

الباب الخامس

ذرة الأيدروجين

The hydrogen atom

نحن هنا بصدد لحل ميكانيكا الكم لمسألة ذرة الأيدروجين وقد حلت تلك المسألة من ناحية تناولها هيسنبرج أو تمثيل شرودنجر. وهنا نلقي الضوء علي معادلة شرودنجر. باعتبار ذرة الأيدروجين ابسط الذرات لاحتوائها علي إلكترون ونواة. والإلكترون ($-e$) والنواة $-Ze$ حيث $-Z$ العدد الذري وطاقة الجهد ما هي إلا دالة فقط لمسافة الفصل للإلكترون والنواة .

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{or} \quad = -\frac{Ze^2}{r} \quad (5-1)$$

$-Z$ العدد الذري، $-e$ الشحنة الالكترونية، r المسافة بين النواة ولكننا نلاحظ أيضا في هذه المسألة أن الجهد متناسق الدائرية وهذا يعني عدم وجود زوايا احداثية، وإنما هنا سوف نجد تلك الزوايا لاستخدامها للعمل في إحداثيات قطبية دائرية كما تعمل بالنسبة للدوار المشدود. ومعامل هاميلتونيان لذرة الأيدروجين هو :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \quad (5-2)$$

كما أن الصورة الاخرى لهذا النظام لمعادلة شرودنجر يمكن أن تأخذ الشكل :

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0 \quad (5-3)$$

لاحظ استخدام الكتلة المختزلة (V) للإلكترون والنواة مفضلا ذلك عن كتلة الإلكترون حيث النواة تتحرك ببطء نسبيا لمركز النواة كما

يتحرك الإلكترون. وباستخدام كتلة الإلكترون سوف يدخل خطأ نسبي حوالي 0.5% في الطاقة .

فصل المتغيرات :

والحل لمعادلة شرودنجر هو :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}\right)\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi) \quad (5-4)$$

وكما ذكرنا سابقا وذلك بوضع معامل لابلاس في محاور قطبية دائرية واستبدالها في المعادلة (5-4) :

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[(E-V)(r)]\psi = 0 \quad (5-5)$$

حيث $V(r)$ تقابل $\frac{-Ze^2}{r}$ وقد استطعنا مسألة الدوار المشدود وذلك

بفصل المتغيرات وسوف تستخدم نفس التقريب هنا. كما يلي :

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)T(\theta)F(\phi)$$

حيث R دالة في r ، وهكذا لبنية الدوال .

بالاستبدال في المعادلة (5-4) ثم بعد ذلك بالقسمة على RTF

لتعطي المقدار :

$$\frac{1}{Rr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{1}{T r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dT}{d\theta}\right) + \frac{1}{F}\left(\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2F}{d\phi^2}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[(E-V)(r)] = 0 \quad (5-6)$$

وبضرب المقدار $(r^2\sin^2\theta)$ ثم بالتعديل :

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{T} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu r^2 \sin^2 \theta}{h^2} [(E-V)(r)] = 0 \quad (5-7)$$

وتستطيع فصل ϕ عن غيره من المتغيرات حيث انه غير مستقل :

$$\frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} = \frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{T} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{2\mu r^2 \sin^2 \theta}{h^2} [(E-V)(r)] \quad (5-8)$$

ويمكن وضع الجزء بالثابت $-m^2$ علي هذا النحو :

$$\frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} = -m^2 \quad (5-9)$$

وبالاستبدال في المعادلة (6-5) لنحصل :

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{T} \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) \right] - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2\mu}{h^2} [(E-V)(r)] = 0 \quad (5-10)$$

ولو ضربنا في الحد (r^2) أعدنا الترتيب نجد :

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) \right] + \frac{2\mu r^2}{h^2} [E-V(r)] = \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{T} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) \right] \quad (5-11)$$

تلاحظ من المعادلة (5-11) أن الطرف الأيسر يعتمد علي (r) ولا يعتمد علي θ . بينما العكس لطرف الجانب الأيمن. وعموما المعادلة (5-11) يمكن استخدامها لكل قيم المتغيرات فقط لو كلا الجانبين

متساويا الثابت ولنأخذ الثابت β . ونحن هنا الآن سوف نفصل المتغيرات كاملا إلى ثلاثة معادلات كل واحد معتمد علي متغير.

