المشابه للغازات الخاملة، وذلك بأن تكتسب الذرة إلكتروناً فتصبح أيوناً سالباً أو أن تفقد إلكتروناً فتصبح أيوناً موجباً. ومن الأمثلة عن ذلك ذرات المعادن القلوية (alkali metals) التي يوجد فيها إلكترون واحد في المدار الأخير ضعيف الاتصال مع النواة ويسهل انفصاله عنها. وبالمقابل فإن العناصر الهالوجينية (halides) ينقصها إلكترون واحد حتى يصبح المدار الأخير فيها كامل الامتلاء بالإلكترونات.

Alkali Metals	Halides
$Li : 2s^1$	$F : 2p^5$
$Na : 3s^1$	$Cl : 3p^5$
$K : 4s^1$	$Br : 4p^5$
$Cs : 6s^1$	$I : 5p^5$

فعندما يفقد الصوديوم مثلاً إلكتروناً واحداً يصبح التوزيع الإلكتروني فيه $2p^6$ ويشبه في ذلك الغاز الخامل (Ne)، وتتحول ذرة الصوديوم إلى ايون الصوديوم Na^+.

وبالمقابل إذا اكتسب الكلورين إلكتروناً واحداً يصبح التوزيع الإلكتروني فيه $3p^6$ ويشبه في ذلك الغاز الخامل (Ar)، وتتحول ذرة الكلور إلى ايون الكلور Cl^-.

وعندما يتحد الايون السالب مع الايون الموجب، نحصل على البلورة الأيونية

$$Na^+ + Cl^- \rightarrow NaCl + 7.9\ eV$$

(غاز) (غاز) (صلب)

ويتم الإتحاد بسبب قوة الجذب بينهما (قانون كولم)، وتكون طاقة الوضع الكهربائية لهما تساوي

$$E = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

حيث q هي الشحنة الكهربائية على كل منهما، r المسافة بينهما. ويقتربان من بعضهما (بسبب قوة الجذب) إلى حد معين حين تبدأ قوى التنافر بالظهور عندما تصبح r صغيرة وتزداد هذه القوة مع نقصان المسافة. وإذا اعتبرنا أن قوة التنافر تؤدي إلى طاقة وضع طاردة على النحو:

$$E_{rep} = \frac{B}{r^n}$$

فإن الطاقة الكلية للنظام تصبح تساوي

$$E = \frac{B}{r^n} - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_o r} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1\text{–}3)$$

وبإجراء التفاضل نحصل على قيمة r عندما تكون الطاقة أقل ما يمكن، وتسمى هذه المسافة $r = r_o$ بمسافة الاتزان، ثم نعوض بالمعادلة السابقة فنحصل على الطاقة الدنيا

$$E_{\min} = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_o r_o}\left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

وهذه الطاقة هي طاقة الربط لزوج واحد من الأيونات. ولكن البلورة تشتمل على عدد كبير جداً من الأيونات السالبة والموجبة مرتبة حسب البناء البلوري، ففي بلورة الملح NaCl مثلاً يحيط بكل ذرة من ذرات الصوديوم ما يلي من الذرات:

6 ذرات من الكلورين (–) على مسافة r_o

12 ذرة من الصوديوم (+) وعلى مسافة $\sqrt{2}\, r_o$

8 ذرات من الكلورين (–) وعلى مسافة $\sqrt{3}\, r_o$

6 ذرات من الصوديوم (+) وعلى مسافة $2\, r_o$

وهكذا ...

