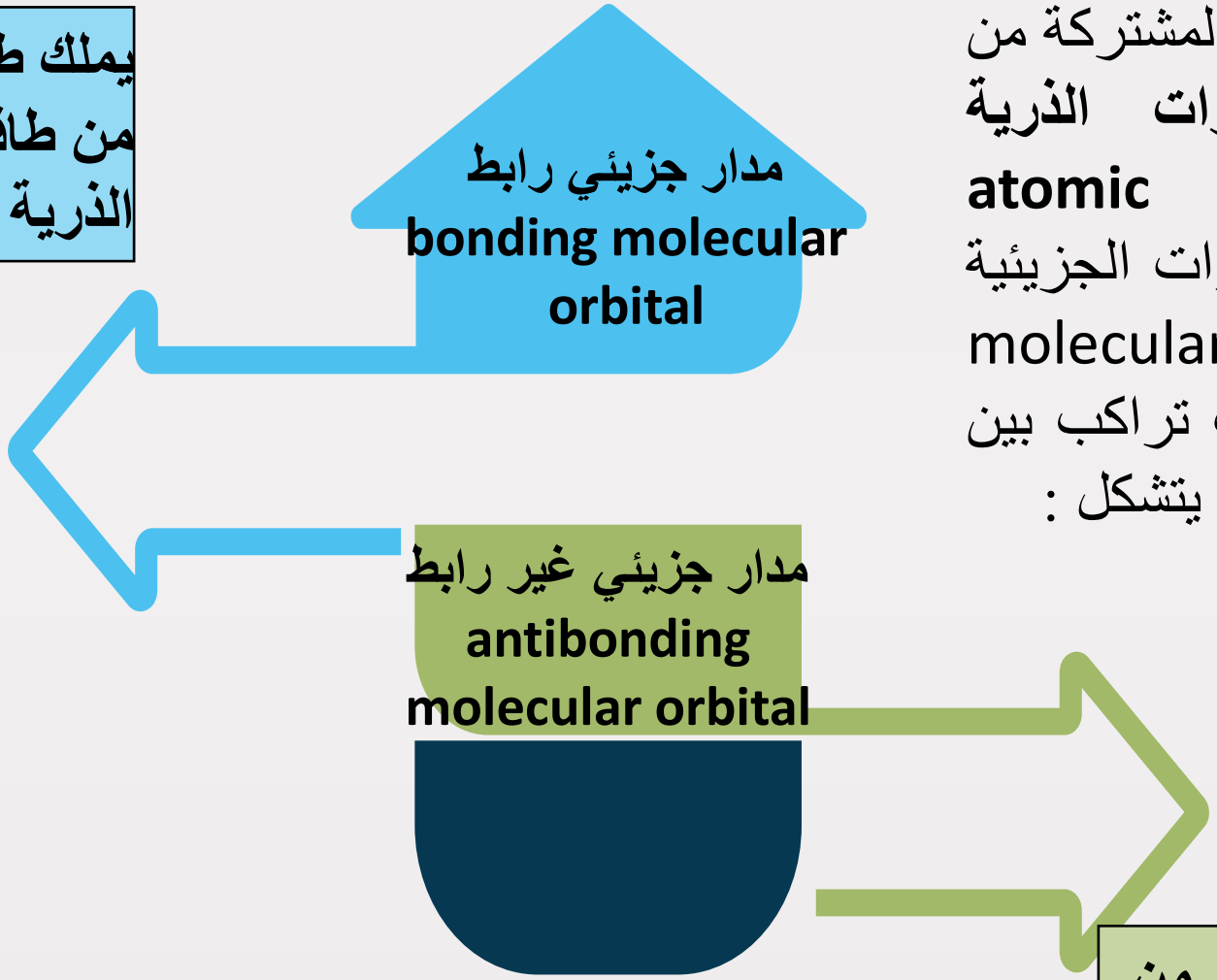
لذرة **النتروجين** **خمسة إلكترونات تكافؤية** ($2s^2,2p^3$) فتشكل فقط **ثلاث روابط**

