# 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 ونواه. والإلكترون (e-) والنواةze– حيث z– العدد الذري وطاقة الجهد ما هي إلا دالة فقط لمسافة الفصل للإلكترون والنواة .

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\xi_o r} \quad or \quad = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (٥ \ -١)$$

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

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2\mu} \quad \overline{V}^2 - \frac{Ze^2}{r} \qquad (٥ \ -٢)$$

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

$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E + \frac{Ze^2}{4\pi\xi_o r})\psi = O \qquad (٥ \ -٣)$$

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

يتحـرك الإلكـترون. وباسـتخدام كتلـة الإلكـترون سـوف يـدخل خطـأ نسبي حوالي 0.5% في الطاقة .

**فصل المتغيرات :**

**والحل لمعادلة شرودنجر هو :**

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{Ze^2}{r})\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi) \qquad (٥-٤)$$

وكمـا ذكرنـا سـابقا وذلـك بوضـع معامـل لابـلاس في محـاور قطبيـة دائرية واستبدالها في المعادلة (٤- ٥) :

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{dr}(r^2\frac{d\psi}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta})+$$

$$\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi 2})+\frac{2\mu}{h^2}[(E-V)(r)]\psi=O \qquad (٥ \ -٥)$$

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 .

بالاسـتبدال في المعادلـة (٤- ٥) ثـم بعـد ذلـك بالقـسمة علـي RTF لتعطي المقدار :

$$\frac{1}{R}\frac{d}{r^2dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{1}{T}\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{dT}{d\theta})+\frac{1}{F}$$

$$(\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2F}{d\phi^2})+\frac{2\mu}{h^2}[(E-V)(r)]=O \qquad (٥ \ -٦)$$

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

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{\partial}{dr}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{\sin\theta}{T}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta})+\frac{1}{F}$$
$$\frac{\partial^2 F}{\partial\phi^2}+\frac{2\mu r^2\sin^2\theta}{h^2}[(E-V)(r)]=O \qquad (٥-٧)$$

وتستطيع فصل $\phi-$ عن غيره من المتغيرات حيث انه غير مستقل :

$$-\frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\phi^2}=\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{\partial}{\partial\theta}((r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{\sin\theta}{T}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta})+$$
$$\frac{2\mu r^2\sin^2\theta}{h^2}[(E-V)(r)] \qquad (٥-٨)$$

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

$$\frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\phi^2}=-m \qquad (٥-٩)$$

وبالاستبدال في المعادلة (٦- ٤) لنحصل :

$$\frac{1}{R}\left[\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})\right]+\frac{1}{T}\left[\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta})\right]-$$
$$\frac{m^2}{r^2\sin^2\theta}+\frac{2\mu}{h^2}[(E-V)(r)]=0 \qquad (٥-١٠)$$

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

$$\frac{1}{R}\left[\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})\right]+\frac{2\mu r^2}{h^2}[E-V(r)]=$$
$$\frac{m^2}{\sin^2\theta}-\frac{1}{T}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta})\right] \qquad (٥-١١)$$

تلاحظ من المعادلة (١١-٥) أن الطرف الأيسر يعتمد علي (r) ولا يعتمد علي $\theta$ . بينما العكس لطرف الجانب الأيمن. وعموما المعادلة (١١- ٥) يمكن استخدامها لكل قيم المتغيرات فقط لو كلا الجانبين

متساويا الثابت ولنأخذ الثابت $\beta$ . ونحن هنا الآن سوف نفصل المتغيرات كاملا إلي ثلاثة معادلات كل واحد معتمد علي متغير.

معادلتي $\phi,\theta$ التوافق الدائري Spherical harmonics والمعادلات الثلاثة المحلولة يمكن كتابتهم :

$$\frac{\partial^2 F(\phi)}{d\phi} = -m^2 F(\phi) \qquad (٥ -١٢)$$

$$\frac{1}{Sin\theta}\left[\frac{d}{d\theta}\left\{\left[Sin\theta \frac{dT(\theta)}{\partial(\theta)}\right]\right\} - \frac{m^2}{Sin^2\theta} T(\theta) + \beta T(\theta)\right] = 0 \qquad (٥ -١٣)$$

$$\frac{1}{r2}\frac{d}{dr}\left[r^2 \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2U}{h^2}[E - V(r)]R(r)\right] - \frac{\beta}{r^2}R(r) \qquad (٥ -١٤)$$