وبناء على ذلك فإن طاقة كولم الكهربائية تساوي

$$E = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_o r_o}\left(6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \ldots.\right) = \frac{-q^2\alpha}{4\pi\varepsilon_o r_o}$$

ويسمى الثابت α بثابت مادلونج، وتختلف قيمته باختلاف نوع البناء البلوري للمادة. واليك قيمة α لبعض أنواع البلورات:

البناء البلوري	α
NaCl	1.747
CsCl	1.763
ZnS	1.638

وعليه فإن طاقة الربط الكلية لبلورة مؤلفة من N من هذه الجزيئات (NaCl) يساوي

$$E_o = -\frac{q^2\alpha N}{4\pi\varepsilon_o r_o}\left(1 - \frac{1}{n}\right) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1\text{–}4)$$

وكثيراً ما يُعتمد الشكل الأسي (exponential) لطاقة التنافر بدلاً من $\left(\frac{1}{r^n}\right)$، أي أن

$$E_{rep} = Be^{-r/\rho}$$

فتصبح الطاقة الكلية للنظام

$$E = -\frac{q^2\alpha}{4\pi\varepsilon_o r} + Be^{-r/\rho}$$

وبإجراء التفاضل للحصول على أقل قيمة للطاقة، ثم التعويض عن B بدلالة r_o، نحصل على

$$B = \frac{\alpha \rho q^2}{4\pi\varepsilon_o r_o^2} e^{r_o/\rho}$$

وبالتالي فإن الطاقة الكلية تساوي

$$E = -\frac{q^2\alpha}{4\pi\varepsilon_o r_o}\left(1 - \frac{\rho r}{r_o^2} e^{(r_o - r)/\rho}\right)$$

وعندما تكون $r = r_o$ (وضع الاتزان) فإن

$$E_o = -\frac{q^2\alpha}{4\pi\varepsilon_o r_o}\left(1 - \frac{\rho}{r_o}\right) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1\text{–}5)$$

ويمكن إيجاد قيمة تقريبية للثابت ρ من خلال قياس معامل الانضغاط κ للبلورة الصلبة (compressibility) حيث أن هذا المعامل يساوي

$$\frac{1}{\kappa} = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2})_{r=r_o}$$

وقد وجد أن قيمة ρ لملح الطعام (NaCl) تساوي 0.32Å

وللبلورة (KBr) تساوي 0.33Å

وللبلورة (LiI) تساوي 0.36 Å

وفي المعدل فان $\frac{\rho}{r_o} \sim 0.1 - 0.12$

وبعد هذا التحليل لقوى الجذب والتنافر والطاقة المتولدة عنهما، نورد فيما يلي طاقة الربط الأيونية لبعض هذه البلورات

البلورة	r_o	E_o
LiF	2.01 Å	10.52 eV/ion pair
LiBr	2.75	8.24
NaCl	2.82	7.93
NaI	3.24	7.08
KCl	3.15	7.20
KBr	3.30	6.88

3–1–1 الرابطة التشاركية (*Covalent Bond*)

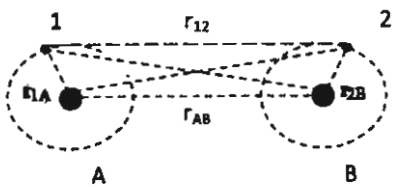
إن هذه الرابطة قوية، إذ أن طاقة الربط الناشئة عنها تعادل طاقة الربط الأيونية (من نفس الرتبة، أي حوالي 10eV/molecule). ومن المواد التي ترتبط ذراتها بهذه الرابطة التشاركية الجزيئات الثنائية مثل H_2, N_2, O_2, F_2... وهي في حالة الصلابة، كما أن هذه الرابطة موجودة بين ذرات المواد شبه الموصلة مثل Si، Ge، $C_{(diamond)}$، وفي كثير من المواد العضوية الصلبة المؤلفة من الهيدروجين والكربون، وبعض المركبات مثل H_2O, NH_3,SiC وغيرها.

ومن الواضح أن الذرات من نفس النوع لا يمكن أن تغير من التوزيع الإلكتروني فيها بحيث تتكون أيونات سالبة وأخرى موجبة، بل إن هذه الرابطة التشاركية تنشأ بين الذرات (حين اقترابها من بعضها البعض) عندما تشترك ذرتان متجاورتان في زوج واحد أو أكثر من الإلكترونات الموجودة في المدار الأخير لكل منهما الذي يكون عدد الإلكترونات فيه غير مكتمل. ومن الأمثلة على ذلك: $H(1s^1)$، $C(2s^2\ 2p^2)$، $Si(3s^2\ 3p^2)$، $O_2(2s^2\ 2p^4)$، $Cl(3s^2\ 3p^5)$.