لذرة **الأوكسجين** **ستة إلكترونات تكافؤية** ($2s^2,2p^4$) فتشكل فقط **رابطتين**



المدارات الجزيئية molecular orbitals

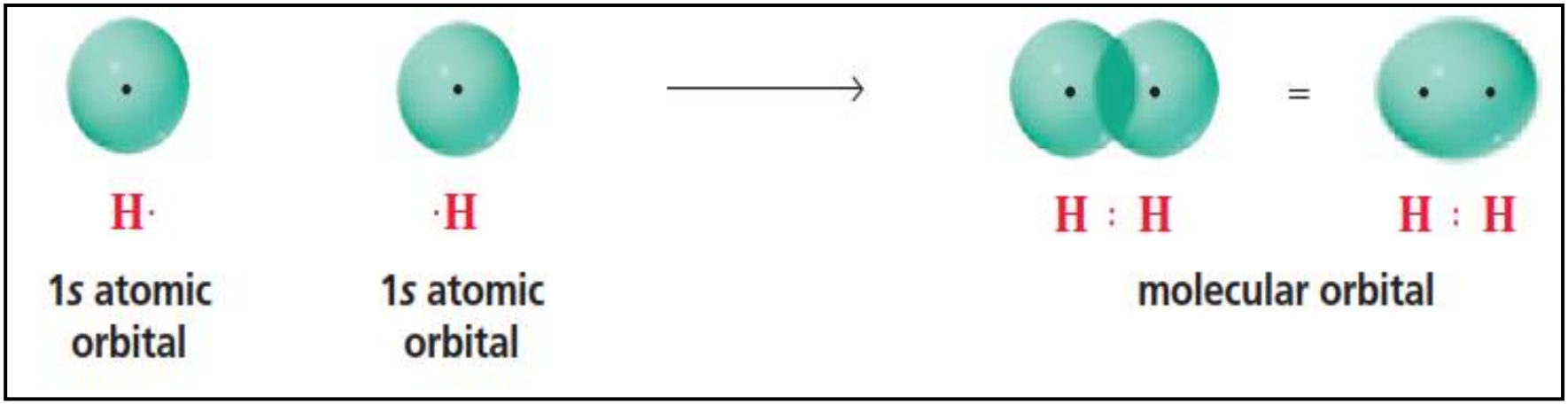
تنتج الرابطة المشتركة من اتحاد **المدارات الذرية atomic orbitals** لتشكيل المدارات الجزيئية molecular orbitals وعندما يحدث تراكب بين مدارين ذريين يتشكل :