معادلتى ϕ, θ التوافق الدائري Spherical harmonics والمعادلات الثلاثة المحلولة يمكن كتابتهم :

$$\frac{\partial^2 F(\phi)}{d\phi} = -m^2 F(\phi) \quad (5-12)$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \left[\frac{d}{d\theta} \left\{ \left[\sin\theta \frac{dT(\theta)}{d\theta} \right] \right\} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} T(\theta) + \beta T(\theta) \right] = 0 \quad (5-13)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2U}{h^2} [E - V(r)] R(r) \right] - \frac{\beta}{r^2} R(r) \quad (5-14)$$

والمعادلتين (5-12) و (5-13) في مسألة الدوار المشدود والحل هو ذاته بالتمام، فيما عدا تطلب مفضلا ذلك :

$$\beta = L(L+1) \quad (5-15)$$

$J(J+1)$ في مسألة الدوار المشدود، نحن نعرف الآن L, m لإعداد الكم المتعلقة للمتغيرات الزاوية عدد الكم $-L$ يعرف عدد الكم العزم الزاوي المداري **orbital angular-momentum number** أو تماما عدد العزم المداري، $-m$ يعرف بعدد الكم المغناطيسي ثم بعد ذلك هذا الكم سوف يأخذ الرموز $(S, P, d \text{ and } F)$ هذه المجموعة اشتقت أساسا من المطياف الذري.

والناتج للدوال الزاوية :

$$T_{lm}(\theta) F_m(\phi) = Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5-16)$$

مرة أخرى توجد التوافق الكروي، دالة الموجه الكلية التي يمكن تعتبر كنتاج دالة الاعتماد r - (نصف قطرية) و $R(r)$ ومتوافقية دائرية والتناسقية الدائرية (المتوافقية)، هنا مهمة عندما نفسر الأنظمة الذرية المتماثلة غير عندما تكون مستقلة $F(\phi), T(\theta)$.

المعادلة (٢) - الطاقة :

تدلنا المعادلة (١٤ - ٥) علي مسألة أخري، والحل امتداد لسلسلة،
وعلي الأصح من الخوض في التفصيل عن الزمن فلو استبدلنا $l(l+1)$
بالنسبة β وأشكال الدالة للحد $V(r)$ للمعادلة (١٤ - ٥) لنحصل
علي :

$$\frac{1}{r^2} \left(\frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[-\frac{L(L+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{E\epsilon^2}{r} \right) \right] R = 0 \quad (٥ - ١٧)$$

ولتجنب مشكلة الثوابت وللتبسيط لناخذ الشكل للمعادلة كما هو أن:

$$\alpha^2 = -\frac{2UE}{\hbar^2} \quad (٥ - ١٨)$$

$$\lambda = \frac{UZ\epsilon^2}{\hbar^2 \alpha} \quad (٥ - ١٩)$$

$$P = 2\alpha r \quad (٥ - ٢٠)$$

$$\mathcal{S}(P) = R(r) \quad (٥ - ٢١)$$

وبذلك تصبح المعادلة (١٧ - ٥) علي النحو :

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left[\rho^2 \frac{d\mathcal{S}(\rho)}{d\rho} + \left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} \right) \mathcal{S}(\rho) \right] = 0 \quad (٥ - ٢٢)$$

والمتغير (٢) وبالتالي (٢) يمكن أخذه قيمة من صفر إلي ما لا نهاية
دعنا نعتبر المعادلة (٢٢ - ٥) عند (٢) كبيرة سنجري التفاضل لنحصل:

$$\frac{2}{\rho} \frac{dS}{d\rho} + \frac{d^2 S}{d\rho^2} + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} \right] S = 0 \quad (5-23)$$

وعند ρ بقيمة مناسبة وكل الأجزاء مع ρ في المقام نصبح مهملة لتعطي :

$$\frac{d^2 S}{d\rho^2} \cong \frac{1}{4} S \quad (Rarger) \quad (5-24)$$

والحل إذا: (Larger) (5-25) $S(\rho) = e^{\pm\rho/2}$

وتعني (+) للأس تكون لا نهائية كلما (ρ) تقترب من لا نهاية وبالتالي دالة الموجه تظل متناهية علي الأمكنة وهذا يعتبر غير مقبول أو بالتالي (-) الأس هو الاختيار والسلوك المتقارب للحد $S(\rho)$ لكبر (ρ) إذا يكون $e^{-\rho/2}$ علي كل المنطقة أو ألمدي للحد (ρ) ونحن نفترض أن $S(\rho)$ يأخذ الشكل:

$$S(\rho) = \rho(\rho) e^{-\rho/2} \quad (5-26)$$

وتكون الخطوة التالية لمفكوك $P(\rho)$ كسلسلة لمفكوك في ρ بدون التدخل في التفاصيل. وهذا يؤدي إلي علاقة لشكل باولنج وويلسون Pauling and Wilson .

