3- اشتق بور معادلة رياضية لحساب أطوال موجات الضوء المنبعث من الهيدروجين عندما يصدر طيفه الذري. وواضح انه عندما تمتص الذرة طاقة يرتفع الالكترون من مستوى طاقة منخفض الى مستوى طاقة أعلى، وعندما يعود الى مستوى طاقة منخفض ينبعث فوتون ذو طاقة مساوية للفرق بين طاقة المستويين. فأذا كان n_2 هو العدد الكمي للمستوى الاعلى و n_1 العدد الكمي للمستوى الادنى يكون الفرق في الطاقة ΔE بين المستويين هو :

$$\Delta E = En_2 - En_1$$

4- تمكن بور من تحديد عدد الاغلفة التي تدور فيها الالكترونات حول النواة.

عيوب نظرية بور Defects of Bohr Theory

1- فشل بور من تحديد خطوط الطيف لذرات أكثر تعقيدا من ذرة الهيدروجين. فلم تنجح مثلا عند تطبيقها على ذرة الهيليوم البسيطة والتي تحتوي على الكترونين فقط. حيث تبين انه لابد من ادخال تغييرات جوهرية في النظرية مثل مستويات الطاقة الفرعية ، كذلك أدخال مجموعة أخرى من أرقام الكم.

2- لم تستطع النظرية تفسير **ظاهرة أنقسام خطوط الطيف للهيدروجين عندما يتعرض الى مجال مغناطيسي خارجي (تأثير زيمان Zeeman Effect)**، فكان لابد من ادخال عدد كمي أخر وهو العدد الكمي المغناطيسي. كذلك لم تستطع النظرية تفسير ظاهرة انقسام خطوط الانبعاث لذرات الفلزات القلوية والتي تنتج من حركة الالكترون الدورانية حول النواة وحول نفسه والتي ينتج عنها مجال مغناطيسي.

3- افترضت النظرية ان مدارات الالكترونات دائرية حول النواة، لكن العالم سمرفيلد Sammerfield بين في عام 1916، معتمدا على نظرية اينشتاين بأن المدارات بيضوية Elliptical توجد مع المدارات الدائرية وكان لابد من استخدام عدد كمي سمي بالعدد الكمي الثانوي.

وبذلك تم اقترح نموذج الأرقام الكمومية الأربعة نيلز بور عام 1926، وذلك كجزء من نظريته للذرة. في هذه الفترة، كانت الدراسات الطيفية والتجارب الكمومية تكشف عن أنماط معينة للخطوط الطيفية للعناصر الكيميائية، وكان من الضروري توفير نموذج نظري يشرح هذه الأنماط.

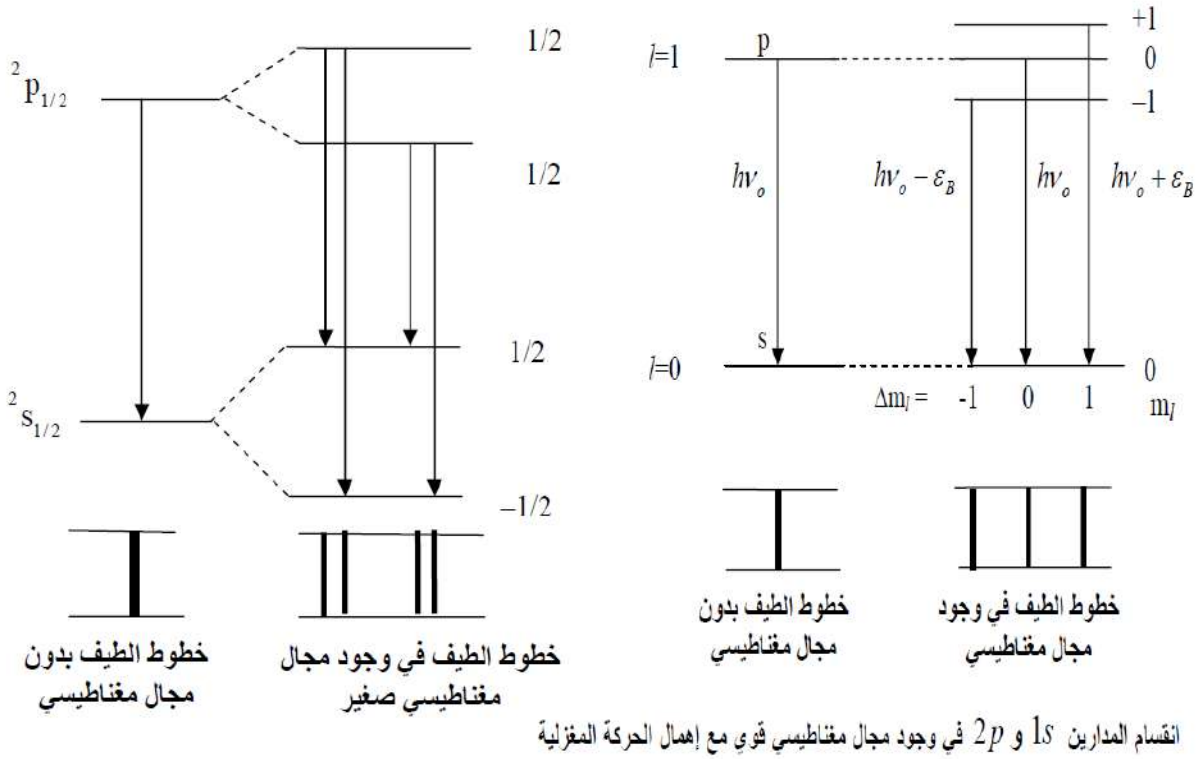
بناءً على النتائج الكمومية والملاحظات الطيفية، اقترح بور بعد الاخذ بنتائج بقية العلماء أن الإلكترونات تدور حول النواة في مدارات دائرية، وكل مدار يحمل عدداً كمومياً رئيسياً (n)