والمعادلتين (١٢- ٥) و(١٣- ٥) في مسألة الدوار المشدود والحل هو ذاته بالتمام، فيما عدا تطلب مفضلا ذلك :

$$\beta = L(L+1) \qquad (٥ -١٥)$$

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

والناتج للدوال الزاوية :

$$T_{lm}(\theta)\, F_m(\phi) = Y_{Lm}(\theta, \phi) \qquad (٥ -١٦)$$

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

المعادلة (r) –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 $\beta$ وأشكال الدالة للحد $V(r)$ للمعادلة (١٤- ٥) لنحصل علي :

$$\frac{1}{r^2}\left(\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left[-\frac{L(L+1)}{r^2}+\frac{2\mu}{h^2}\left(E+\frac{Ee^2}{r}\right)\right]R=O \qquad (١٧-٥)$$

ولتجنب مشكلة الثوابت وللتبسيط لنأخذ الشكل للمعادلة كما هو أن:

$$\alpha^2=-\frac{2UE}{h^2} \qquad (١٨-٥)$$

$$\lambda=\frac{UZe^2}{h^2\alpha} \qquad (١٩-٥)$$

$$P=2\alpha r \qquad (٢٠-٥)$$

$$S(P)=R(r) \qquad (٢١-٥)$$

وبذلك تصبح المعادلة (١٧- ٥) علي النحو :

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left[\rho^2\frac{ds(\rho)}{\partial\rho}+\left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho}\right)\right]S(\rho)=O \qquad (٢٢-٥)$$

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

obeikandi.com

$$\frac{2}{\rho}\frac{dS}{d\rho}+\frac{d^2S}{d\rho^2}+\left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho})\right]S=O \qquad (٥\ -٢٣)$$

وعنـد ρ بقيمـة مناسـبة وكـل الأجـزاء مـع ρ في المقـام نـصبح مهملـة لتعطي :

$$\frac{d^2S}{d\rho^2}\cong\frac{1}{4}S \qquad (Rarger) \qquad (٥\ -٢٤)$$

والحل إذا: $$S(\rho)=e^{\pm\rho/2} \qquad (Larger) \qquad (٥\ -٢٥)$$

وتعـني (+) لـلأس تكـون لا نهائيـة كلمـا (ρ) تقـترب مـن لا نهايـة وبالتالي دالة الموجه تظل متناهية علي الأمكنة وهذا يعتبر غير مقبول أو بالتالي (- ) الأس هو الاختيار والسلوك المتقارب للحد S(ρ) لكبر (ρ) إذا يكـون $e^{-\rho/z}$ علـي كـل المنطقـة أو المـدي للحـد (ρ) ونحـن نفـترض أن S(ρ) يأخذ الشكل:

$$S(\rho)=\rho(\rho)e^{-\rho/Z} \qquad (٥\ -٢٦)$$

وتكـون الخطـوة التاليـة لمفكـوك P(ρ) كـسلـسلة لمفكـوك في p بـدون التـدخل في التفاصـيل. وهـذا يـؤدي إلـي علاقـة لـشكل بـاولنج وويلسون Pauling and Wilson .

$$a_{v+1}=\frac{-(\lambda-l-1-v)}{2(v+1)(l+1)+v(v+1)}a_v \qquad (٥\ -٢٧)$$

عنـد v– كـبيرة تبـدأ المعـاملات تتـصرف كالمعـاملات في تمـدد السلسلة بالنـسبة للحـد $e^{\rho}$ وبالنـسبة للحـد ρ– كـبيرة فيكـون النـاتج لا نهائي

$$e\ e^{-\rho/Z}=e^{\rho/Z} \qquad (٥\ -٢٨)$$

وبالتـالي السلـسلة المتولـدة بواسـطة المعادلـة (٢٧- ٥) يجـب أن تنتهـي بعـد عـدد نهـائي للأجـزاء لتجعـل دالـة الموجـه محـدودة. مـرة أخـري مـع السلسلة الممتدة الـسابقة. يمكـن أن تختـار هـذا بواسـطة المتطلبـات لـذلك

البسط في المعادلة (٢٧- ٥) ليكون مساويا للصفر لبعض قيم التردد (v). ونهاية المعادلة (٢٧- ٥) عند الحد vth يتطلب أن :

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

حيث أن كلا من v & l إعدادا. $\lambda$ أيضا عدد والتي تعرف (n).