$$a_{v+1} = \frac{-(\lambda - l - 1 - v)}{2(v+1)(l+1) + v(v+1)} a_v \quad (5-27)$$

عند $-v$ كبيرة تبدأ المعاملات تتصرف كالمعاملات في تمدد السلسلة بالنسبة للحد e^{ρ} وبالنسبة للحد $-v$ كبيرة فيكون الناتج لا نهائي

$$e e^{-\rho/2} = e^{\rho/2} \quad (5-28)$$

وبالتالي السلسلة المتولدة بواسطة المعادلة (5-27) يجب أن تنتهي بعد عدد نهائي للأجزاء لتجعل دالة الموجه محدودة. مرة أخرى مع السلسلة الممتدة السابقة. يمكن أن تختار هذا بواسطة المتطلبات لذلك

البسط في المعادلة (٢٧ - ٥) ليكون مساويا للصفر لبعض قيم التردد (٧). ونهاية المعادلة (٢٧ - ٥) عند الحد $v\text{th}$ يتطلب أن :

$$\lambda = l + 1 + v \quad (٥ - ٢٩)$$

حيث أن كلا من v & l إعدادا. λ أيضا عدد والتي تعرف (n).
والحل بالنسبة للحد (l) في جزئية (n) هو

$$0 \leq L \leq n-1 \quad (٥ - ٣٠)$$

ولا يوجد حدود علي الحد (n) غير انه يكون اكبر من الصفر والتي تعرف بعدد الكم الأساسي :

ولو عاد لنا (n) بالحد (λ) كما في المعادلة (١٩ - ٥) نجد أن :

$$n = \frac{uZe^2}{h^2 \alpha} \quad (٥ - ٣١)$$

أو الحل بالنسبة (α)

$$\alpha = \frac{uZe^2}{h^2 n} \quad (٥ - ٣٢)$$

ولكن بتربيع (α) كما عينا جزئية الطاقة بواسطة المعادلة ١٨ - ٥ نجد :

$$\alpha^2 = \frac{\mu^2 Z^2 e^4}{h^2 n^2} = -\frac{2VE}{h^2} \quad (٥ - ٣٣)$$

والحل بالنسبة للطاقة E نحصل علي :

$$E = \frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2 h^2} \quad (٥ - ٣٤)$$

$$= -\frac{2\pi^2 \mu^2 Z^2 e^4}{n^2 h^2} \quad (٥ - ٣٥)$$

المعادلة الأخيرة (34 - 5) هي تقريبا نفس المعادلة المشتقة من نظرية بوهر. ماعدا فقط إننا أخذنا الكتلة المختزلة بدلا من كتلة الإلكترون

متعدد الحدود $P(\rho)$ في المعادلة (٢٦ - ٥) والذي يعرف بمرافق لجويري المتعدد الحدود وعموما تعطي بالشكل $L_{n+1}^{2l+1}(\rho)$.

والجزء القطري لدالة الموجه الهيدروجينية تأخذ الشكل:

$$R_{nL}(r) = \left\{ \frac{(n-l-1)!}{2n[(n-1)!]^3} \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \right\}^{1/2} e^{-\rho/2} L_{n+1}^{2l+1} \quad (٢٦ - ٥)$$

