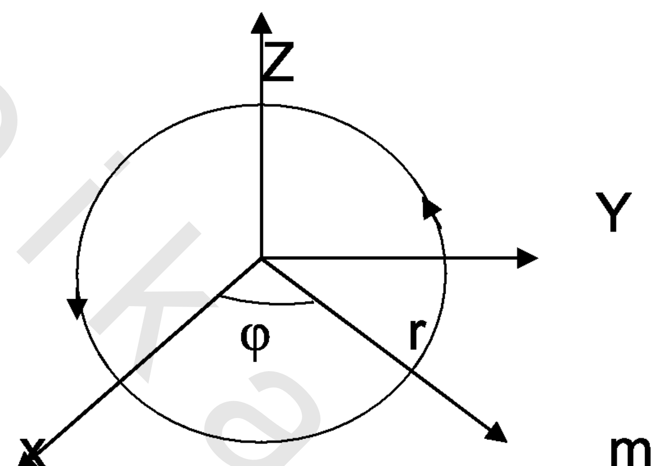
الباب الثالث

الدوران والعزم الزاوى

Rotation and Angular Momentum

دوار مشدود لكتلة واحدة :

قبل أن نتناول الدوار المشدود لكتلتين، يجب أن نفهم أولاً جسيم لكتلة واحدة ويتحرك أيضاً فى حركة دورانية حول المركز، انظر الشكل (١).



شكل (١) دوران جسيم (m) على بعد من مركز (r)، وله عزم زاوى فى اتجاه المحور z

من هذا الشكل لا يمكن وصف هذا التحرك الدورانى بصورة تقليدية باستخدام المحاور الخطية ولكن تحويل تلك الصورة إلى صورة زاوية والتعبير الخطى للطاقة على هذا النحو .

$$T = \tfrac{1}{2} m v^2 \qquad (3\text{-}3)$$

حيث v السرعة الخطية ولتحويلها إلى السرعة الزاوية (w) angular velocity حيث العلاقة بين السرعة الزاوية والسرعة الخطية على هذا النحو $v = wr$ ، r نصف القطر .

وبالتعويض فى المعادلة (3-1) عن (v) لتصبح :

$$T = \tfrac{1}{2} m (wr)^2 \qquad (3\text{-}4)$$
$$= \tfrac{1}{2} I w^2 \quad \& \quad I = mr^2$$

وهنا (I) عزم القصور الذاتى moment of inertia وعزم الحركة الزاوى كما صوره بوهر (عندما يتحرك جسيم m فى مدار نصف قطر r وبسرعة v ليعطى مقدار ثابت وهو nh/2π) ليأخذ الشكل m.v.r = k وبالاستبدال عن v بالسرعة الزاوية (w) فإن :

$$K = m (wr) r = Iw \qquad (3\text{-}5)$$

وبأخذ المعادلتين (3-2) ،(3-3) فإنه يمكن كتابة الطاقة T على هذا النحو :

$$T^2 = k^2 / 2I \qquad (3-6)$$

ولحل مسألة معادلة شرودنجر فى هذا الخصوص للجسيم، وبعد تطبيق الشروط الحدية واستخراج الحالات المأهولة وكمية الطاقة المصاحبة لتكون معادلة شرودنجرالسابقة على الصورة :

$$(- h^2/2m \quad T^2 = k^2 / 2I \bigtriangledown^2) \Psi = E\Psi \qquad (3-7)$$

لتكن :

$$- h^2/2m \quad (\eth^2/dx^2 + \eth^2/ \eth y^2) \ \Psi = E\Psi \qquad (3-8)$$

وهنا يجب أن نلاحظ من المعادلة (3-6) أن المؤثر الكمى لطاقة الحركة بالإحداثيات الكارتيزية بالمحور (x , y) ومن المفروض أن الجسيم فى حركة دائرية. وعليه فإن (x , y) لا تتغير لاستقلاله عن الإحداثيات الكارتيزية الكلية للمحاورالثلاثة للعلاقة :

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

وعليه لا يمكن فصل تلك المعادلة إلى متغيرين لمعادلتين كل معادلة تحتوى على متغير (x) أو (y).

ومن المعلوم بأن تلك الحركة فى مستوى واحد أفقى لوصف نظام معتمداً على r نصف قطر الدائرة، φ – زاوية المدار (الدوران) وحيث أن r – ثابتة ، إذا عملية الدوران ثابت لزاوية φ وعليه كان المتغير هو φ .

وفى هذه الحالة لنأخذ حدود عزم الحركة بالمؤثر العام فى الشكل: $- ih \ d/d\varphi$ (حيث φ – المتغير الذى يعتمد عليه عزم الحركة وعليه تكون :

$$k\hat{} = ih \ \ d/d\varphi \qquad (3-9)$$

وبالتعويض فى المعادلة (3-4) لنحصل على :

$$\hat{}/1 = - h^2/2I \quad d^2/d\varphi^2 \qquad (3-10)$$

وعليه يكون المقصود لمعادلة شرودنجر كما يلى باستخدام الإحداثيات القطبية :

$$- \hbar^2/2I \;\; \partial^2 \Psi / d\varphi^2 = E\Psi \qquad (3\text{-}11)$$

وبالتالى :

$$\partial^2 \Psi / d\varphi^2 = - 2I/- \hbar^2 \quad E\Psi \qquad (3\text{-}12)$$

وهذه المعادلة (3-10) يلاحظ مماثلتها مثلما سبق من معادلات فى الإحداثيات الكارتيزية، وهى أيضاً معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية. وبأخذ عمليات التفاضل مثلما ذكر سابقاً، وعليه نكتب الحل ولكن بصورة هندسية أو فى صورة أسية فى الشكل .

$$\Psi = A\sin \; L\varphi + B\cos \; L\varphi \qquad (3\text{-}13)$$

أو :

$$\Psi = Ae^{iL\varphi} + Be^{-iL\varphi} \qquad (3\text{-}13')$$

المعادلة('3-13) هى الأكثر تحقيقاً لهذا النظام. ولنبدأ بالحل فى الحد الأول (A) وليكن :

$$\Psi_+ = Ae^{iL\varphi} \qquad (3\text{-}14)$$

وبالتفاضل مرتين للمعادلة (3-12) لنحصل مع المتغير φ .