والحل بالنسبة للحد (l) في جزئية (n) هو

$$O \le L \le n - 1 \qquad (٥ -٣٠)$$

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

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

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

أو الحل بالنسبة ( $\alpha$ )

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

ولكن بتربيع ( $\alpha$ ) كما عينا جزئية الطاقة بواسطة المعادلة ١٨- ٥ نجد :

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

والحل بالنسبة للطاقة E نحصل علي :

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

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

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



o b e i k a n d i . c o m

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

والجزء القطري لدالة الموجه الهيدروجينيه تأخذ الشكل:

$$R_{nL}(r)=\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n-1)!]^3}\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\right\}^{1/2} e^{-\rho/2} L_{n+1}^{2l+1} \qquad (٣٦- ٥)$$

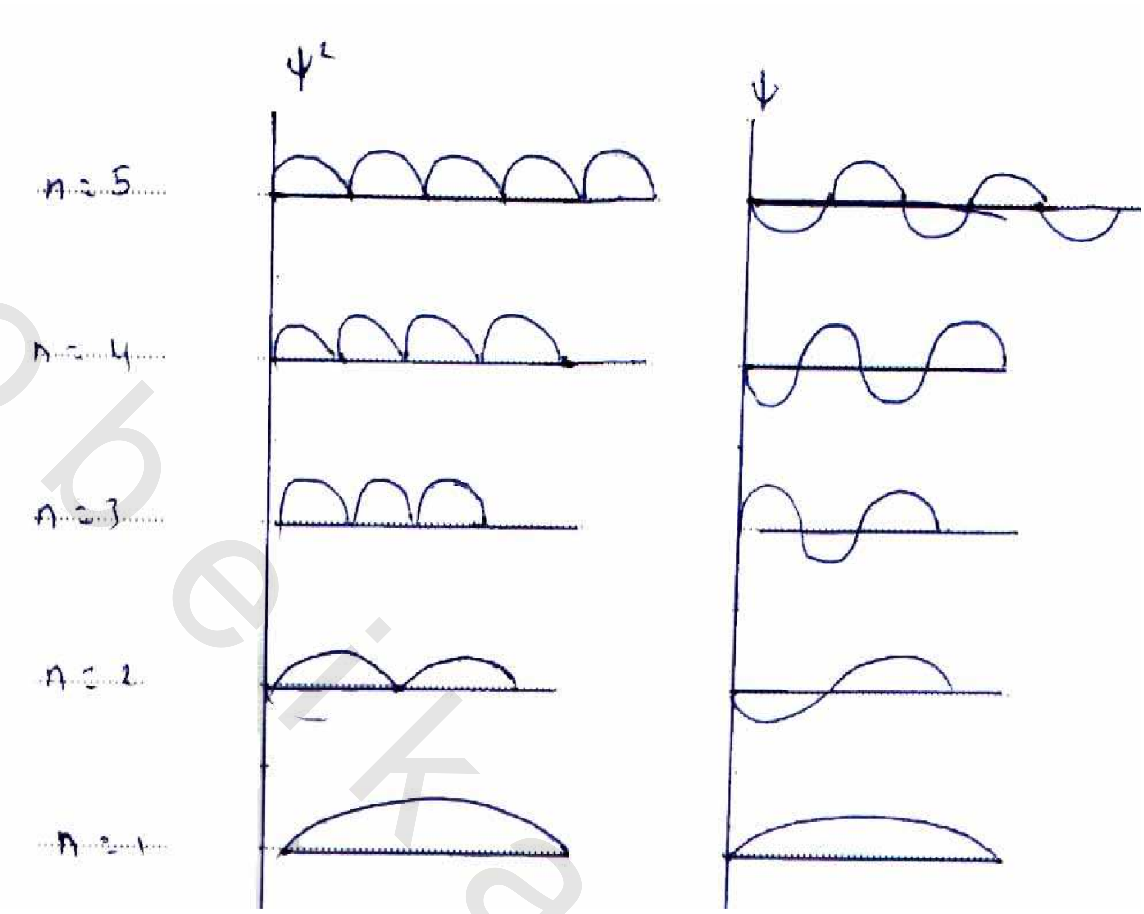
حيث الأقواس تعتبر معاملات معايره، $a_o$ – نصف قطر بوهر لاحظ أن هذه المعادلة تعتمد علي إعداد الكم (n, l) ويعتقد أيضا الطاقة علي (n) بعض الدوال القطرية سجلت في الجدول (١- ٥) وعديد من تلك الدوال القطرية مرسومة في الشكل (١- ٥) حيث نرسم الحد $R_{n,1}(r), R_{n,1}^2(r)$ وكذلك $4\pi r^2 R_{n,1}^2(r)$ .