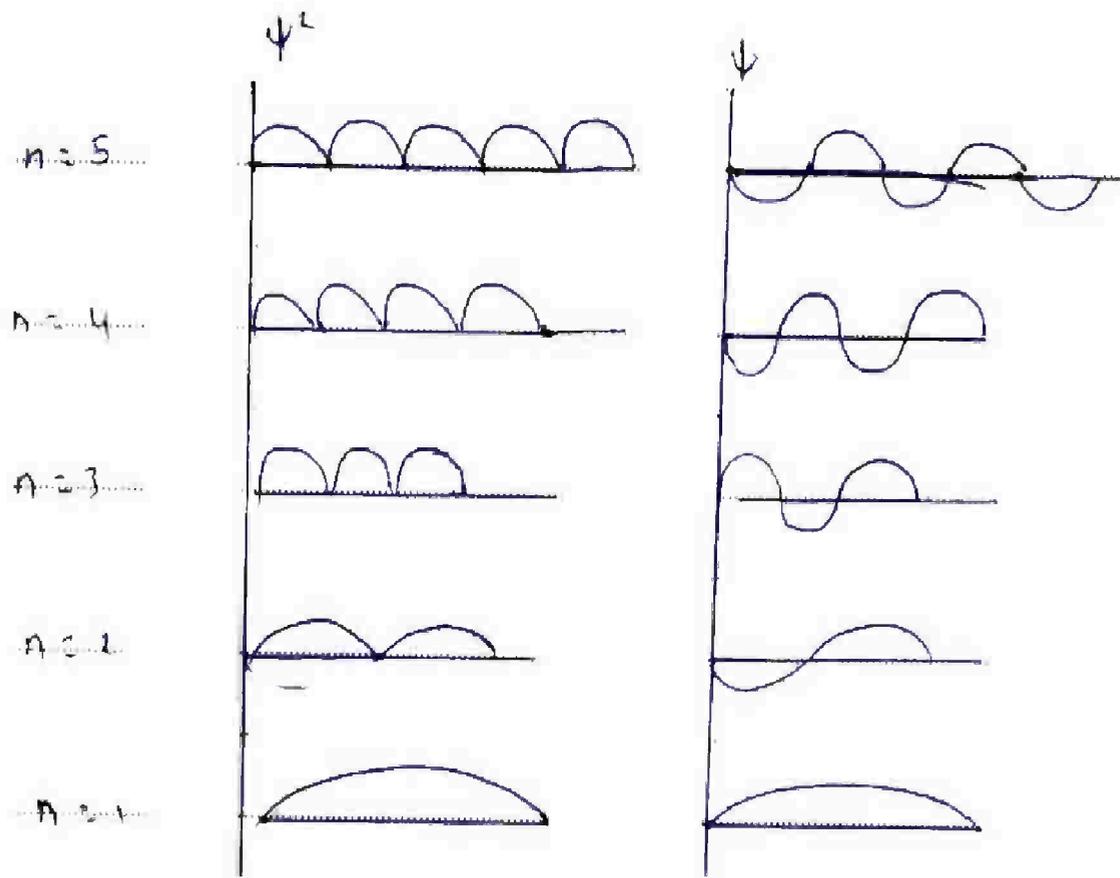
حيث الأقواس تعتبر معاملات معايره، a_0 - نصف قطر بوهر لاحظ أن هذه المعادلة تعتمد علي إعداد الكم (n, l) ويعتقد أيضا الطاقة علي (n) بعض الدوال القطرية سجلت في الجدول (١ - ٥) وعديد من تلك الدوال القطرية مرسومة في الشكل (١ - ٥) حيث نرسم الحد $R_{n,1}(r), R_{n,1}^2(r)$ وكذلك $4\pi r^2 R_{n,1}^2(r)$.

وأول اثنين لها معلومات سابقة وأما الثالث يعطي احتمالية وجود الإلكترون في المدار الدائري في السمك (dr) لنصف القطر (r) و $(4\pi r^2)$ مساحة السطح للمدار الدائري r دالة الكثافة الالكترونية $R_{n1}^2(r)$ بينما $4\pi r^2 R_{n1}(r)$ دالة توزيع لتعطي كل الاحتمالات لإيجاد الإلكترون عند r وما بين $r, r+dr$

n	l	
1	0	$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} e^{-\rho/2}$
2	0	$R_{20}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{2\sqrt{2}} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$
2	1	$R_{21}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{2\sqrt{6}} \rho e^{-\rho/2}$
3	0	$R_{30}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{9\sqrt{3}} (6 - 6\rho + \rho^2) e^{-\rho/2}$
3	1	$R_{31}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{9\sqrt{6}} (4 - \rho)\rho e^{-\rho/2}$
3	2	$R_{32}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{9\sqrt{30}} \rho^2 e^{-\rho/2}$
4	0	$R_{40}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{96} (24 - 36\rho + 12\rho^2 - \rho^3) e^{-\rho/2}$
4	1	$R_{41}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{32\sqrt{15}} (20 - 10\rho + \rho^2)\rho e^{-\rho/2}$
4	2	$R_{42}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{96\sqrt{5}} (6 - \rho)\rho^2 e^{-\rho/2}$
4	3	$R_{43}(r) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{96\sqrt{35}} \rho^3 e^{-\rho/2}$
and so on.		