$$\partial^2\Psi_+ / d\varphi^2 = \partial^2/ \partial\varphi^2 \;\; Ae^{iL\varphi} \qquad (3\text{-}15)$$

$$= -L^2 Ae^{iL\varphi} = L^2 \Psi_+ \qquad (3\text{-}16)$$

ومن المعادلة (3-12) والمعادلة (٣- ١٦) ليكن الثابت :

$$L^2 = 2IE/\hbar^2 \qquad (3\text{-}17)$$

وهنا نلاحظ أن أيضاً L– كقيمة ثابتة لقيم متغيرة ومتاحة فى أة لحظة أى غير مكماة. وأن الطاقة E لا يمكن أن تؤخذ أى قيمة بدون أدنى حد. وهذا يعنى أيضاً بأنها طاقة مكماة .

ولنا أن نتصور أن Ψ_+ وحيث القيمة عند أى نقطة لمحيط الدائرة، ولو فرضنا أن الدالة Ψ_+ عند أول دورة $\Psi\varphi$ ، وبعد دورة ثابتة لتكن الدالة $\Psi\varphi$ على الصورة $\Psi_{(\varphi+2\pi)}$ وبعد عدة دورات فإن : $\Psi_{(\varphi+2\pi)}$ على العموم كل تلك الدورات ما هى إلا فى دورة واحدة وكلها متساوية : أى أن :

$$\Psi\varphi = \Psi_{(\varphi+2\pi)} \qquad (٣\text{-}١٨)$$

$$Ae^{iL\varphi} = Ae^{iL(\varphi+2)} = Ae^{iL(\varphi+m\pi)}$$

لأول حد : $= Ae^{iL\varphi} e^{2il}$

ولتحقيق شرط المعادلة (3-18) أن تكون بصفر لكل قيم L ولكى نجعل هذا لابد وأن نجعل قيم L هذا الحد مساوياً للواحد الصحيح. ولكى نتخيل هذا فإننا نتخيل هذا الوضع، لنا أن نستخدم العلاقة الهندسية الآتية :

$$e^{ix} = i\sin x + \cos x$$

وبالتطبيق لهذه العلاقة فإن العلاقة هى :

$$e^{2iL} = i\sin 2L + \cos 2L \qquad (3-19)$$

وعموماً قيم هذا الثابت (L) إما موجبة أو سالبة أو بصفر. وعليه فإن حا الزاوية سوف يتلاشى والحد الثانى متساوياً للوحدة، وهو المطلوب وعليه فإن القيم المطروحة لهذا الثابت L لتأخذ القيم... m: o,1,2,..

وبالتالى فإن الطاقة المصرح بها بناءاً على قيم الثابت للمقدار .

$$E = L^2 h^2/ 2I \pi \qquad (3-20)$$

أى أن :

$$L = 0 \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots\ldots\ldots\ldots$$

ولإيجاد قيمة الثابت (A) – ثابت المعايرة لتكمل الشكل العام لحالة الجسيم. وذلك بأخذ الصورة :

$$\int_0^{\pi} \Psi_+^2 \Psi \, d\varphi = 1 \qquad (3-21)$$

لكل الفراغ

وحدود هذا التكامل $0 \le \varphi \le 2$ وبالتعويض عن الدالة Ψ_+ :

$$L^2 \int_0^{2\pi} e^{il\varphi} \, e^{-il\varphi} \, d\varphi = 1$$

$$L^2 \int_0^{2\pi} e^{(il\varphi - il\varphi)} \, d\varphi = 1$$

$$L^2 \int^{2\pi} e^0 \, d\varphi = 1$$

$$L^2 \, [\,0\,]_0^{2\pi} = 1$$

$$L^2 \, 2\pi = 1$$

$$L = 1/\sqrt{2\pi} \qquad (3-22)$$

أى أن حركة الجسيم فى اتجاه عقرب الساعة وهة :

$$\Psi_+ = 1/\sqrt{2\pi}\ e^{il\varphi}\ ,\ L = 0, \pm1, \pm2, \ldots\ldots\ldots$$

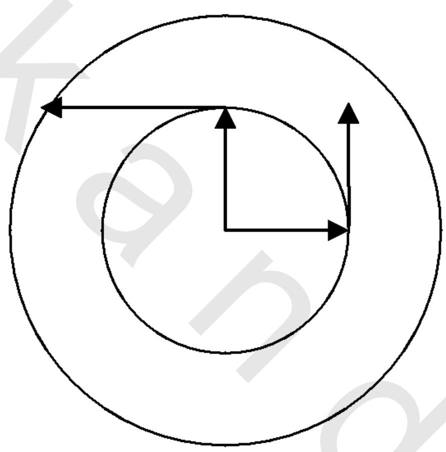
أى أن عـزم الحركـة الـزاوى فـى اتجـاه عقـارب الـساعة وهـذا مـا تم تحديـدة مـن الدالـة $\Psi+$ - بـنفس الـسبيل يكـن أخـذ العلاقـة لإيجـاد الثابت L فى الاتجاه المعاكس للدالة $\Psi-$ لتكون المعادلة :

$$\Psi_- = 1/\sqrt{2\pi}\ e^{il\varphi} \qquad (3\text{-}23)$$

ولنأخذ :

$$\overline{L}_z\,\Psi = L_2\,\Psi$$

وهنا نؤكد أن عزم الحركة الزاوى بالصورة L_z حيث الحركـة فى المستوى xy متلاشـى ويبقـى العـزم فـى المحـور L_z فقـط العمـودى، انظـر الشكل (٢) .



شكل (٢) يبين عزم الحركة الزاوى فى المحور z العمود على مستوى (zy).