وعدد كمومي زاويا .(l) قدم بور أيضاً فرضية أن عدد الكم المغناطيسي (m_l) وعدد الكم الدوراني (m_s) يتحكمان في توجيه وسرعة دوران الإلكترونات.

هذه الاقتراحات قادت إلى تطوير نموذج بور للذرة الذي أصبح أساسًا لفهم الكيمياء الكمومية في تلك الفترة، وكان خطوة هامة نحو تكوين النظريات الكمومية للذرة والكيمياء.

ظاهرة زيمان Zeeman effect

درست هذه الظاهرة بواسطة العالم زيمان في عام 1896 ، حيث تمت ملاحظة انقسام الخط الطيفي إلي مجموعة من الخطوط الطيفية) متساوية الفواصل ومتماثلة حول الخط الأصلي (نتيجة تأثير مغناطيسي مجال B خارجي ثابت ومنتظم .وقد سميت هذه الظاهرة بتأثير زيمان العادي (Normal Zeeman effect) وقد ظهر أيضًا نتيجة تأثير المجال المغناطيسي الخارجي مجموعة من الخطوط الطيفية المعقدة والتي لم يوجد لها تفسيرًا كلاسيكيًا في حينه ولهذا سميت بتأثير زيمان الشاذ(Anomalous Zeeman effect) ولكن بنشوء وتطور نظرية ميكانيكا الكم واستحداث الحركة المغزلية الذاتية للإلكترون أصبح من السهل تفسير التأثير الشاذ لهذه الظاهرة . وبالرغم من نجاح نظرية ميكانيكا الكم في تفسير هذا الشذوذ فمازال الاسم متداول إلي الآن.



انقسام المدارين $1s$ و $2p$ في وجود مجال مغناطيسي قوي مع إهمال الحركة المغزلية

انقسام المدارS, P في وجود مجال مغناطيسي ضعيف مع شمول الحركة المغزلية.

الطبيعة الموجية للمادة Wave Nature of Matter

لقد أظهرت النتائج العديدة التي قام بها العلماء، ان الاشعاع يمكن ان تكون له خواص الجسيمات، كذلك خاصية الموجات. لقد توصل الفيزياوي لويس دي برولي Louis de Broylie عام 1924 الى ان المادة والالكترونات لها خواص جسيمية وموجية في آن واحد، مثلها مثل الضوء.