* a_0 is the Bohr radius and ρ is $2\mu Ze^2 r / \hbar^2$

جدول (١-٥) يصف نصف القطر لدالة موجة المدار الهيدروجيني



شكل (1) سلوك نصف قطر الدالة موجة الهيدروجين $R_{el}(r)$

الكثافة الإلكترونية $R_{el}^2(r)$ ودالة توزيع النصف قطرية $4\pi r^2 R_{n,1}^2(r)$

وهنا يوجد ملاحظتين مهمتين يمكن وضعهما أو الأخذ بهما في الجدول (1 - 5) والأشكال (1 - 5).

أولاً: يوجد واحد أو أكثر من عقدة (موضوعة حيثما دالة الموجه تؤول للصفر) في كل الدوال القطرية فيما عدا تلك المناظرة لأقصى (L) المفترض (n). هذا الوضع يبين أيضاً شدة أو كثافة الإلكترون ودالة التوزيع القطرية واحتمالية وجود صفر للإلكترون عند هذا الوضع.

ملاحظة أخرى وهو أن بالنسبة للحد Z للقيمة (1) والرقم الكمي n للقيمة 1 فأقصى توزيع قطري يتأتي عنده المدار واحد لبوهر وأقصى احتمالية لقيمة (2) بالنسبة للإلكترون واقل حالة طاقة تحدث لذرة الأيدروجين هي لتلك المدارات لمدار بوهر.

وبالنسبة للصفات العقدية لداله الموجه فبالنسبة لنوع دالة افتراضية فأكثر لعقد في المدار ذو طاقة عالية.

مثال: قارن الدالة (S) نجد واحد لقيمة واحد لا توجد به عقده وبالنسبة $n=2$ توجد به عقدة واحدة وبالنسبة $n=3$ توجد به عقدتان وهكذا..... وبالتالي زيادة الطاقة بناءا علي زيادة العقد.

ففي ذرة الأيدروجين مع كل قيم (م) لقيمة (n) تعطي مدارات لها نفس الطاقة. وعدد الكم $n=2$ ، $l=1$ لا تحتوي عقده قطرية ولكن جميع دوال p تمتلك عقده واحدة زاوية. وعموما كل إعداد (S) أو إعداد (p) فإنها لها نفس عدد مرات العقد وهكذا وعلي نفس النظام نجد $n=3$ وهكذا.

محصلة دالة الموجه :

محصلة دالة الموجه لذرة الأيدروجين هي محصلة الدوال $R_{nl}(r) T_{lm}(\theta) F_m(\phi)$ وقد بينا فيما سبق أن تلك الدوال تعتمد علي أرقام الكم الثلاثة l, n, m وسوف نسوق المعني لكل من تلك الرموز الثلاثة كما يلي :

فمثلا نجد أن طاقة الذرة معتمدة أساسا علي عدد المدارات الموجودة في الذرة من المعادلة (5-34) والتي يمكن أخذها علي الصورة :

$$E_{nl} = -\frac{me^4}{2h^2} \frac{1}{n^2} \quad (5-36)$$

وتعني عدد المدارات بعدد الكم الرئيسي في الذرة (n) principle quantum number وهو المسئول عن تحديد قيمة الطاقة.

وأیضا یبین عدد العقد الموجود في كل مدار بالصيغة (n-1) عقدة لكل دالة ψ . وعدد الكم الرئيسي له أن يأخذ الأرقام من واحد وحتى أي رقم صحيح وهو $n=1, 2, 3, \dots$. وأما رقم الكم (l) - وهو ما يعرف بعدد الكم الثانوي وهو الذي يحدد رقم كم عزم الحركة

الزاوي في المدارات الذرية **angular momentum quantum number** أو ما يسمى **Azimuthal** أي الثانوي وهو مرتبط بعدد الكم الرئيسي (n) ويأخذ الرقم من صفر وحتى ($n-1$). لذا نجد ارتباطا بين تلك الأعداد المكتمة. كذلك نلاحظ أن (l) تحدد الشكل الفراغي للدالة ويمكن القول بأن عدد العقد هو في العزم الزاوي (L).

وأما ما تبقى من إعداد الكم وهو (m) وهو المرتبط بمركبة عزم الحركة الزاوي علما بان (l) هي التي تحدد القيم المتاحة لرقم الكم (m) من حيث أن (m) تأخذ أرقاما ما من $-l$ وحتى $+l$ مرورا بالعدد الكم $= 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ بالصفر بمعنى $m=0$.