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

* $a_0$ is the Bohr radius and $\rho$ is $2\mu Ze^2 r/nh^2$

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




***شكل (١) سلوك نصف قطر الدالة موجه الهيدروجين $R_{el}(r)$***

***الكثافة الالكترونية $R^2_{el}(r)$ ودالة توزيع النصف قطرية*** $4\pi r^2 R^2_{n,1}(r)$

وهنا يوجد ملاحظتين مهمتين يمكن وضعهما أو الأخذ بهما في الجدول (١- ٥) والأشكال (١- ٥) .

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

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

obeikandi.com

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 m, n, l 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 :

$$E_{nl} = -\frac{me^4}{2h}\frac{1}{n_2} \qquad (٥ \ -٣٦)$$

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

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

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

وأما ما تبقي 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 l= بالصفر بمعني.......$m = 0, \pm l, \pm(l-1), \pm(l-2),$

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 توجهيه :**

احسب طاقة الإلكترون عند المسافة 52.9 Pm إذا علم أن ثابت العزل الكهربي في الفراغ $8854\times10^{-12}\ J^{-1}Cm^{-12}C^{2}$ والشحنة الالكترونية $1602\times10^{-19}C$

**الحل**

من القانون لطاقة الوضع :

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

أو :

$$V = \frac{-e^2}{4\Pi\xi_o r}$$

وبالتعويض :

$$= \frac{(-1.602\times10^{-19})^2 C^2}{4\times3.14\times8.854\times10^{-12} J^{-1} C^2 m^{-1}\times 5.29\times10^{-12} m}$$

$$= 4.3625\times10^{-18} J$$

حيث C– ثابت كولوم

ويعبر عنها بالصورة المولارية فتكون طاقة الوضع علي النحو :

$$= 2628.40625 kJ/mol$$

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 $Y_{10} = \sqrt{3/4\pi}\cos\theta$ دالة مؤثرة ومميزة للمؤثر $A^2$ (مستخدما المعادلة الآتية):

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

**الحل**

من الملاحظ من المعادلة المأخوذة أن الحد الثاني من الطرف الأيمن مساويا للصفر وهو أن $\theta-$ ثابتة للمتغير $\phi$ إذا:

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



obeikandl.com

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

فإن :

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

$$= -2\left(\frac{3}{4\times 3.14}\right)^{3/2} \times \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta \times \cos\theta)$$

$$= -2Y_{10}$$

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 إلي S فان $\Delta l = \pm 1$ تساوي صفر فهذا غير مسموح .

B- نجد أن $\Delta l$ مسموح وهذا بسبب $\Delta l = \pm 1$ أما من (P) إلي الحد أو من (S) إلي (P) .

C- غير مسموح لأي $\Delta l = 2$ فعملية الارتحال غير ممكنة حيث لا يحدث قفر لمدارين في لحظة واحدة .

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

**الحل**

باستخدام المعادلة :

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

$$= \frac{4}{(53)^3} (53)^2 \, e^{\frac{-2\times 53}{53}} \times (2pm)^3$$

$$= \frac{4}{(53)^3} (53)^2 \times (2)^3 \, e^{\frac{-2\times 53}{53}}$$

$$= \frac{4\times 8}{(53)} e^{-2} = -\ 05045 - 2 =$$

$$= -\ 25045 = ont : lin$$

$$-\quad 25045 = \ 0081716$$

**إذا فكيف يتم التوزيع المحتمل لوجود إلكترون في مدار ما ؟**

بناءا علي ما سبق، من الأمثلة، ومن التفسيرات، نجد أن الدالة R(r) كدالة قطرية معتمد علي المسافة (r) ما بين النواة والإلكترون ومربع تلك الدالة. فان (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 انه عندما طاقة الوضع تؤول إلي (∞) فان r في هذه الحالة مساوية للصفر. انظر القانون $-e\ ^2\!/_2$ ولو أخذنا الفلك أو المدار انظر الجدول .