فلتكن المعادلة :

$$- ih\ \ d/d\varphi\ \ (1/\sqrt{2\pi}\ e^{il\varphi}) = -ih.\ iL = 1/\sqrt{2\pi}\ e^{il\varphi} \qquad (3\text{-}24)$$
$$= L\hbar\Psi_+ \qquad (3\text{-}24')$$

أو على الصورة :

$$- ih\ \ d/d\varphi\ \ (1/\sqrt{2\pi}\ e^{-il\varphi}) = - ih.\ -iL\ \ 1/\sqrt{2\pi}\ e^{-il\varphi} \qquad (3\text{-}25)$$
$$= -m\hbar \qquad (3\text{-}25')$$

والقيمـة العدديـة لعـزم الحركـة Lh، حيـث L هـو رقـم كـم عـزم الحركـة Lz وهـى أيضاً قيمـة مكمـاة، وعليـه فـإن مقـدار Ψ_+ مـضاد للمقدار $\Psi-$ وعموماً كلتا الدالتين هما دالة مخبرة للمؤثر الكمى لعزم الحركـة. والمعادلـة (١٨- ٣) تـدل علـى الطاقـة لجميـع مـدارات الطاقـة

ثنائية أى متلاشية إحداهما موجب والآخر سالب doubly degenerate باستثناء عندما L = 0 . وهذا يعنى أن الجسيم يدور حول المركز فى أة اتجاه وبدون استثناء.

والطاقة المسموح بها لتلك الموجة التى تكرر نفسها بعد كل دورة كاملة. وإن الجسيم يأخذ قيمة مطلقة للاحتمالية $\Psi \quad \Psi^*$ فى دائرة مقدار ثابت ولا يعتمد على (φ)- زاوية الدوران .

$$\Psi^* \ \Psi = 1/\sqrt{2\pi}\ e^{il\varphi} \quad 1/\sqrt{2\pi}\ e^{-il\varphi} = 1/2\pi \qquad (3\text{-}26)$$

مثال :

من علاقة دى بروجلى بين كيف يمكن استئناف علاقات الطاقة المكماة ؟

الحل :

من الملاحظ أن محيط المدار ثابت = عدد صحيح فرض بوهر. وأن طول الموجة :

$$L = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots\ldots\ldots, 2\pi r = L\lambda$$

وطاقة الحركة التقليدية :

$$T = P^2 / 2\,L$$

وبالتعويض فى علاقة دى بروجلى $\lambda = h/P$ فإن :

$$T = h^2/2L\ \lambda^2$$

وبالتعويض عن λ –طول الموجة.

$$T = L^2\ h^2 / 8\pi^2 L r^2 = L^2 h^2 / 2I$$

ويلاحظ من المعادلة الناتجة تشابه ما سبق استنتاجه .

الدوران المشدود (معالجة شرودنجر) لكتلتين :

دوران الجزئيات المشدودة بصورة خطية في الفراغ يمكن أن تؤخذ كتقريب جيد في المحاور القطبية الكريه (Spherical) ولنفترض دوران لنظام يتكون من كتلتين كما في الشكل (3-1) والمسافة بينهما (r) ومركز المحاور هو (θ) وبالتالي فان المحاور الكارتيزيه هي:

$$x = r\ \sin\theta\ \cos\theta \qquad ٣(-\ ٢٧)$$

$$y = r\ \sin\theta\ \sin\phi \qquad ٣(-\ ٢٧)$$

$$z = r\ \cos\theta \qquad (٣-٢٧)$$

حيث θ – زاوية من المحور .

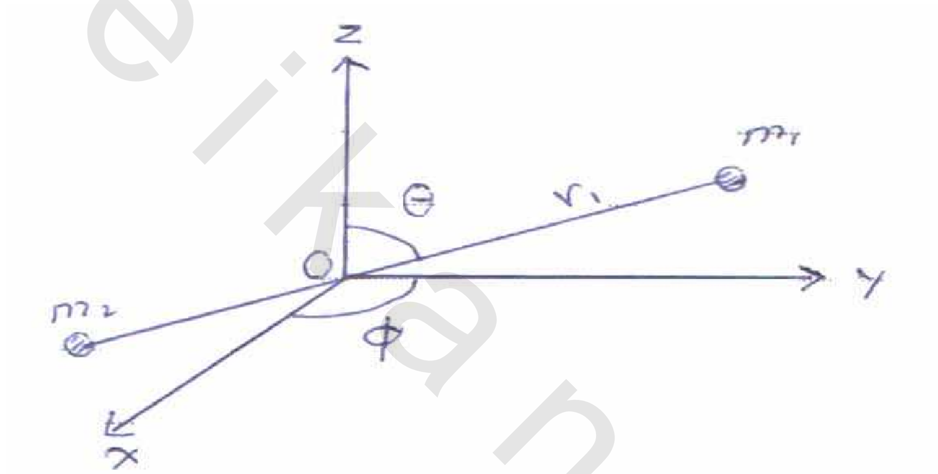
z – الموجب .

ϕ – زاوية الإسقاط للمسافة r علي السطح xy من المحور x – الموجب ، والقيم المسموحة للمتغيرات هي :

$$o \le r \le \infty \qquad (٣-٢٨)$$

$$o \le \theta \le \pi \qquad (٣-٢٨)$$

$$o \le \phi \le 2\pi \qquad (٣-٢٨)$$



شكل (3-2) النظام المحوري لدوران مشدود يتكون من كتلتين متصلتين بقوه علي مركز الكتلة

كما أن الطاقة الحركية للجسيم في المحاور الكارتيزيه هي :

$$T = \frac{1}{2}\ m\dot{v}^2 = \frac{1}{2}\ m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) \qquad (٣-٢٩)$$

حيث $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ مشتق الزمن للمحاور $\bar{z}$, $\bar{y}$, z

بالاستبدال المعادلة (1) في المعادلة (3-27) نجد أن :

$$T = \frac{1}{2} m\ (\dot{r}^2 + r^2\ \dot{\theta}^2 + r^2\ \dot{\phi}^2\ Sin^2\theta) \qquad (٣-٣٠)$$

من تعريف الدوار المشدود r– ثابتة لكل جسيم وبالتالي كل جسيم له طاقة حركية وهي :

$$T=\frac{1}{2}mr^2(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2 Sin^2\theta) \qquad (٣-٣١)$$