وفي جميع هذه الذرات يكون المدار الأخير غير ممتلئ بالإلكترونات فالهيدروجين ينقصه إلكترون واحد ، والكربون ينقصه أربعة إلكترونات، والأكسجين ينقصه اثنان من الإلكترونات وهكذا.

ولنأخذ الهيدروجين مثلاً، إذ يوجد في كل ذرة إلكترون واحد عندما تكون الذرتان متباعدتين، وتكون طاقة كل منهما تساوي E_0 (طاقتها وهي في المستوى الأرضي). وعندما تقتربان من بعضهما إلى مسافة لا تزيد عن بضعة أنجستروم تتداخل السحابتان الالكترونيتان فيهما، وترتفع احتمالية انتقال الإلكترون من الذرة التي هو فيها إلى الذرة الأخرى، ولا يمكن القول بأن هذا الإلكترون موجود في الذرة الأولى وذاك الإلكترون في الذرة الثانية، بل هو نظام واحد ينتمي فيه كل من الإلكترونين إلى الذرتين في آن واحد. وفي هذه الحالة التي تشترك فيها الذرتان في احتضان الإلكترونيْن في نفس الوقت تتغير فيها الدالة الموجية (ψ) للنظام وبالتالي يتغير توزيع الشحنة الإلكترونية $|\psi|^2$ وتتغير الطاقة الكلية للنظام. وينشأ عن ذلك زيادة في كثافة الشحنة الإلكترونية في المنطقة بين الذرتين مما يؤدي إلى سحب الذرتين نحو بعضهما إلى أقرب مسافة ممكنة وإلى خفض طاقة الوضع الكهربائية بينهما إلى أقل ما يمكن (قيمة أقل من $2E_0$).

هذه هي الصورة الوصفية لكيفية نشوء الرابطة التشاركية بين الذرات. أما الحسابات الكمية لحالة هذا النظام فتبدأ بإيجاد الهاملتونيون للنظام ثم الدالة الموجية لهذه الحالة التشاركية، ومن ثم إيجاد طاقة الربط التشاركية:



وبالنظر إلى الشكل نرى بأن طاقة الوضع الكهربائية للنظام

$$V=\frac{e^2}{r_{AB}}-\frac{e^2}{r_{1A}}-\frac{e^2}{r_{1B}}-\frac{e^2}{r_{2A}}-\frac{e^2}{r_{2B}}+\frac{e^2}{r_{12}}$$

وبالتالي فإن الهاملتونيون للنظام يساوي

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2+\nabla_2^2\right)+V$$

إي أن معادلة شرودنجر للإلكترونين هي:

$$H\psi=E\psi$$

حيث تعتمد الدالة الموجية على مواضع الإلكترونين (r_1,r_2) وعلى الحالة الأسبينية (spin) لكل منهما:

$$\psi=\psi\left(r_1,r_2,s_1,s_2\right)$$

ولا يمكن الحصول على حل تام لمعادلة شرودنجر بوجود جميع الحدود الواردة في H، إذ لا بد من إجراء بعض التقريب ليصبح الهاملتونيون كما يلي

$$H=-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2+\frac{e^2}{r_{1A}}\right)-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2+\frac{e^2}{r_{1B}}\right)+H' \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1\text{–}6)$$

حيث

$$H'=\frac{e^2}{r_{12}}+\frac{e^2}{r_{AB}}-\frac{e^2}{r_{1B}}-\frac{e^2}{r_{2A}}$$

وبمعالجة المسألة باستخدام ميكانيكا الكم، وإدخال مفهوم الجسيمات المتماثلة (Identical Particles) نجد أن الدالة الموجية للنظام إما أن تكون دالة متماثلة (Symmetric) أو غير متماثلة (Antisymmetric):

$$\psi_s=\left(\psi_\alpha(r_1)\psi_\beta(r_2)+\psi_\alpha(r_2)\psi_\beta(r_1)\right) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1\text{–}7)$$