لا يمكن للمدار الجزيئي أن يتسع أكثر من إلكترونين

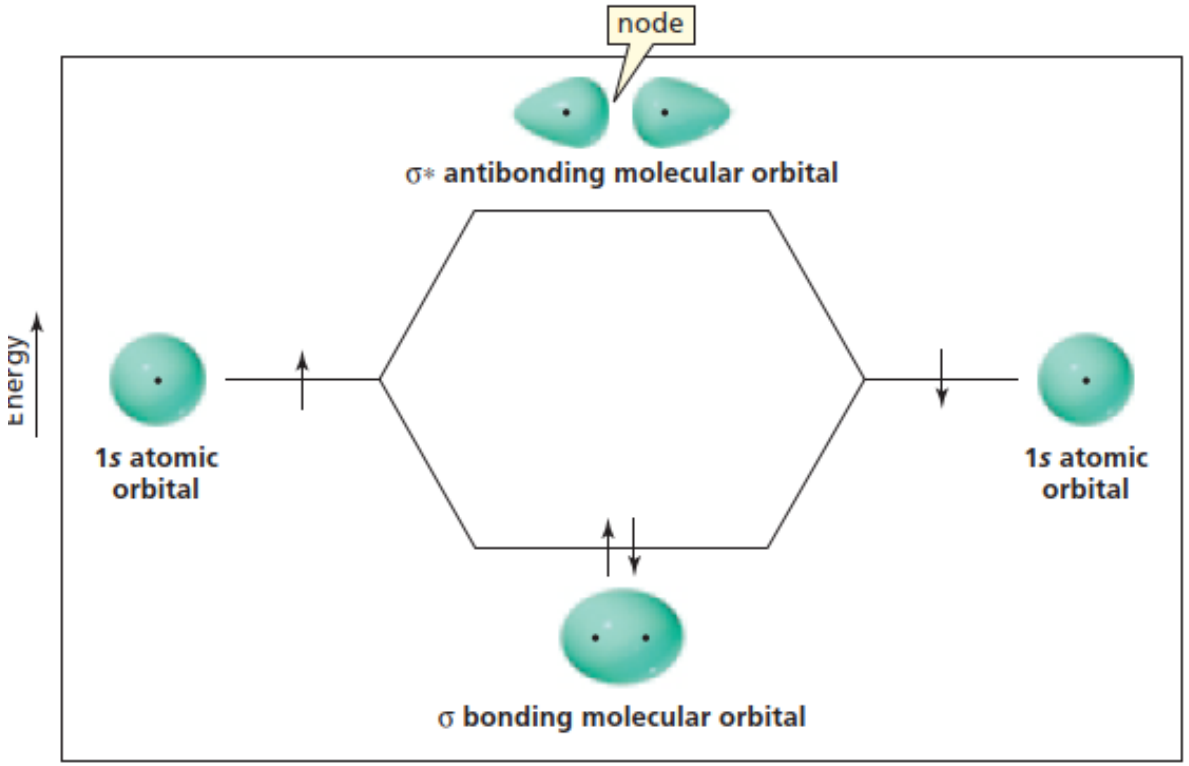
- **تتجه الإلكترونات دائماً عند تشكيل الرابطة المشتركة إلى المدار الجزيئي الرابط الذي يملك الطاقة الأخفض لتشكيل المدار الجزيئي، ولا يمكن للمدار الجزيئي أن يتسع لأكثر من إلكترونين.**
- تصف المدارات الجزيئية الفراغ حول النواة والذي يكون وجود الإلكترون به أكثر احتمالاً، حيث يوجد للمدارات الجزيئية أشكال وأحجام وطاقات محددة.
- **يجب أن يكون عدد المدارات الجزيئية المتشكلة مساوياً لعدد المدارات الذرية المتداخلة، وتملأ الإلكترونات المدارات الأخفض طاقة المتوافرة**

- **تشكل جزيئة الهيدروجين H_2:**
- تحتوي كل ذرة هيدروجين على إلكترون وحيد يقع في مدار ذري واحد من النوع 1s وعند اقتراب ذرتين من الهيدروجين من بعضهما فإن المدارين الذريين 1s يتداخلان فيتشكل **مدارين جزيئيين جديدين**، تتوضع الإلكترونات عند تشكل الرابطة المشتركة بين الذرتين في المدار الجزيئي الرابط الأخفض طاقة σ، بينما يبقى المدار الجزيئي المعاكس للربط فارغاً من الإلكترونات.
- تسمى الرابطة المشتركة الناتجة عن تداخل المدارين 1s **بالرابطة سيغما.**



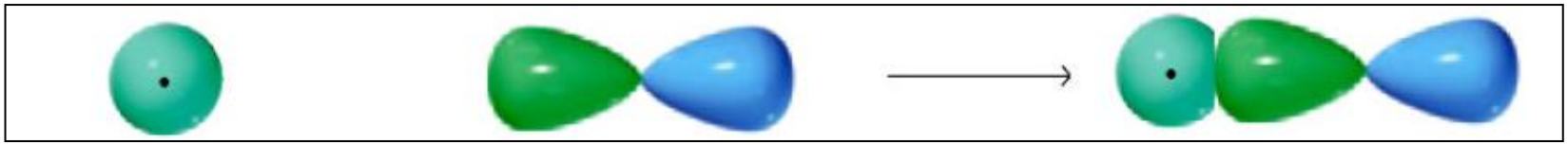
تداخل المداران الذريّان من النوع s وتشكيل الرابطة σ

- تتشكل **الرابطة σ** نتيجة لتداخل مداريين ذريين من **النوع s** ويتشكل مدار جزيئي رابط تكون فيه الكثافة الإلكترونية متمركزة بين النواتين، ويدعى المدار الجزيئي الرابط بالرابطة σ.