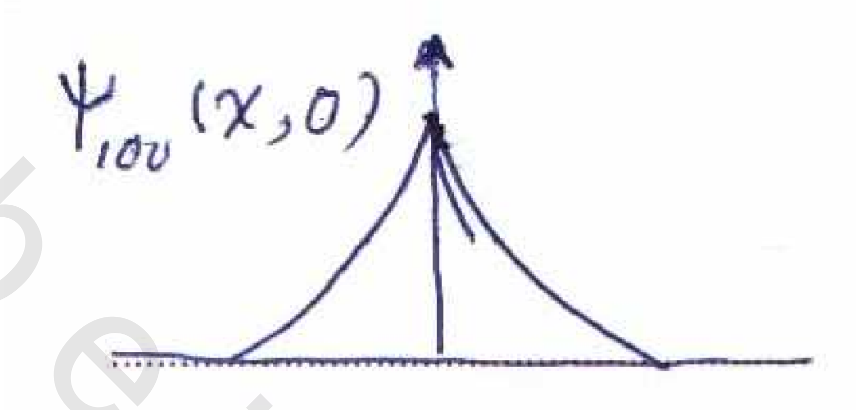
$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_o}\right)^{3/2} e^{-L/L0} \qquad (٣٨- \ ٥)$$

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

وبالتالي نعوض عن قيم (X) وترسم الدالة علي هذا الأساس ونلاحظ من الرسم أن الميل المماس للدالة يأخذ الموجب والسالب من اليسار واليمين علي 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 انجرافا من الإلكترون إلي النواة ولكن مثلما تنبأت وجود احتمالية لوجود الإلكترون بعيدا 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 أيضا عزم الحركة في المدار مساويا للصفر لأنه دائري وليس في إحداثيات. وإنما تمثل هذه الحركة بأنها حركة تشبه بندول الساعة حول المركز وعلي طول القطر مارا بالمركز. وكلما كان الانحناء أكثر شدة وهي المنطقة الأكثر احتمالا لوجود الإلكترون وتكون له طاقة حركة عالية.

**ثالثاً**: إذا علم أن R(r) دالة مغايرة فإنها تحقق الشرط للفرض الثالث واحد للتكامل .

$$\int_{0}^{\infty} \left[R(r)^2\right] r^2\, dr = 1 \qquad (٥-٣٩)$$

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

$$R^2(r)\, r^2\, dr \qquad (٥\ -٤٠)$$

**رابعاً:** لو حاولنا أن نعين موضع الإلكترون علي جميع المحاور للدوال $\theta,\phi$ وفي مكان مابين (r) ، (r + dr) فان المتغير للدوار $\theta,\phi$ سيأخذ فيما بين $O, \pi$ , $O, 2\pi$ 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:

$$\int \psi^2\, d\tau = \int R^2(r)\, Y^2(\theta,\phi)\, r^2\, Sin\theta\, dr d\theta \partial\phi \qquad (٥\ -٤١)$$

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

$$= R^2(r)\, r^2\, dr \int_0^{2\Pi} \int_0^{\Pi} Y^2(\theta,\phi)\, Sin\theta\, d\theta d\phi \qquad (٥\ -٤٢)$$

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 :

$$= R^2(r)^2\ dr \qquad (٥\ -٤٣)$$

وتعرف radial distuibution بالتوزيع القطري :



obeikandi.com

**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 IS نجد أن:

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

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

$$\int_1^1 l^2 \ e^{-2l} \, dl = e^{-2l} \int_0^1 \left[ \frac{l^2}{2} - \frac{2l}{4} - \frac{2}{8} \right]$$

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

$$= \ 00338338$$

**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 :

$$\psi_{15} = \frac{1}{\sqrt{n}}\left(\frac{1}{l_o}\right)^{3/2} e^{-l/l_o}\, r\, d\tau$$

الموضع :

$$(r) = \frac{1}{\pi l_o^3}\int_0^\infty e^{-l/l_o}\, l\, 4\pi l^2 dl = \frac{4}{a_o^3}\int_0^\infty l^3 e^{-2l/l_o}\, dh$$

وبالتكامل نحصل علي :

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

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 :

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

وهكذا .

* * *

obeikandl.com