لذا هذا الجزء من إعداد الكم (m) يعرف بعدد الكم المغناطيسي **magnetic quantum number**.

فصفات طيف الذرة يعتمد بشدة علي زاوية المدارات ولنشأة تلك المدارات. مثال، نهاية الانتقالات في المدارات مع قيمة $-L$ صفر إلي L واحد هي في الحقيقة كلها خطوط أساسية تري في الأيدروجين ولذرات عديدة أخري لهذا السبب التسمية أخذت من حيث المدارات مع قيم L بصفر فإنها تعرف بالرمز **S** حادة المدار (**sharp**). وإذا كانت $L=1$ تعرف بالأساس أي **Principle** وإذا كانت $L=2$ تأخذ (**d**) وهو الانتشار **diffuse** وأما $L=3$ يكون المدار **F** وهذا يعني **fine** كما توجد مدارات أخري ذات عزم زاوي اعلي من ذلك وهو ما تعرف (**g, h, i**) وهكذا.
أمثلة توجيهه :

احسب طاقة الإلكترون عند المسافة 52.9 Pm إذا علم أن ثابت العزل الكهربائي في الفراغ $8854 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ Cm}^{-2} \text{ C}^2$ والشحنة الالكترونية $1602 \times 10^{-19} \text{ C}$

الحل

من القانون لطاقة الوضع :

$$V = \frac{-e^2}{r}$$

أو :

$$V = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

وبالتعويض :

$$= \frac{(-1.602 \times 10^{-19})^2 C^2}{4 \times 3.14 \times 8854 \times 10^{-12} J^{-1} C^2 m^{-1} \times 529 \times 10^{-12} m}$$

$$= 43625 \times 10^{-18} J \quad \text{حيث } C - \text{ ثابت كولوم}$$

ويعبر عنها بالصورة المولارية فتكون طاقة الوضع علي النحو :

$$= 262840625 kJ/mol$$

وذلك بضرب الناتج في عدد افوجادرو. وهي تعتبر طاقة عالية عن طاقة رابطة جزئ الأيدروجين بعدة مرات (خمس مرات تقريبا).

مثال: ما هي القيمة المؤثرة المميزة إذا كانت الدالة

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad \text{دالة مؤثرة ومميزة للمؤثر } A^2 \text{ (مستخدما المعادلة}$$

الآتية):

$$A^2 Y_{10} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

الحل

من الملاحظ من المعادلة المأخوذة أن الحد الثاني من الطرف الأيمن

مساويا للصفر وهو أن θ - ثابتة للمتغير ϕ إذا:

$$A^2 Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \sin^2\theta$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \sin^2 \theta = 2 \sin \theta \cos \theta \quad \text{إذا علم أن :}$$

فإن :

$$\begin{aligned} A^2 Y_{10} &= -2 \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{3/2} \times \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \times \cos \theta) \\ &= -2 \left(\frac{3}{4 \times 3.14} \right)^{3/2} \times \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \times \cos \theta) \\ &= -2 Y_{10} \end{aligned}$$

إذا القيمة المميزة هي -2 حيث أن $l=1$ وهذا مطابق مع التعبير العام

مثال: بين أي من هذه الترحلات الآتية المسموح بها ؟

$$A, \psi_{15} \rightarrow \psi_{25}; B, \psi_{15} \rightarrow \psi_{2P}; C, \psi_{15} \rightarrow \psi_d$$

الحل

- A من المسألة حيث الارتحال من S إلى S فإن $\Delta l = \pm 1$ تساوي صفر فهذا غير مسموح .
- B نجد أن Δl مسموح وهذا بسبب $\Delta l = \pm 1$ أما من (P) إلى الحد أو من (S) إلى (P) .
- C غير مسموح لأي $\Delta l = 2$ فعملية الارتحال غير ممكنة حيث لا يحدث قفز لمدارين في لحظة واحدة .

مثال: احسب احتمالية وجود إلكترون في منطقة ما بين L_0 ، L_0+dl للحالة الأرضية للإيدروجين. بفرض أن $dl = (2Pm)3$ ، $L_0 = 53Pm$

الحل

باستخدام المعادلة :

$$= \frac{4}{L_0^3} L^2 e^{-2L/L_0} dl$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4}{(53)^3} (53)^2 e^{\frac{-2 \times 53}{53}} \times (2 \text{ pm})^3 \\
&= \frac{4}{(53)^3} (53)^2 \times (2)^3 e^{\frac{-2 \times 53}{53}} \\
&= \frac{4 \times 8}{(53)} e^{-2} = -0.5045 - 2 = \\
&= -2.5045 = \text{ont} : \text{lin} \\
&- 2.5045 = 0.081716
\end{aligned}$$

إذا فكيف يتم التوزيع المحتمل لوجود إلكترون في مدار ما ؟

بناءً على ما سبق، من الأمثلة، ومن التفسيرات، نجد أن الدالة $R(r)$ كدالة قطرية معتمد على المسافة (r) ما بين النواة والإلكترون ومربع تلك الدالة. فإن (r) في هذه الحالة يتبين البعد عن النواة للإلكترون. وسنتحدث عن الملاحظات المهمة في الشكل البنائي للذرة وهي :

أولاً: جميع الأفلاك من نوع (S) والتي أوضحنا أنه عندما طاقة الوضع تؤول إلى (∞) فإن r في هذه الحالة مساوية للصفر. انظر القانون $e^{-2/2}$ ولو أخذنا الفلك أو المدار انظر الجدول .

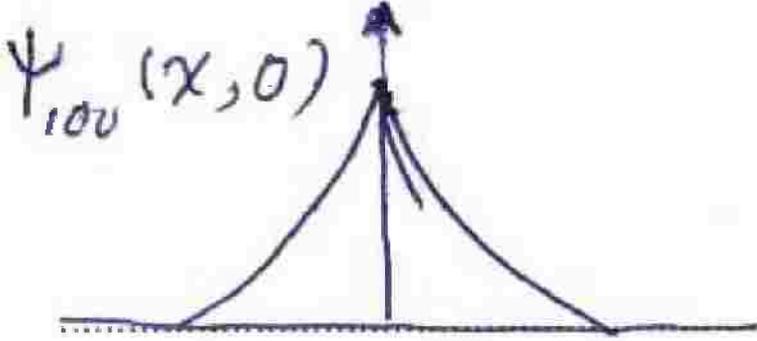
$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_0}\right)^{3/2} e^{-L/L_0} \quad (5 - 38)$$

حيث r تمثل الإحداثيات الثلاثة وهذا يعني إذا كان أحد المتجهات بصفر فيكون الثالث هو الثابت. ويأخذ الشكل مثلاً $L = (x^2)^{1/2} = (x)$

وبالتالي نعوض عن قيم (x) وترسم الدالة على هذا الأساس ونلاحظ من الرسم أن الميل المماس للدالة يأخذ الموجب والسالب من اليسار واليمين على التوالي إلا أن الميل $d\psi/dx$ غير متواصل بينما الدالة عند نقطة الأصل متواصلة ومستمرة انظر الشكل (٢) .

وهذا الشكل ما تتميز به الدالة عند نقطة الأصل .

شكل (هرم) .



شكل (٢) يبين دالة الموجه المستقرة لذرة الهيدروجين

ثانياً: يلاحظ مما سبق وجود قوي طرد مركزي وقوة تجاذب وهما متساويان. ولو أن قوة الطرد المركزي متلاشية فان قوة التجاذب هي الاقوي. وبالتالي يحدث التجاذب بين النواة والإلكترون. هذه ملاحظة حيث أن جميع المدارات من نوع (S) فان $L=0$ وان هناك انجرافاً من الإلكترون إلى النواة ولكن مثلما تتبأت وجود احتمالية لوجود الإلكترون بعيداً عن النواة. إلا إننا يجب أن نفرق بين مبدأين هما. طاقة حركة إلكترون وطاقة حركة مرتبطة بالحركة الدورانية ذاتها حول النواة. وهذا ما يعرف بقوة الطرد المركزي، وهذا النوع غير موجود حيث أيضاً عزم الحركة في المدار مساوياً للصفر لأنه دائري وليس في إحداثيات. وإنما تمثل هذه الحركة بأنها حركة تشبه بندوق الساعة حول المركز وعلي طول القطر ماراً بالمركز. وكلما كان الانحناء أكثر شدة وهي المنطقة الأكثر احتمالاً لوجود الإلكترون وتكون له طاقة حركة عالية.

ثالثاً: إذا علم أن $R(r)$ دالة مغايرة فإنها تحقق الشرط للفرض الثالث

واحد للتكامل .

$$\int_0^{\infty} [R(r)^2] r^2 dr = 1 \quad (5-39)$$

حيث المقدار $r^2 dr$ وحدة الحجم للمتغير r وتكون الاحتمالية لموضع الإلكترون في هذه الحالة ما بين r ، $r+dr$ علي النحو

$$R^2(r) r^2 dr \quad (5-40)$$

رابعاً: لو حاولنا أن نعين موضع الإلكترون علي جميع المحاور للدوال θ, ϕ وفي مكان ما بين (r) ، $(r + dr)$ فان المتغير للدوار θ, ϕ سيأخذ فيما بين $0, 2\pi, 0$ علي الترتيب

وفي هذه الحالة نركز علي موضع للإلكترون في جميع الاتجاهات حول النواة ويبعد عنها بالمسافة r وتكون الاحتمالية إذا بالتكامل علي كل الفراغ علي هذا النحو:

وفي هذه الحالة نركز علي موضع للإلكترون في جميع الاتجاهات حول النواة ويبعد عنها بالمسافة r وتكون الاحتمالية إذا بالتكامل علي كل الفراغ علي ها النحو:

$$\int \psi^2 d\tau = \int R^2(r) Y^2(\theta, \phi) r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \quad (5-41)$$

إذا علم أن تطبيق وحدة الحجم الفراغية في الإحداثيات الكروية التطبيق تعطي بالعلاقة $d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$ وبالتالي (5-41) تصبح:

$$= R^2(r) r^2 d\tau \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y^2(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi \quad (5-42)$$

وهذه العلاقة تعطي الاحتمالية عند مسافة قدرها r من النواة. وإذا علم بأن الدوال $\psi(\theta, \phi)$ دوال معايير normalization function ففي هذه الحالة تؤول للوحدة، وأن الاحتمالية حينئذ هي:

$$= R^2(r)^2 dr \quad (5-43)$$

وتعرف radial distribution بالتوزيع القطري :

مثال: احسب الوجود المحتمل لإلكترون في ذرة الأيدروجين الأرضية لمنطقة لتصف قطر ذرة بوهر .

الحل

$$probability = \int R^2 r^2 dr$$

ولنأخذ التعبير للفلك S نجد أن:

$$= \frac{4}{a_0^3} \int_0^{a_0} r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

وإذا أوضحنا نصف قطر ذرة بوهر أي $L = \frac{a_0}{r}$ وبالتعويض :

$$= 4 \int_0^1 L^2 e^{-2L} dr$$

وهذه المعادلة صورة تكامل قياسي تأخذ الحل :

$$\int x^2 e^{bx} dx = e^{bx} \left[\frac{x^2}{b} - \frac{2x}{b^2} + \frac{2}{b^3} \right]$$

وبالتالي يصبح التكامل علي هذا النحو :

$$\int_0^1 r^2 e^{-2r} dr = e^{-2r} \int_0^1 \left[\frac{r^2}{2} - \frac{2r}{4} - \frac{2}{8} \right]$$

$$= e^{-2} - \frac{2}{8} = - 20138629(antilin)$$

$$= 00338338$$

مثال: احسب المسافة المتوقعة لإلكترون من النواة في ذرة الأيدروجين في حالتها الأرضية ؟

الحل

إذا علم أن المدار (S) مدار كروي الشكل وبالتالي فان الحجم

يعطي بالعلاقة $d\tau = 4\pi L^2 dL$ وباستخدام العلاقة :

$$\psi_{15} = \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{1}{l_0}\right)^{3/2} e^{-l/l_0} r dr$$

الموضع :

$$(r) = \frac{1}{\pi l_0^3} \int_0^\infty e^{-l/l_0} 4\pi l^2 dl = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty \beta e^{-2l/l_0} dh$$

وبالتكامل نحصل علي :

$$r = \frac{4}{l_0^3} \cdot \frac{3 \times 2 \times 1}{(2/l_0)4} = \frac{3}{2} l_0$$

ملاحظة إذا كان تكامل العلاقة التالي علي النحو :

مضروب n

$$\int_0^\infty x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$$

مضروب n

مثلا إذا كان n=5 فإنها تأخذ الشكل :

$$5 \times 4 \times 3 \times 2 \times 1 = 120$$

وبالتالي :

$$b^{5+1} = b^{6+1}$$

وهكذا .