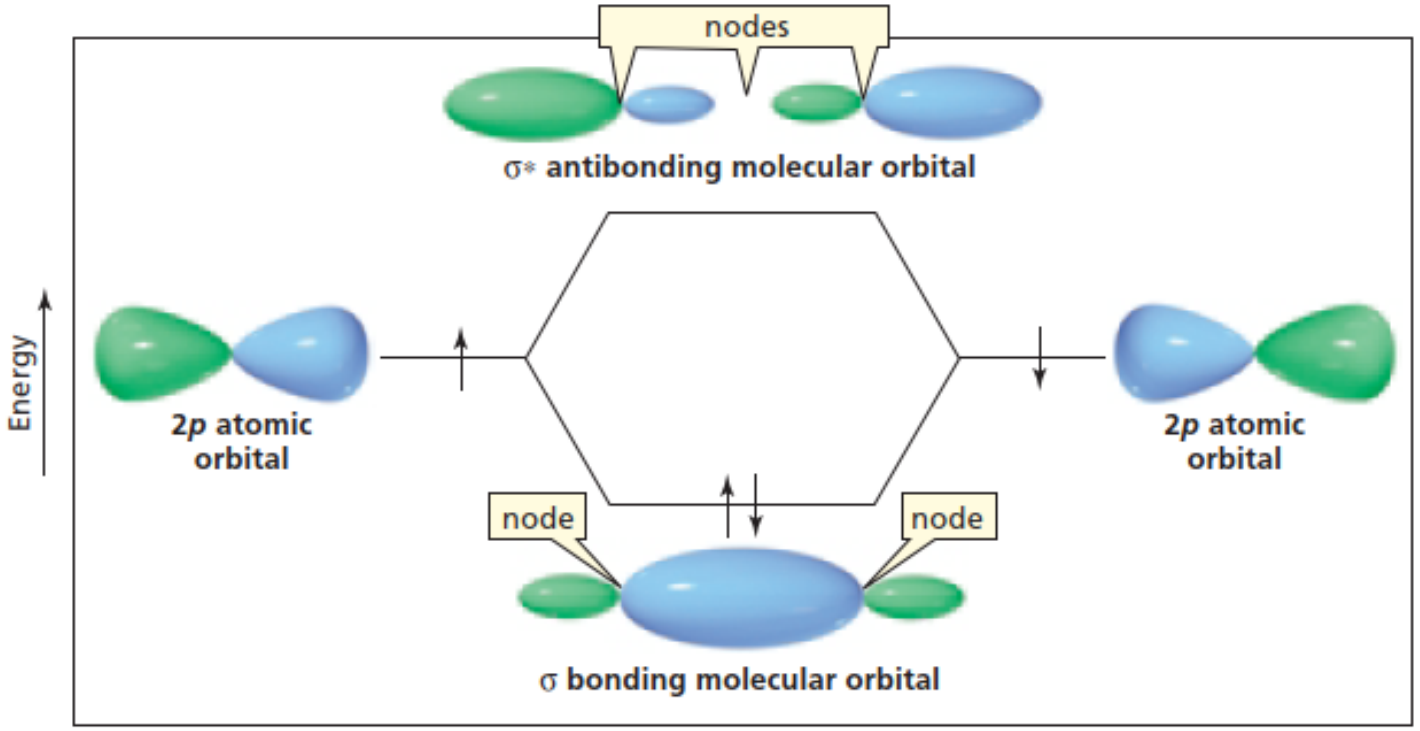
تداخل المداران الذريّان من النوع s و p وتشكيل الرابطة σ

- تتشكل **الرابطة σ** نتيجة لتداخل مداريين ذريين أحدهما من النوع s والآخر من النوع p