بالنسبة للاشعاع الكهرومغناطيسي فأن طاقة الفوتون تعطى بالعلاقة التالية :

$$E = h\nu \quad \ldots\ldots 1)$$

وحسب أينشتاين فأن الطاقة E يمكن ان تعطى بالعلاقة:

$$E = mc^2 \quad \ldots\ldots 2)$$

وبمساواة المعادلة (1) و (2) نحصل على:

$$h\nu = mc^2 \quad \ldots 3)$$

وأن الكتلة × السرعة = زخم الالكترون

$$h\upsilon/c = mc = P \quad \ldots 4)$$

وبربط الكتلة والطول الموجي للفوتون، فأن هذه المعادلة تنطبق على اي جسيم له كتلة m اذا أستبدلنا سرعة الاشعاع الكهرومغناطيسي c بـ v سرعة الجسيم ، وباعادة ترتيب المعادلة نحصل على: (علما ان $\upsilon\lambda = c$)

$$mv = h/\lambda \quad \ldots\ldots 5)$$

ان الجزء الايسر من المعادلة يمثل السلوك الجسيمي والجزء الايمن يمثل السلوك الموجي.

مبدأ الشك لهيزنبرك Heisenberg Uncertainty Principle

في عام 1927 أوضح الفيزياوي الالماني هيزنبرك Werner Heisenberg ان استخدام اي طريقة تجريبية لتحديد موضع وعزم اي جسم متحرك تتسبب في تغيرات في واحد او كلا الموضع والعزم. وبهذا يدخل عنصر من الشك على القياس. وقد استنتج من ذلك انه لا يمكننا تحديد موقع وكمية حركة الالكترون بدقة وذلك لانه في حالة حركة مستمرة. ان صغر حجم الالكترون وحركته المستمرة، يحتم علينا استخدام اشعة ذات طول موجي قصير جدا لتحديد

موقعه. ان استخدام مثل هذه الاشعة سوف تجعل الالكترون يكتسب جزءا من طاقتها مما يؤدي الى تغير في موقعه وحركته.

ميكانيك الموجة Wave Mechanics

ان عملية تفسير موحد للطبيعة الموجية المزدوجة للمادة والاشعاع ادى الى ظهور ما يسمى الميكانيك الموجي او ميكانيكا الكم. ان التطورات الاولية المهمة في مجال ميكانيكا الكم كانت بفضل هيزنبرك Heisenberg و شرودنجر Schrodinger. واعتمادا على ما قام به لويس دي برولي وضع شرودنجر عام 1926 المعادلة:

$$\partial^2\psi/\partial x^2 + \partial^2\psi/\partial y^2 + \partial^2\psi/\partial z^2 + 8\pi^2 m/h^2 (E-V)\psi = 0$$

حيث E هي الطاقة الكلية للالكترون، V الطاقة الكامنة للالكترون ، ψ psi دالة الموجة في الاتجاهات الثلاث x، y، z.

ان النظرية التي تصف سلوك الجسيمات الذرية وفقا للمعادلة الموجية تدعى الميكانيك الموجي ، وان تطبيق هذه النظرية الموجية على الذرات تعطي النتيجة نفسها التي حصل عليها بور لمستويات طاقة الالكترون في ذرة الهيدروجين وانها في الوقت ذاته تعطي تفسيرا صحيحا للذرات الاكثر تعقيدا.

ان احد المعالم الاساسية في ميكانيك الموجة هو انه بالرغم من عدم امكانية تحديد موقع الالكترون باعتباره جسيما واضح المعالم، فله بدلا من ذلك دالة موجة Wave Function يرمز لها بالحرف اليوناني (ψ بساي) وهي تصف اشكال وطاقات الموجات الالكترونية. ان كل من هذه الموجات الممكنة يدعى مدارا Orbital، ولكل مدار في ذرة ما طاقة متميزة ، وهو يصف مجالا حول النواة يمكن ان نتوقع وجود الالكترون فيه.

ان دالة الموجة يمكن ان تفسر بطريقتين، **اولهما** هو ان الالكترون يمكن اعتباره جسيم واضح المعالم، ومربع دالة الموجة ψ^2 يفسر احتمالية وجود الالكترون عند اي نقطة معينة. والطريقة **الثانية** هو انه يمكن اعتبار الالكترون وكأنه توزيع مفروش Smeared من الشحنة السالبة، حيث تتغير كثافتها من مكان الى اخر وفقا لقيمة ψ^2.

ان مستويات الطاقة المختلفة في الذرة وطبقا للميكانيكا الموجية تتألف من مدار واحد أو اكثر، وفي الذرات المحتوية على اكثر من الكترون واحد يتحدد توزيع الالكترونات حول النواة بعدد ونوع مستويات الطاقة المشغولة، ولذلك ولفهم طريقة ترتيب الالكترونات حول الذرة يجب معرفة الاعداد الكمية.