وأما بالنسبة لجسيمين ويكون التغير في θ وفي ϕ لكل جسيم واحدة .

$$T=\frac{1}{2}(m_1r_1^2+m_2r_2^2)(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2 Sin^2\theta) \qquad (٣-٣٢)$$

ويبن عزم القصور الذاتي مجموع الجسيمات علي النحو التالي :

$$I=\sum_i m_i r_i^2 \qquad (٣-٣٣)$$

والقصور الذاتي يمكن استبداله في الطاقة الكلاسيكية علي النحو :

$$T=\frac{1}{2}I(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2 Sin^2\theta) \qquad (٣-٣٤)$$

وما بين الأقواس هو التعبير عن السرعة الزاوية (W) وفي تمثيل شرودنجر لمسالة الدوار المشدود فإننا نحتاج الأبعاد الثلاثة (استقلالية – الزمن) وبالتالي يمكن كتابة معادلة شرودنجر كما يلي :

$$\nabla^2\psi+\frac{2m}{h^2}(E-V)\psi=Zero \qquad (٣-٣٥)$$

حيث ∇^2 معامل لابلاس وهو يساوي :

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{dx^2}+\frac{\partial^2}{dy^2}+\frac{\partial^2}{dz^2} \qquad (٣-٣٦)$$

وهو مختلف عن الأنظمة الإحداثية الاخري وتوجد طريقة نظامية أخري وتعرف بنظام باولنج وويلسون (Pauling & Wilson)

$$\nabla^2=\frac{1}{q_u q_v q_w}\left\{\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{q_v q_w}{q_u}.\frac{d}{\partial u}\right)+\frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{q_u q_w}{q_v}.\frac{\partial}{\partial v}\right)+\frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{q_u q_v}{q_w}.\frac{\partial}{\partial w}\right)\right\}$$

(٣-٣٧)

وباختيار الإحداثيات القطبية الكروية كإحداثيات أخري نحصل علي :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\partial}{rdr} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta \partial\theta}\frac{\partial}{}(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \ \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta \partial\phi^2}\frac{\partial^2}{}$$

(٣ -٣٨)

وإذا علم بان (r) ثابتة، مثلما سبق في الخيط المشدود :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin \ \theta}\frac{\partial}{\partial \ \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \qquad (٣ -٣٩)$$

بالاستبدال في المعادلة (9) مستخدمين تحديد قيمة القصور الذاتي نجد حل المعادلة :

$$\frac{1}{\sin \ \theta\partial\theta}\frac{\partial}{}(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial \ \theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{2I}{h^2}E\psi = 0 \qquad (٣ -٤٠)$$

ولحل المعادلة (٤٠- ٣) فإننا سوف نضع دالة الموجه $\psi(\theta \ ,\phi)$ كناتج لدالتين $F(\phi), T(\theta)$ تلك هو تعتبر دالة لأحداث واحد فقط (هذه محاولة لحل الإحداثيات المستقلة $\theta \ , \phi$) بالصورة

$$\psi(\theta,\phi) = T(\theta)F(\phi) \qquad (٣ -٤١)$$

وبالاستبدال في (٤٠- ٣) :

$$\frac{F(\phi)}{\sin \ \theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial\theta}) + \frac{T(\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 F(\phi)}{\partial\phi^2} + \frac{2IE}{h^2} T(\theta) F(\phi) = 0 \qquad (٣ -٤٢)$$

وبضرب المعادلة (16) بالمقدار $\sin^2\theta / FT$ نحصل علي :

$$\frac{\sin \ \theta\partial\theta}{T}\frac{}{\partial}(\sin\theta \frac{dt}{\partial \ \theta}) + \frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\phi^2} + (\frac{2L}{h^2}\sin^2\theta)E = 0$$

(٣ -٤٣)

وبالتعديل نجدها علي النحو :

$$\frac{\sin\theta}{T}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial t}{\partial\theta})+(\frac{2L}{h^2}\sin^2\theta)E=-\frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\phi^2}$$

(٤٤- ٣)

نلاحظ أن (٤٤- ٣) تعتمد فقط علي θ ومستقلة عن ϕ ويلاحظ التساوي بين الطرفين ويمكن وضع المعادلة (٤٤- ٣) إلي معادلتين مستقلتين علي النحو :

$$-\frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\phi^2}=M^2 \qquad (٤٥- ٣)$$

لتصبح علي النحو :

$$\frac{\sin\theta}{dt}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta})+\frac{2L}{h^2}E\sin^2\theta=M^2 \qquad (٤٦- ٣)$$

كما أن المعادلة (19) يسهل حلها علي النحو :

$$\frac{\partial^2 F(\phi)}{\partial\phi^2}=-M^2F(\phi) \qquad (٤٧- ٣)$$

ويكون الحل العام علي الصورة :

$$F(\phi)=N\,e^{\pm iM\phi} \qquad (٤٧- ٣)$$

حيث (N)- ثابت المعايرة normalized constant وبأخذ إشارة مستقلة وهي اختيارية سالبة فنستطيع تقييم N بفرض أن $F(\phi)$ تعادلت لاحظ استخدام FF^* حيث إنها متعامدة

$$1=\int_0^{2\pi} F^A F\,d\phi \qquad (٤٨- ٣)$$

$$=N^2\int_0^{2\pi} e^{im\phi}\,e^{-im\phi}\,d\phi=N^2\int_0^{2\pi} d\phi=2\pi N^2 \qquad (٤٨'- ٣)$$

$$N=\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \qquad (٤٩- ٣)$$

$$\therefore\ F=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{\pm iM\phi} \qquad (٥٠- ٣)$$

وبالتالي M– عدد الكم M يجب أن يكون عدد صحيح وبكتابة $F(\phi)$ في الشكل الحقيقي نجد أن :

$$F_r(\phi)=\frac{1}{2}\left[F_+(\phi)+F_-(\phi)\right]=\frac{N}{2}\left[e^{iM\phi}+e^{-iM\phi}\right] \qquad (٣-٥٠')$$

فبالنسبة لدالة الموجة يجب أن تكون مستمرة ووحيدة القيمة ويجب أن تكون القيمة $F_r(\phi)$ لها القيمة 2π وهذا يمكن حدوثه عندما تكون الإزاحة الزاوية لدالة جيب التمام تعتبر عدد مضروب للمقدار 2π وهذا يعني عندما M تصبح عدد صحيح .

كما أن المعادلة (٣-٤٦) يمكن كتابتها علي الصورة :

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta}\right)+\left(\frac{2IE}{h^2}\sin\theta\right)T-M^2T=0 \qquad (٣-٥١)$$

ولنأخذ الاختصار :

$$\beta=\frac{2IE}{h^2} \qquad (٣-٥٢)$$

وبالاستبدال وبالتسمية علي $Sin^2\theta$ لنحصل علي :

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta}\right)-\frac{M^2}{\sin^2\theta}T+\beta T=0 \qquad (٣-٥٣)$$

لتأخذ الاختصار :

$$Z=\cos\theta \qquad (٣-٥٤)$$

$$P(z)=T(\theta) \qquad (٣-٥٥)$$

نلاحظ أن P(z) هي نفس الدالة ، وعبرت لمتغير جديد إذا :

$$\sin\theta=1-Z^2 \qquad (٣-٥٦)$$

وأيضاً :

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{\partial z}{\partial\theta}\frac{d}{dz}=\sin\theta\frac{\partial}{dz} \qquad (٣-٥٧)$$

وباستبدال المعادلة (٥٧- ٣) والمعادلة (٥٦- ٣) في المعادلة (٥٣- ٣) ثم للتبسيط واخذ المعادلة (٥٣- ٣) لتعطي :

$$\frac{d}{dz}\left\{(1-Z^2)\frac{\partial R(z)}{dz}\right\}+\left\{\beta-\frac{M}{1-Z^2}\right\}P(z)=0 \qquad (٥٨- ٣)$$

وبوضع المقدار $(1\text{-}Z^2)$ في المقام لتصبح المعادلة (٥٨- ٣) لانهائية وتأخذ صفة التفرد عند قيمة Z للقيم ±١ وتكون $-\cos\theta$ جيب تمام الزاوية (±١) أو θ للمقدار $n\pi$ ودالة الموجه يجب أن تأخذ كل الفراغ. تعامل مع الصفر أو ما لانهاية. ولدراسة السلوك عند الحد (Z) للقيمة (-1) وعند (+1) ولندع :

$$x=1+Z \qquad (٥٩- ٣)$$

$$(1-Z^2)=x(1-x) \qquad (٦٠- ٣)$$

أو :

لاحظ أن x تؤول للصفر كلما Z تأخذ المقدار (-1) علاوة علي ذلك

$$P(x)=P(z) \qquad (٦١- ٣)$$

باستبدال المعادلة (٦١- ٣) في المعادلة (٥٩- ٣) لنحصل :

$$\frac{d}{dx}\left\{x(2-x)\frac{\partial R(x)}{dx}\right\}+\left\{\beta-\frac{M^2}{x(2-x)}\right\}R(x)=0 \qquad (٦٢- ٣)$$

والآن نحاول حل الدوال المجهولة، R(x) بواسطة الامتداد المتسلسل ولنأخذ السلسلة الاسيه علي النحو :

$$P(x)=\sum_{v=0}^{\infty} a_v x^v$$

a - معامل العدد للأسس للحد (x) وعلي أي حال في المعادلة (٦١- ٣) لو أن R(x) تأخذ التفرد $x = 0$,R(0) يجب أن تكون بصفر.

ولإيجاد عدد الكم (j)

$$J=V+|M| \qquad (٦٣- ٣)$$

لنأخذ :

$$\beta=J(J+1)=\frac{2JE}{h^2} \qquad (٦٤- ٣)$$

أو :

$$E_j = \frac{h^2}{2I}\ J(J+1)$$ (٦٤- ٣)

J- هي طاقة تتعلق بعدد الكم ومن المعادلة (٦٣- ٣) نجد أن القيم المسموحة للحد (J) هي (M)، (M+1)، (M+2) وهكذا والحل بالنسبة لـ(M) في الجزئية (J) تري أن : $-J \le M \le J$

ويوجد (2J+1) قيم مسموحة للحد (M) لأي قيمة للحد (J) والطاقة لا تعتمد علي M إذا كل مستوي E يمكن التعبير عنه بالحد (2J+1) وتعين الدالة $T(\theta)$.

$$T(\theta) = (1-Z^2)^{M/2} G(2)$$ (٦٦- ٣)

حدود وهمية .

جدول (١) يبين بعض الحدود متعددة الوهمية (المتعادلة للوحدة)

J	M	$T_{JM}(\theta)$
0	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$
1	0	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$
1	± 1	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$
2	0	$\frac{\sqrt{10}}{4}(3\cos^2\theta - 1)$
2	± 1	$\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta$
2	± 2	$\frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$
3	0	$\frac{3\sqrt{14}}{4}\left(\frac{5}{3}\cos^3\theta - \cos\theta\right)$
3	± 1	$\frac{\sqrt{42}}{8}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)$
3	± 2	$\frac{\sqrt{105}}{4}\sin^2\theta\cos\theta$
3	± 3	$\frac{\sqrt{70}}{8}\sin^3\theta$

* For normalization, remember that the integration variable is cos θ, not θ. The normalizing factor is

$$\left[\frac{2J+1}{2}\frac{(J-|M|)!}{(J+|M|)!}\right]^{1/2}$$

جدول (١) يبين بعض متعدد الحدود المصاحب الوهمية وبالتالي العزم الزاوي للجسم الدوار (L) الذي نعبر عنه كما يلي : $I = Iw$

كما أن الطاقة الحركية يمكن كتابتها علي النحو : $T=\frac{I^2}{2I}$

ومعادلة الزمن – المستقل لشرودنجر

$$\hat{H}\ \psi = H\psi \qquad (٣\ -٦٧)$$

لو أن ψ دالة موجه لدوار مشدود وبالتالي تكتب معادلة العزم الزاوي كما يلي :

$$\frac{I^2\psi}{2I}=\frac{h^2}{2I}J(J+1)\psi \qquad (٣\ -٦٨)$$

أو في الصورة :

$$\hat{L}^2\psi = h^2\ J(J+1)\psi \qquad (٣\ -٦٩)$$

وعليه فان دالة الموجه دالة ذاتية لمربع مجموع العزم الزاوي متخذا $J(J+1)h^2$ كقيمة ذاتية والحل لمسألة الجسم الدوار يعتبر حل عام لمسألة ميكانيكا الكم للعزم الزاوي والمعادلة (٦٩- ٣) تعتبر فعالة كلما نلاقي ميكانيكا العزم الزاوي .

$$\hat{L}_2 \ \to -ih\frac{\partial}{\partial\theta} \qquad (٣\ -٦٩)$$

وهذا يعتمد علي المحور ϕ. وبالتالي تعمل فقط علي الدالة $F\pm(\phi)$ المعادلة (٤٧- ٣) وبالإجراء علي $F(\phi)$ نجد أن :

$$\hat{L}_2\ \ F_+(\phi)\ = -ih\frac{\partial}{d\phi}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\Pi}}\ \ e^{iM\phi}$$

$$= hM\ \ \frac{1}{\sqrt{2\Pi}}\ \ e^{iM\phi} = MhF+(\phi) \qquad (٣\ -٧١)$$

كما أن المعادلة (47- ٣) وصف للجسم الدوار في بعدين (في السطح)

طيف الموجه الصغرى للجزيئات الخطية :

حدوث طيف الدوران للجزيئات الخطية المشدودة في مدي طيفي صغير. وقواعد الاختيار وربما يكون الانتقال نظريا. وقاعدة الاختيار الدوراني للامتصاص أو الانبعاث للإشعاع هو :

$$\Delta J = \pm 1 \qquad (٣ - ٤٨)$$

هذه القاعدة الاختيارية لا تظهر مباشرة في حل مسألة تمثيل شرودنجر ومع استبدال **I** بشكل أخر **J** وهو رقم كم للحركة الدورانية والآن نعتبر فرق الطاقة بين حالة مميزه بواسطة (**J**) والاخري بواسطة **J=J+1**

$$\Delta E = \frac{h^2}{2I}\left[\ J(J+1) - J(J+1)\ \right]$$

$$= \frac{h^2}{2I}\left[(J+1)(J+2) - J(J+1)\right]$$

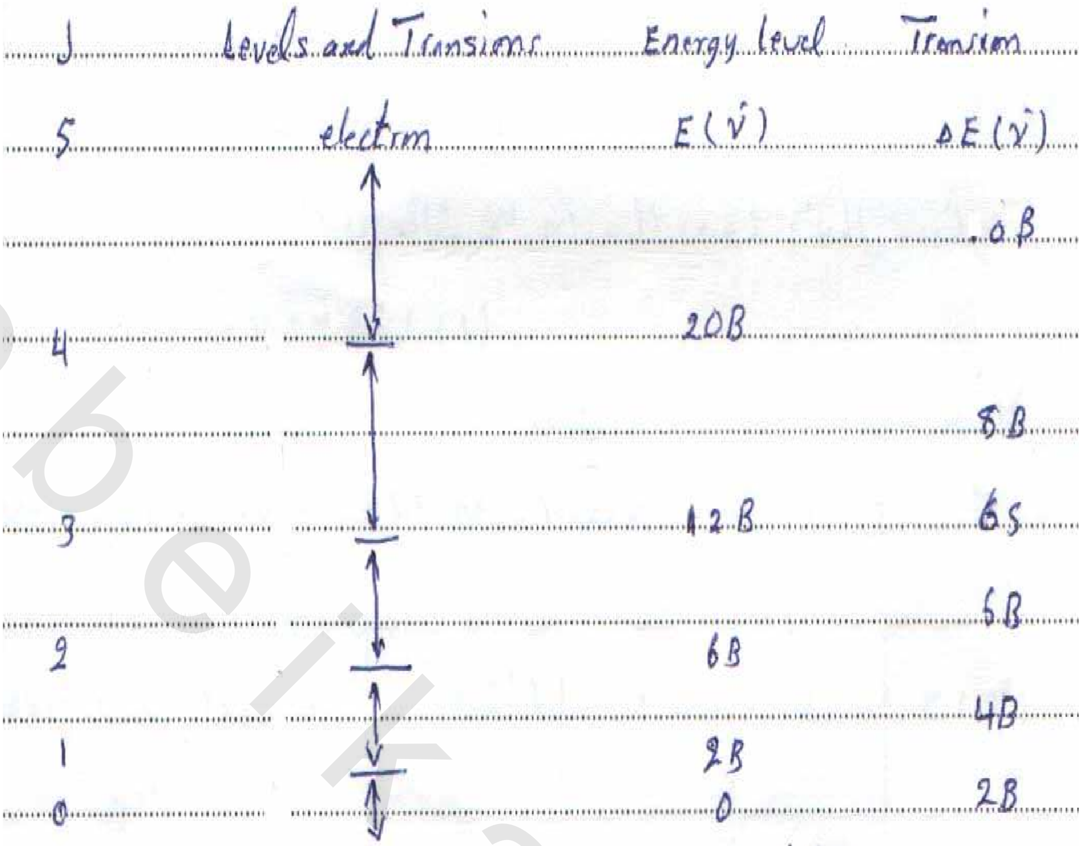
$$= 2\ \frac{h^2}{2I}(J+1) \qquad (٣ - ٧٢)$$

والانتقال عموما علي هيئة إعداد موجه علي النحو :

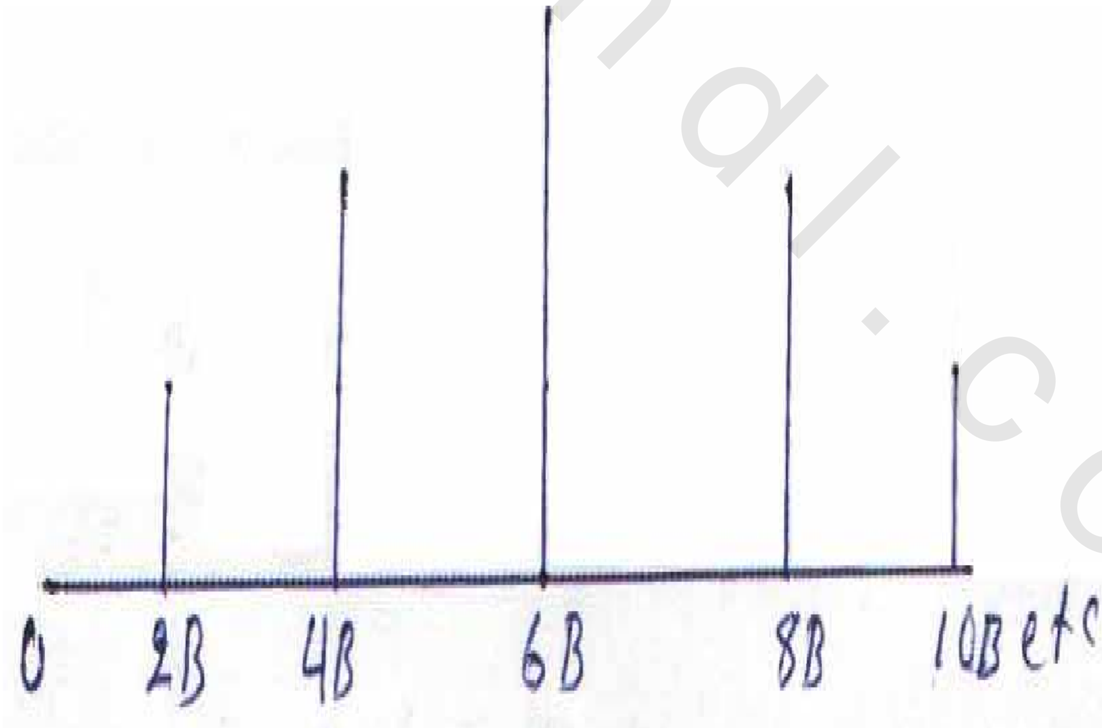
$$\acute{V} = 2B(J+1) \qquad (٣ - ٧٣)$$

حيث *β ثابت الدوران :* $B = \dfrac{h}{4\pi CI}$

والطاقة الكلية الفراغية التي يمكن أن تري في الطيف كما في الشكل (٧٣- ٣) يجب أن تكون سلسلة لخطوط متساوية في الفراغ



شكل (٢) تخطيطي يبين مستويات الطاقة والانتقالات للدوار المشدود



شكل (٣) تخطيطي لطيف الموجه الصغرى للدوار المشدود
والثابت B– ثابت الدوران وحداته سرعة الضوء Cm/S

وعموما طيف الدوران يعتمد علي مجموعة من قواعد الاختيارية وفي حالة طيف الدوران فان قواعد الاختيارية علي النحو التالي :

$$\Delta J = \pm 1$$

$$\Delta m = o, \pm 1 \qquad (٣ -٧٤)$$

والتعبير العام لطيف الدوران للجزيئات علي النحو:

$$\Delta v = 2B(J+1) \qquad (٣ -٧٣)$$

كما ذكر سابقا في المعادلة (٧٣- ٣) .

جدول (2) بيان طيف الموجه الصغرى لكلوريد الايدورجين

Origin of transion (J)	$\bar{v}(Cm^{-1})$	Δv	B	$r(\mathring{A})$ [(a)]
0	47.08			
1	82.19	41.11	20.56	929
2	123.15	40.96	20.46	931
3	164.00	40.85	20.46	932
4	204.62	40.62	20.31	935
5	244.93	40.31	20.16	938

a – الفصل بين الانوية: الفصل بينهما يصبح 2B

في الحقيقة الفراغ ليس تماما متساو وهذا يعود مبدئيا إلي تشويش الطرد المركزي بسبب الدوران. جدول (2) يسجل بيان طيف الموجه الصغرى لجزئ HF .

كما يبين الفصل بين الانوية من عزم القصور الذاتي لجزئ ثنائي الذرية علي النحو :

$$I = m_1 r_2 + m_2 r_2 \qquad (٧٥-\ ٣)$$

ولعديد الذرية :

$$I = \sum_i m_1 r_i$$

حيث r_i – المسافة بين الانوية لمركز الكتلة والمتطلب بالنسبة لجزئ ثنائي الذرية .

$$m_i |r_i| = m_2 |r_2| \qquad (٧٦-\ ٣)$$

ولعديد الذرية :

$$\sum m_i r_i = 0 \qquad (٧٧-\ ٣)$$

بالاستبدال للمعادلة (٧٧- ٣) في المعادلة (٧٥- ٣) لنحصل علي ثنائي الذرية:

$$\begin{aligned} I &= m_2 r_1 r_i + m_1 r_1 r_2 \\ &= r_1 r_2 (m_1 + m_2) \qquad (٧٨-\ ٣) \end{aligned}$$

ولكن مجموع مسافة الفصل البينية r – مساوية $(r_1 + r_2)$ إذا :

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 = m_2 (r - r_1)$$

أو :

$$r_1 = \frac{m_2 r}{m_2 + m_1} \qquad (٧٩-\ ٣)$$

$$r_2 = \frac{m_1 r}{m_1 + m_2} \qquad (٨٠-\ ٣)$$

وعليه :

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2$$

أو :

$$I = \mu r_2 \qquad (٨١-\ ٣)$$

حيث μ – الكتلة المختزلة إذا:

$$r = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = \sqrt{\frac{h}{4\pi CB,\mu}} \qquad (٣-٨٢)$$

وبتقييم الثابت نحصل علي (r) من وحدات الكتلة الذرية

$$r = 4.1059 \times 10^{-10} (BU)^{-\frac{1}{2}} m \qquad (٣-٨٤)$$

هذه الطريقة تستخدم مباشرة فقط للجزيئات ثنائية الذرية وأما بالنسبة للجزيئات الخطية المعقدة يمكن معالجتها بالاستبدال للقيم المتناظرة .

قواعد الاختيار Selection rules

نحن الآن في وضع لاستخدام نظرية المجموعة لاشتقاق قواعد الاختيار $\Delta J = \pm 1$ بالنسبة لتحليل موجات الطيف القصيرة للجزيئات الخطية. ولكي نلاحظ أي انبعاث مباشرة أو امتصاص لأشعة كهرومغناطيسية يجب من أن يكون ثنائي الاستقطاب متصلين بحالات الطاقة وعدم التلاشي ويعين (μ_{ji}) ثنائي الاستقطاب علي النحو التالي :

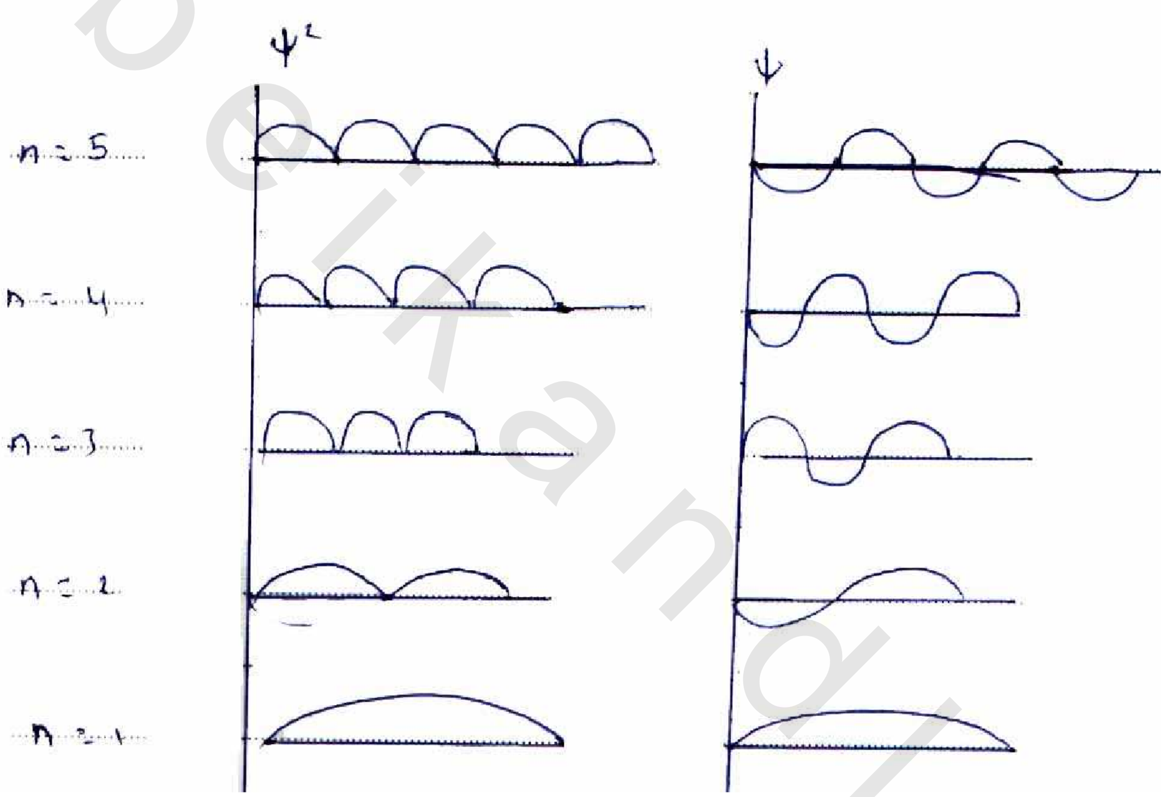
$$_{ji}\mu = \int \psi_j^a \bar{U} \psi_i \, dv \qquad (٣-٨٥)$$

ψ_i^a ، ψ_i دوال الموجه للحالة الابتدائية والنهائية، μ – عامل ثنائي الاستقطاب المألوف والتكامل علي كل ما في الفراغ (عامل المتجه، زمن الحمل، عامل المسافة).

ونحن نري في الحال، أن تقريبا في الدوار المتماسك للجزئي لو لم يوجد فصل (بمعني لا يوجد عزم استقطابي دائم) فيكون عزم الاستقطاب متلاشي. وتغير العزم الثنائي الاستقطابية بصورة مستمرة بسبب وجود خلل كهرومغناطيسي يؤثر علي المجال المغناطيسي للضوء الساقط، مما سيؤدي علي انتقال الجزئ من حالة إلي حالة أخري، وباستخدام الصورة لعزم انتقال الإلكترون لبعد واحد علي النحو التالي:

$$\mu_{ji} = \frac{2e}{L}\int x \sin\frac{i\pi x}{L} . \sin\frac{i\pi x}{L} . dx \qquad (٣ \; -٨٦)$$

والانتقال من i إلي j يكون في حالة ما إذا كان التكامل لا يساوي الصفر ولكن إذا عزم الاستقطاب $V_{ij} = O$ فان الانتقال للإلكترون غير مسموح ولا يمكن التحول ولنا أن نتعرف ما إذا كانت مساوية للصفر من عدمه بمجرد معرفة خصائص تماثل الدوال انظر الشكل (4) .



شكل (٤) مستويات الطاقة المسموح بها في الانتقال أو التحول

فالدوال برقم فردي لا تحتوي علي عقدة في المنتصف $x = L/2$ وهذه الدوال متماثلة حول $x = L/2$ والعكس للدوال الزوجية وبالتالي الدوال المميزة برقم (n) فردي كمي تعرف بالدوال زوجية (+) في حين الدوال الاخري تعرف بالدوال الفردية (-) ولكي يتم الانتقال الالكتروني يجب أن يكون بين حالات تماثلها مختلف من زوجي إلي فردي والعكس كما انه يجب أن يكون حاصل ضرب $\psi_i \; \psi_j$ فرديا حتى لا يتلاشي التكامل وان يحقق الشرط حتى يتم الانتقال بمعني.

Δn = عدد فردي

***