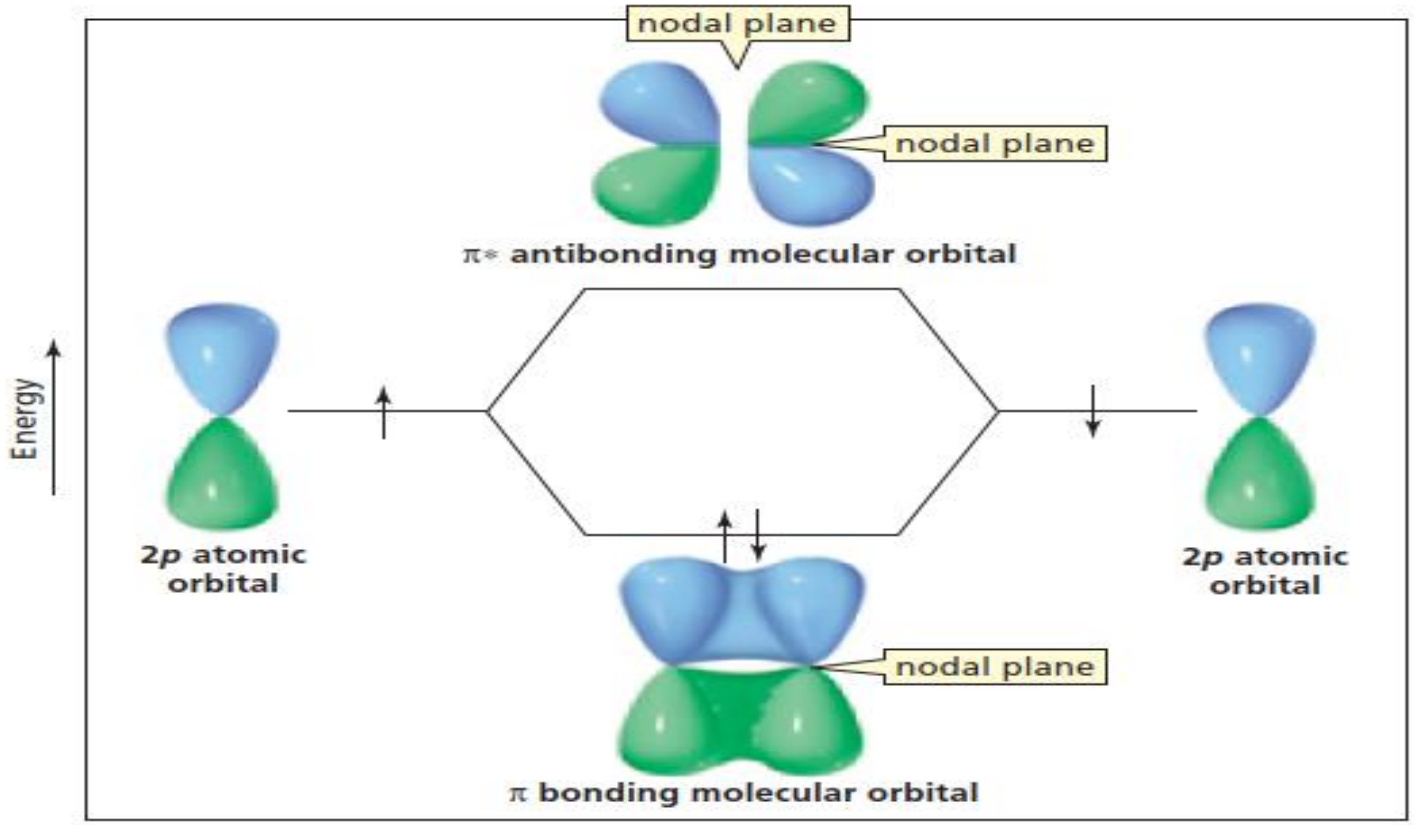
تداخل المداران الذريّان من النوع p بشكل رأسي وتشكل الرابطة σ

- تتشكل **الرابطة σ** عند حدوث ارتباط **رأسي** بين مداريين ذريين من **النوع p**



تداخل المداران الذريّان من النوع p وتشكل الرابطة π

- تتشكل **الرابطة π** عند حدوث تداخل جانبي بين مداريين ذريين من **النوع p**



- **تتشكل الرابطة π نتيجة التداخل الجانبي للمدارين الذريين من النوع p ، بينما تكون جميع أنوع الرابطة المشتركة الأخرى من النوع σ**
- **الرابطة σ أقوى من الرابطة π**
- **الرابطة المضاعفة أقوى من الرابطة الأحادية لأن الرابطة المضاعفة تتكون من رابطة π و رابطة σ، بينما تتكون الرابطة الاحادية من الرابطة σ لوحدها.**

تمرين:

ما هو نوع الرابطة (π أو σ) عند تداخل المدارات التالية: