كلية العلوم

القسم : **الفيزياء**

السنة : **الثانية**

المادة : فيزياء كمومية

المحاضرة :السادسة /نظري/د.أصف يوسف

{{ مكتبة A to Z }}

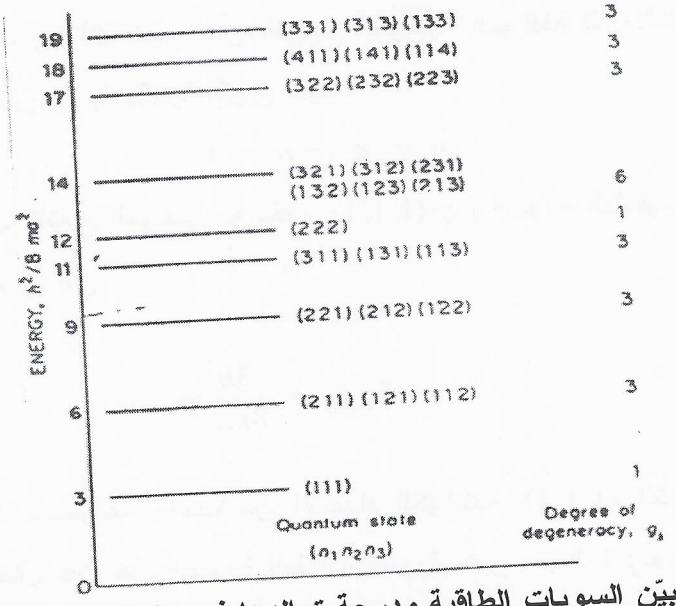
Facebook Group : مكتبة A to Z

كلية العلوم ، كلية الصيدلة ، الهندسة التقنية

٢٠٢٥

١٣

يمكنكم طلب المحاضرات برسالة نصية (SMS) أو عبر(What's app-Telegram)على الرقم 0931497960



الشكل (4): يبيّن السويات الطاقية ودرجة توالدها في حفرة كمون ثلاثية الأبعاد.

7-3- الهزاز التوافقي البسيط:

إن الحركة التوافقية تحدث عندما تهتز جملة ما حول وضع التوازن. يمكن أن تكون الجملة جسماً يتعلق بنابض أو يطفو على سطح الماء أو جزيء ثنائي الذرة أو ذرة في شبكة بلورية. ويشترط لحدوث الحركة التوافقية نشوء قوة مرجعة تعيد الجسم إلى وضع التوازن عندما يختل هذا التوازن، لكن عطالة الجملة المعتبرة تجعلها تتجاوز وضع التوازن وهكذا تهتز الجملة دون حد إذا لم تكن هناك طاقة مبددة.

في الحركة التوافقية البسيطة تتناسب القوة المرجعة طرداً مع الإزاحة (x) عن وضع توازن الجملة أي:

$$F = -Kx = -m\omega^2 x \qquad (70)$$

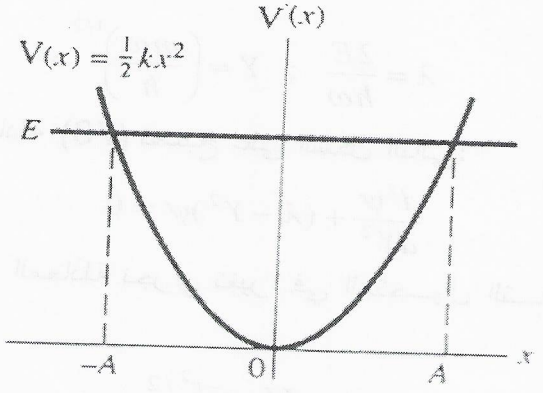
تدعى هذه العلاقة بعلاقة هوك.

إن الطاقة الكامنة للهزاز التوافقي البسيط تُعطى بالعلاقة التالية:

$$V(x) = -\int_0^x F.dx = -\int_0^x -m\omega^2 x\, dx$$

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad (71)$$

وهي موضحة على الشكل (5).



الشكل (5): الطاقة الكامنة للهزاز التوافقي البسيط.

من الناحية الكلاسيكية طاقة الهزاز التوافقي البسيط ثابتة وتتعين بقيمتها في لحظة ما، إذا كانت (E) طاقة الهزاز فإن الجسم يهتز بين الموضعين A و (-A) حيث ترتبط E و A بالعلاقة التالية:

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \qquad (72)$$

ومن أجل دراسة الحركة الكوانتية نكتب معادلة شودينغر الموافقة التالية:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi = 0 \qquad (73)$$

ومن معرفتنا الكوانتية يمكن توقع التعديلات التالية على الوصف الكلاسيكي:

a- لن يكون الطيف مستمراً وإنما متقطعاً.

b- لن تكون الطاقة الدنيا $E=0$ وإنما قيمة صغرى محددة $E=E_0$.

c- ثمة احتمال في نفوذ الجسيم عبر البئر الكموني والذهاب إلى أبعد من $\pm A$.

ومن أجل التحقق من صحة هذه التوقعات ما علينا سوى المضي قدماً في حل معادلة شرودينغر السابقة الذكر.

لنضع:

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}\quad;\quad Y=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x \tag{74}$$

وبالتالي فإن المعادلة (73) تصبح على الشكل التالي:

$$\frac{d^2\psi}{dY^2}+(\lambda-Y^2)\psi=0 \tag{75}$$

لحل هذه المعادلة نجري تغيراً في المتحول التابعي ψ مُعطى بالعلاقة التالية:

$$\psi=H_n e^{-r^2/2} \tag{76}$$

حيث إن (H_n) تابع يجب تعيينه بحيث يتم رفض كل أشكال (H_n) التي تجعل التابع ψ لا يسعى إلى الصفر عندما تسعى (Y) إلى اللانهاية.

بتعويض (76) في (75) نجد أن (H_n) يجب أن يحقق المعادلة التالية:

$$\frac{d^2H_n}{dY^2}-2Y\frac{dH_n}{dY}+(\lambda-1)H_n=0 \tag{77}$$

نبحث عن حل لهذه المعادلة على شكل كثير حدود، ولذلك نضع:

$$H_n=\sum_{k=0}^{\infty}A_kY^k \tag{78}$$

وبتعويض هذه العبارة لـ (H_n) في المعادلة (77) نجد ما يلي:

$$\sum_{k=2}^{\infty}k(k-1)A_kY^{K-2}-\sum_{k=0}^{\infty}2kA_kY^K+(\lambda-1)\sum_{k=0}^{\infty}A_kY^K=0 \tag{79}$$

الآن بإجراء تغير مناسب في دليل المجموع الأول [تستبدل k بـــ $(k+2)$] وذلك بهدف تعيين مثل القوة y^N نجد ما يلي:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\{(k+1)(k+2)A_{k+2}-(2k-\lambda+1)A_k\}Y^k=0 \qquad (80)$$

لكي يكون $H_n(Y)$ حلاً للمعادلة (77) يجب أن تتحقق المعادلة (80) مطابقة في (Y)، أي يجب أن تنعدم أمثال (Y^k) كافة وعليه نجد التالي:

$$(k+1)(k+2)A_{k+2}-(2k-\lambda+1)A_k=0$$

وبالتالي فإن A_{k+2} تساوي إلى:

$$A_{k+2}=\frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}A_k \qquad (81)$$

حيث أن $k=1,2,3,.....$

نرى من هذه العلاقة أن A_0 و A_1 كيفيان، وأن أمثال الحدود الزوجية تعطى جميعها بدلالة A_0، في حين تعطى أمثال الحدود الفردية جميعها بدلالة A_1. لكن قد تؤدي العلاقة التدرجية (81) إلى سلسلة غير منتهية إذا لم يمكن قطعها عند حد معين، وبعبارة ثانية إذا لم تنعدم الصورة $(2k+1-\lambda)$ في الطرف الأيمن للعلاقة التدرجية من أجل قيمة ما لـــ k ولتكن (n) مثلاً، فإن السلسلة لا تنتهي. إذن لكي تؤدي العلاقة (81) بالنتيجة إلى كثير حدود منتهٍ يجب أن يكون:

$$\lambda=2n+1 \qquad (82)$$

حيث n عدد صحيح موجب. وبهذا تصبح علاقة التدرج (81) بالشكل التالي:

$$A_{k+2}=\frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)}A_k \qquad (83)$$

الآن بالعودة للعلاقة (74) التي تعرف (λ) نجد أن قيم (E)

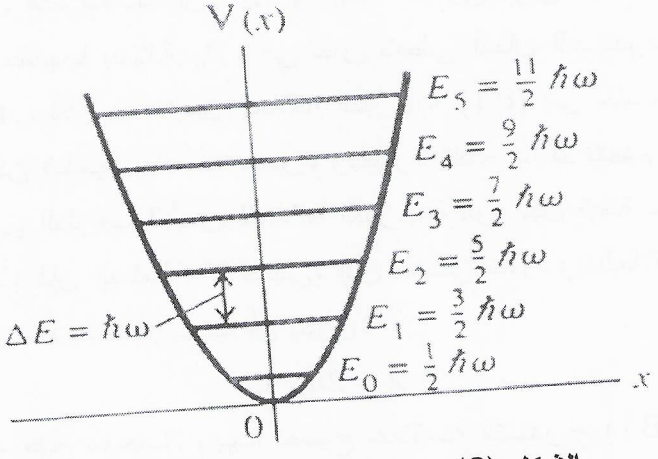
المسموح بها هي:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots\ldots \tag{84}$$

إذن طاقة الهزاز التوافقي مكممة، وتفصل بين كل سوية وأخرى قفزة قدرها $(\hbar\omega)$ أو $(h\upsilon)$. عندما تكون $(n=0)$ تكون الطاقة الدنيا التي يأخذها الهزاز مساوية إلى:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

وتسمى هذه الطاقة أيضاً طاقة الدرجة صفر، وذلك لأنه عندما يتوازن الهزاز التوافقي مع محيطه فإن طاقته تقترب من القيمة $(E = E_0)$ (وليس من القيمة $E = 0$ عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق). يبيّن الشكل (6) سويات طاقة الهزاز التوافقي.



الشكل (6): سويات طاقة الهزاز التوافقي.

إن العلاقة (84) والتي هي عبارة عن سويات الطاقة تعتبر من أهم العبارات في الميكانيك الكوانتي وهي تبرر تفسير بلانك لإشعاع الجسم الأسود، هذا

التفسير الذي يعدُّ بلانك بموجبه المادة مجموعة من الهزازات التوافقية يمتص أو يصدر كل منها كماً (كوانتوم) من الطاقة يتناسب مع تواتره ($\Delta E = h\upsilon$). العبارة (84) أيضاً تحدد مقدار التبادل في الطاقة بين الإشعاع والمادة بوحدات من ($h\upsilon$) وهي ليست سوى فرضية بلانك.

8- المعالجة الكوانتية لذرة الهيدروجين:

8-1- معادلة شرودينغر لذرة الهيدروجين:

تعدُّ ذرة الهيدروجين أبسط الذرات وأكثرها انتشاراً في الطبيعة، وتتكون ذرة الهيدروجين كما سبق ودلت عليه التحقيقات التجريبية من جسيم سالب الشحنة هو الإلكترون وشحنته الكهربائية ($-e$)، وجسيم موجب الشحنة هو البروتون وشحنته الكهربائية ($+e$) ويشكل النواة، يتحرك الإلكترون حول البروتون (النواة) تحت تأثير التفاعل الكهروستاتيكي بين الجسيمين. وتتركز كتلة الذرة فى البروتون (في النواة) إذ أن كتلة الإلكترون لا تعادل سوى جزءاً من 1836 من كتلة البروتون.

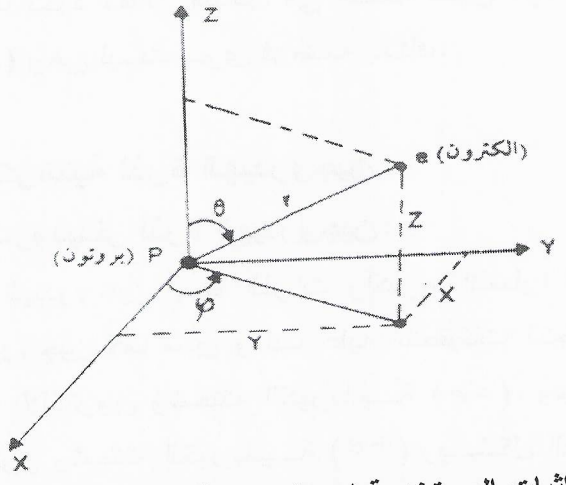
ونظراً للفارق الكبير في الكتلة بين البروتون والإلكترون يمكن اعتبار البروتون ساكناً في حين يتحرك الإلكترون بجواره ولا يمكنه الهرب لتعرضه الدائم لمجال كهربائى جاذب.

وفى الحسابات الدقيقة ينبغي اعتبار كتلة الإلكترون مساوية لكتلته المختصرة (المخفضة) μ، فإذا رمزنا بـ (m) لكتلة الإلكترون و بـ (M) لكتلة البروتون كانت عندها الكتلة المختصرة للإلكترون هي:

$$\mu = \frac{m\,M}{m+M} \qquad (85)$$

ويتحرك الإلكترون في الفراغ ويحدد وضعه بدلالة ثلاثية قائمة ومباشرة ينطبق مبدؤها على مركز كتل الذرة (مركز البروتون المعتبر

ساكناً) بثلاثة إحداثيات (x,y,z)، انظر الشكل (7).



الشكل (7): الإحداثيات المستخدمة لوصف حركة الإلكترون في ذرة الهيدروجين.

ومعادلة شرودينغر للإلكترون في الأبعاد الثلاثة هي:

$$\frac{\partial^2\psi}{dx^2}+\frac{\partial^2\psi}{dy^2}+\frac{\partial^2\psi}{dz^2}+\frac{2\mu}{\hbar}(E-V)\,\psi(x,y,z)=0 \qquad (86)$$

وتكتب أيضاً على الشكل التالي:

$$\nabla^2\psi(x,y,z)+\frac{2\mu}{\hbar}(E-V)\,\psi(x,y,z)=0 \qquad (87)$$

حيث ترمز ψ إلى التابع الموجي، ∇^2 مؤثر لابلاس، $\nabla^2\psi$ يمثل مجموع التفاضلات الجزئية من المرتبة الثانية للتابع ψ بدلالة $(x.y,z)$، و E هي الطاقة الكلية للإلكترون و μ كتلته المختصرة، h ثابت بلانك و V الطاقة الكامنة للإلكترون، وتعطى بالعلاقة التالية:

$$V(r)=-K\frac{Z\,e^2}{r} \qquad (88)$$

حيث $(K = 1/4\pi\varepsilon_0)$، ε_0 عامل النفوذية للخلاء، r هو البعد بين الإلكترون والنواة، واستخدمت شحنة النواة (Ze) ليمكن تطبيق النتائج على الذرات الهيدروجينية. والطاقة الكامنة (V) تابعة للبعد (r)، ويمكن تقدير r بدلالة الإحداثيات $(x.y,z)$ بالعلاقة التالية.

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \qquad (89)$$

وتصبح معادلة شرودينغر السابقة على الشكل التالى:

$$\nabla^2\psi(x,y,z) + \frac{2\mu}{\hbar}(E + K\frac{Z\,e^2}{r})\,\psi(x,y,z) = 0 \qquad (90)$$

إن الطريقة المستخدمة في حل هذه المعادلة التفاضلية الجزئية هى طريقة فصل المتحولات حيث يمكن عند فصلها تحويلها إلى ثلاث معادلات تفاضلية عادية في متحول واحد فقط. لكن يتضح من معادلة (88) ومعادلة (89) أنه لا يمكن فصل هذه المعادلة فى صورتها الحالية وذلك لأنه لا يمكن فصل الطاقة الكامنة لثلاثة حدود يعتمد كل حد منها على متغير واحد. وتستخدم لذلك الإحداثيات القطبية (الكروية) (φ,θ,r) والتي يوضح الشكل (7) العلاقة بينها وبين الإحداثيات الديكارتية على الصورة التالية:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \qquad (91)$$

ويُعطى مؤثر لابلاس في الإحداثيات القطبية بالعلاقة التالية:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi} \qquad (92)$$

يتضح من العلاقة السابقة أن تحويل معادلة شرودينغر للإحداثيات القطبية الكروية يؤدي لتعقيد المعادلة لأن مؤثر لابلاس يأخذ صورة أبسط في حالة الإحداثيات الديكارتية، ولكن عملية التحويل هذه ضرورية من أجل فصل متحولات المعادلة. وتصبح معادلة شرودينغر الموجية في الإحداثيات القطبية وبعد ضرب حدود المعادلة بـ r^2 على الشكل التالي:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+ \\ \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E+K\frac{Z e^2}{r}\right)\psi=0 \qquad (93)$$

حيث ψ تابع لـ r و θ و φ أي $\psi(r,\theta,\varphi)$

سوف نفترض أنه يمكن وضع حل هذه المعادلة على صورة حاصل ضرب ثلاثة توابع موجية، التابع الأول لـ r فقط، والثاني لـ θ فقط والثالث لـ φ فقط أي أن:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi) \qquad (94)$$

والتي سوف نكتبها لتسهيل كتابة الرموز على الصورة الآتية:

$$\psi=R.\Theta.\Phi \qquad (95)$$

وبتفاضل هذه المعادلة (تعتبر θ و φ ثوابت عند التفاضل بالنسبة لـ r وهكذا...) يمكن الحصول على المعادلات الاتية:

$$\frac{\partial\psi}{\partial r}=\Theta\,\Phi\,\frac{\partial R}{\partial r} \\ \frac{\partial\psi}{\partial\theta}=R\,\Phi\,\frac{\partial\Theta}{\partial\theta} \qquad (96) \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}=R\,\Theta\,\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}$$

الآن بتبديل المعادلات في العلاقة (96) في المعادلة (93) والقسمة على $(R.\Theta.\Phi)$ يمكن الحصول على:

$$\boxed{\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{\Theta\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}+\frac{1}{(\sin^2\theta)\Phi}\cdot\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}\right)+ \\ \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E+K\frac{Z e^2}{r}\right)\psi=0} \qquad (97)$$

يُلاحظ من هذه المعادلة أنه يمكن فصل المتحول φ عن بقية المتحولات

بضرب المعادلة بـ $\sin^2\theta$ حيث تتحول بعد ترتيب الحدود للشكل التالي:

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{\sin\theta}{\Theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{2\mu r^2\sin^2\theta}{\hbar^2}\left(E+K\frac{Z e^2}{r}\right)\psi=-\frac{1}{\Phi}\cdot\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} \quad (98)$$

يعتمد الطرف الأيمن للمعادلة على (φ) فقط بينما يعتمد الطرف الأيسر على كل من r و θ ولا يعتمد على φ. ولتحقيق هذه المعادلة لجميع قيم المتحولات يجب أن يساوي الطرفان ثابت عام سوف يُرمز له وكما جرت العادة في الميكانيك الكوانتي (الكمي) بالرمز (m_l^2) ولذلك يمكن فصل المعادلة لمعادلتين تعتمد إحداها على (φ) فقط هي:

$$\frac{1}{\Phi}\cdot\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}=-m_l^2 \quad (99)$$

ويمكن حل هذه المعادلة بسهولة للحصول على:

$$\Phi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i m_l\varphi} \quad (100)$$

حيث $\left(1/\sqrt{2\pi}\right)$ ثابت تنظيم التابع و $m_l=0,\pm1,\pm2,\pm3,.....$. ويعرف العدد m_l بالعدد الكوانتي المغناطيسي.

وعند التعويض من المعادلة (99) في المعادلة (98) والقسمة على $\sin^2\theta$ يمكن الحصول على:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E+K\frac{Z e^2}{r}\right)=\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}-\frac{1}{\Theta\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) \quad (101)$$

يعتمد الطرف الأيمن من هذه المعادلة على θ فقط بينما يعتمد الطرف الأيسر على r فقط، وكما في الحالة السابقة فإن قيمة الطرفين يجب أن تساوي مقداراً ثابتاً نرمز له بالرمز β، ويمكن بالتالي كتابة المعادلتين التالتين:

$$\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}-\frac{1}{\Theta\sin\theta}.\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)=\beta \qquad (102)$$

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E+K\frac{Z e^2}{r}\right)=\beta \qquad (103)$$

ويمكن كتابة المعادلة (102) على الشكل التالي:

$$\left[\frac{1}{\Theta\sin\theta}.\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta=-\beta\,\Theta \qquad (104)$$

هذه المعادلة يمكن حلها ضمن الشروط الحدية فقط – حسب الميكانيك الكوانتي – عندما يكون الثابت هو:

$$\beta=l(l+1) \qquad (105)$$

ويكون $l=0,1,2,.....$ وكذلك $(m_l=-1,-l+1,.....,l-1,l)$ حيث يعرف l بالعدد الكوانتي المداري ويحدد مقدار كمية الحركة الزاوية للإلكترون. وتصبح المعادلة (104) على الشكل التالي:

$$\left[\frac{-1}{\sin\theta}.\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_{l,m_l}=l(l+1)\,\Theta_{l,m_l} \qquad (106)$$

ويكون حل هذه المعادلة والذي يعطي التوابع الموجية التي تعتمد على الزاوية θ على صورة توابع لوجاندر المرافقة وهي توابع لـ $\cos\theta$ فقط، وتكتب عادة على صورة $P_l^{m_l}(\cos\theta)$، ويكون الحل بالتالي على الشكل التالي:

$$\Theta_{l,m_l}(\theta)=BP_l^{m_l}(\cos\theta) \qquad (107)$$

حيث B ثابت يعتمد على الأعداد الكوانتية l و m ويستخدم لتنظيم التابع.

أما المعادلة (103) والتي تعتمد على r فقط وتعرف التابع النصف القطري، فإنها يمكن عند استخدام العلاقة (105) أن تكتب على الشكل التالي:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]-K\frac{Z e^2}{r}\right\}R(r)=E.R(r) \qquad (108)$$

ويكتب التابع النصف قطري عادة على الشكل $R_{El}(r)$ أو $R_{nl}(r)$ لبيان أنها تعتمد على الطاقة وبالتالي على العدد الكوانتي الرئيس (n)، وتعتمد أيضاً على العدد الكمي المداري ولكنها لا تعتمد على العدد الكمي المغناطيسي. ولكننا سوف نهمل الرمز l و n لتسهيل كتابة المعادلات. ويمكن تبسيط هذه المعادلة باستخدام التعويض التالي:

$$R_l(r) = r\,R(r) \tag{109}$$

وبالتالي تصبح المعادلة (108) على الشكل التالي:

$$\frac{d^2R_l}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V_e]\,R_l(r) = 0 \tag{110}$$

حيث أن $V_e(r)$ تساوي:

$$V_e(r) = -K\frac{Z\,e^2}{r} + \frac{l(l+1)\,\hbar^2}{2\mu\,r^2} \tag{111}$$

ويعرف هذا الجهد بالجهد الفعَّال ويتكون من جهد كولون المعروف وجهد آخر (الحد الثاني) تكون القوة الناتجة عنه معاكسة لقوة كولون الكهربائية (لاحظ أن إشارة الجزئين مختلفة) وبالتالي فإن الجهد طارد عن المركز ويشكل حاجزاً أمام الإلكترون ويمنعه من الوصول للبروتون. والمعادلة (110) عبارة عن معادلة شرودينغر الموجية لجسيم كتلته (μ) ويتحرك تحت تأثير الجهد الفعَّال. إن حل هذه المعادلة يحتاج لمعالجة مطولة نسبياً، ولكن وجد أنه يمكن حل هذه المعادلة ضمن الشروط الحدية في حال ذرة الهيدروجين (أي ارتباط الإلكترون بالبروتون حيث تكون الطاقة سالبة أي عندما تكون $E<0$) فقط عندما يكون:

$$E_n = -\frac{\mu}{2n^2}\left(\frac{KZe^2}{\hbar}\right)^2 \tag{112}$$

حيث n هو العدد الكوانتي الرئيسي أي أن: $n = 1, 2, 3, 4, \ldots\ldots$.

يلاحظ أن علاقة الطاقة هذه هي نفس التي حصل عليها العالم بور

في نموذجه، ويكون حل المعادلة النصف قطرية والذي يحقق الشروط المفروضة على التابع الموجي هو من الشكل التالي.

$$R_{nl}(r) \approx e^{-\frac{Z r}{a_0 n}} \qquad (113)$$

حيث a_0 نصف قطر ذرة الهيدروجين في الحالة الأرضية.

والتابع الموجي المميز الكلي لذرة الهيدروجين هو:

$$\psi_{n l m_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}.\Theta_{lm}.\Phi_m(\varphi) \qquad (114)$$

إن هذا التابع الموجي يمثل مداراً من مدارات إلكترون ذرة الهيدروجين. ولذا فإن كل مدار يتعين بأعداد كوانتية تميزه. ويتحدد شكل المدار عادة بالعدد الكوانتي للعزم الزاوي (l) ولذا يرمز للمدارات ذوات قيم (l) المختلفة برموز معينة كما يلي:

$l=$	0	1	2	3	4	.....
رمز المدار	s	p	d	f	g	.....

ويكتب العدد (n) عادة قبل الحرف المميز للمدار.

من أجل الطبقة الإلكترونية الأولى يكون $(n=1)$ ويأخذ (l) فقط القيمة $l=0$، ويرمز للمدار بالرمز $(1s)$ حيث يمثل (1) قيمة العدد الكوانتي الرئيس ويمثل (s) شكل المدار الذي يكون في تابعه الموجي $l=0$. ومن أجل $(n=2)$ فإن العدد الكوانتي للعزم الزاوي يأخذ القيمتين $l=0$ و $l=1$ الأمر الذي يدل على وجود مدارين $2s$ و $2p$ على الترتيب. وفي حالة $(n=3)$ توجد ثلاث مدارات وهي $3s$ و $3p$ و $3d$ والمقابلة للقيم $l=0$ و $l=1$ و $l=2$ على الترتيب. وأخيراً ففي الطبقة الإلكترونية الرابعة حيث $(n=4)$ توجد أربعة مدارات وهي $4s$ و $4p$ و $4d$ و $4f$.

8-2- سبين الإلكترون:

إن النظرية الكوانتية اللانسبية ورغم نجاحها بصورة عامة في تفسير الأطياف الذرية إلا أن هناك بعض الظواهر الذرية التي لم تستطع تفسيرها. فلقد بيَّنت التجارب أن بعض الخطوط الطيفية هي عبارة عن خطين منفصلين بفارق طول موجة صغير جداً، ويطلق على هذا التركيب عادة اسم التركيب الدقيق، ولقد بيَّن جود سميت والونبيك (Goud Smit and Uhlenbeck) عام 1925 أنه يمكن تفسير هذا التركيب وبعض الظواهر الذرية الأخرى (مثل ظاهرة زيمان) بالإفتراض أن للإلكترون عزماً زاوياً ذاتياً أو سبين ناتج عن لف أو غزل الإلكترون حول نفسه بالإضافة لكمية الحركة المدارية والناتجة عن دوران الإلكترون حول النواة. ولقد برهن ديراك عام 1928 في معالجته الكمية النسبية وجود سبين الإلكترون نظرياً وبصورة مطابقة للإفتراض السابق. ويعطى مقدار سبين الإلكترون بعلاقة مشابهة للعلاقة التي تعطي كمية الحركة الزاوية $(L=\sqrt{l(l+1)}\hbar)$، أي على الشكل التالي:

$$S=\sqrt{s(s+1)}\hbar \qquad (115)$$

حيث s هو العدد الكوانتي السبيني وله قيمة واحدة فقط هي $(s=1/2)$، ويكون:

$$S=\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \qquad (116)$$

أما مركبة السبين باتجاه المحور (z) فهي:

$$S_z=m_s\hbar \qquad (117)$$

حيث m_s هو العدد الكوانتي المغناطيسي المغزلي،ويكون عدد قيم m_s هو $(2S+1=2)$ أي توجد قيمتان للعدد m_s هما $m_s=\pm(1/2)$، ويوجد بالتالي حالتان لسبين الإلكترون، ويكون:

$$S_z=\pm\frac{1}{2}\hbar \qquad (118)$$

مسائل محلولة:

مثـــال (1):

أثبت أن كثافة الإحتمال تكون دائماً كمية حقيقية موجبة.

الحـــل:

يمكن كتابة التابع الموجي العقدي على الشكل التالي:

$$\psi = \psi_1 + i\psi_2$$

حيث ψ_1 و ψ_2 توابع حقيقية، ويعرف ψ_1 بالجزء الحقيقي من التابع الموجي ψ بينما يعرف ψ_2 بالجزء العقدي من التابع الموجي ψ.

ويكون المرافق المركب للتابع الموجي ψ هو:

$$\psi^* = \psi_1 - i\psi_2$$

وبالتالي تكون كثافة الاحتمال:

$$P = \psi^*\psi = (\psi_1 - i\psi_2)\,(\psi_1 + i\psi_2) = \psi_1^2 + \psi_2^2$$

وهذه هي كمية حقيقية موجبة.

مثـــال (2):

اكتب معادلة شرودينغر لجسيم يتحرك تحت تأثير قوة شبه مرنة $F = -K\,x$ حيث K هو عامل التناسب.

الحـــل:

لكتابة معادلة شرودينغر لا بد أولاً من معرفة الطاقة الكامنة للجسيم المدروس، وهي تُعطى بالعلاقة التالية:

$$V(x) = -\int_0^x F\,dx = \frac{1}{2}K\,x^2$$

وبتبديل العلاقة السابقة في معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن فنجد ما يلي:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E-\frac{1}{2}K\,x^2\right)\psi=0$$

وهي معادلة شرودنغر للجسيم تحت الشروط السابقة.

مثـــال (3)

اكتب معادلة شروديغر لإلكترون يتحرك فـــي الحقـــل الكهربـــائي المتولد بفعل النواة التي تحتوي على (Z) بروتون.

الحـــل:

شحنة النواة تساوي إلى Ze. الطاقة الكهراكدة الكامنة V تُحـــسب كما يلي:

$$V=-\frac{Z\,e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

ومنه فإن معادلة شرودينغر تُعطى بالعلاقة التالية:

$$\nabla^2\psi+\frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E+\frac{Z\,e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi=0$$

مثـــال (4):

أثبت أن معادلة شرودينغر هي معادلة خطية فـــي التـــابع المـــوجي $\psi(r,t)$.

الحـــل:

لنفرض أن التابع الموجي $\psi_1(r,t)$ والتابع الموجي $\psi_2(r,t)$ همـــا حلان يحققان معادلة شرودينغر عند نفس قيمة الطاقة الكامنة $V(r)$، ويكون بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1(r,t)+V(r)\psi_1(r,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(r,t) \qquad (a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2(r,t)+V(r)\psi_2(r,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2(r,t) \qquad (b)$$

ولكي تكون معادلة شرودينغر خطية في التابع الموجي $\psi(r,t)$، فيجب أن يكون التابع الموجي:

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$$

حيث C_1 و C_2 ثوابت اختيارية، هو أيضاً حل يحقق نفس المعادلة.

وبالتعويض في معادلة شرودينغر من المعادلة الأخيرة نحصل على ما يلي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(C_1\psi_1+C_2\psi_2)+V(r)(C_1\psi_1+C_2\psi_2)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(C_1\psi_1+C_2\psi_2)$$

ويمكن كتابة هذه المعادلة على الشكل التالي:

$$C_1\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1+V\psi_1-i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\right]+$$

$$C_2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2+V\psi_2-i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}\right]=0$$

ويمكن تحقيق هذه المعادلة لجميع القيم الإختيارية للثابتين C_1 و C_2 وذلك لأن المقدارين الموجودين بين الأقواس المربعة تساوي الصفر (حسب المعادلتين a و b السابقتي الذكر)، ولذلك فإن معادلة شرودينغر خطية في التابع الموجي $\psi(r,t)$.

مثال (5):

عيّن طاقة الحالة الأرضية والحالة المثارة (المحرضة) الأولى في الحالتين التاليتين:

1- إلكترون يتحرك في بعد واحد داخل صندوق طوله $(10A^o)$.

2- كرة كتلتها $(1g)$ تتحرك داخل صندوق في بعد واحد طوله $(10cm)$.

الحـــل:

إن طاقة الجسيم في هذه الحالة تُعطى بالعلاقة التالية:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\, m\, a^2}$$

حيث a هو طول الصندوق.

في حالة الإلكترون، فإن:

$$\hbar = 1{,}05.10^{-34}\, J.s,\ a = 10 A^o = 10^{-9}\, m,\ m_e = 9{,}11.10^{-31}\, kg$$

وبالتالي فإن علاقة الطاقة E_n تصبح معطية بالعلاقة التالية:

$$E_n = \frac{(3{,}14)^2.(1{,}05.10^{-34})^2}{2.9{,}11.10^{-31}(10^{-9})^2} n^2 = 5{,}97.10^{-20} n^2 J$$

$$\Rightarrow E_n = 0{,}373\, n^2\ eV$$

في الحالة الأرضية يكون لدينا $(n=1)$ وبالتالي فإن:

$$(E_1 = 0{,}373\ eV)$$

في الحالة المثالة الأولى يكون لدينا $(n=2)$ وبالتالي فإن:

$$(E_1 = 1{,}49\ eV)$$

وفي حالة الكرة فإن:

$$a = 10\ cm = 0{,}1\ m \quad ; \quad m = 10^{-3}\, kg$$

ويكون بالتالي:

$$E_n = \frac{(3{,}14)^2.(1{,}05.10^{-34})^2}{2.10^{-3}(0{,}1)^2} n^2 = 5{,}44.10^{-63} n^2 J$$

$$\Rightarrow E_n = 3{,}4.10^{-44}\ n^2\ eV$$

في الحالة الأرضية يكون لدينا $(n=1)$ والطاقة:

$$(E_1 = 3{,}4.10^{-44}\ eV)$$

في الحالة المثالة الأولى يكون لدينا $(n=2)$ والطاقة:

$$(E_1 = 1{,}36.10^{-43}\ eV)$$

ومقدار الطاقة في حالة الكرة صغيرة جداً ولا يمكن قياسها ويمكن اعتبار أنها تساوي الصفر، ويمكن التأكد من ذلك بحساب سرعة الكرة حيث يكون:

$$v=\frac{P}{m}=\frac{\sqrt{2mE}}{m}=\frac{(2.10^{-3}.5,44.10^{-63})^{1/2}}{10^{-3}}$$
$$=\frac{\sqrt{10,88.10^{-33}}}{10^{-3}}=3,3.10^{-30}\,m/s$$

وهذه السرعة غاية في الصغر ولا يمكن تمييزها عن حالة السكون. ويختلف الوضع عن حالة الإلكترون حيث تكون الطاقة والسرعة كبيرة نسبياً، ولا يمكن إهمالها كما في حالة الكرة.

مثـــال (6):

ادرس السوية الطبيعية للطاقة في ذرة الهيدروجين محدداً علاقة الطاقة ودارساً تغير الكثافة الإلكترونية بتغير (r) بعده عن مركز الذرة (النواة). وكذلك تغير الكثافة الإلكترونية الإحتمالية القطرية بتغير بعده (r) عن مركز الذرة (النواة).

الحـــل:

بالنسبة لذرة الهيدروجين يتحرك الإلكترون ذو الشحنة $(-e)$ حول النواة $(+e)$، وإذا كانت المسافة بينهما (r)، فإن الطاقة الكامنة للإلكترون تُعطى بالعلاقة التالية:

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

وبالتالي فإن معادلة شرودينغر الموجية تُعطى بالشكل التالي:

$$\nabla^2\psi+\frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E+\frac{e^2}{r}\right)\psi=0$$

حيث يرمز μ إلى الكتلة المختزلة لجملة الإلكترون والنواة. إن μ لا

تختلف كثيراً عن كتلة الإلكترون m، ويفضل استعمالها في الحسابات الدقيقة.

بما أن الكمون حول النواة متناظر كروياً فلا بد أن توجد حلول لمعادلة شرودينغر تتوقف فقط على (r)، وبكلام آخر يمكن اعتبار التابع التالي حلاً مقبولاً لها:

$$\psi = F(r)$$

لتحويل عملية الاشتقاق الجزئي للتابع ψ من الإحداثيات الديكارتية إلى المتحول (r) لا بد من التذكر أن:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x}$$

مع العلم أن (r) تُعطى بالعلاقة التالية:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

باشتقاق (r) بالنسبة لـ x نحصل على:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{1}{2}\frac{2x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{x}{r}$$

وبالتالي يصبح مشتق ψ بالنسبة لـ x بالشكل التالي:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{x}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}$$

بأخذ المشتق الثاني للتابع ψ بالنسبة لـ x نحصل على:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

وبنفس الأسلوب نحصل على الحدين $\frac{\partial^2 \psi}{dy^2}$ و $\frac{\partial^2 \psi}{dz^2}$ اللذين يأخذان شكل المعادلة السابقة بعد تبديل x بـ y ثم بـ z على الترتيب:

اعتماداً على ما سبق يمكننا أن نكتب:

$$\nabla^2\psi = \frac{3}{2}\frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}$$

إذن يمكن كتابة معادلة شرودينغر على الشكل التالي:

$$\frac{\partial^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{dr} + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0$$

إن أبسط شكل للتابع $\psi = F(r)$ يحقق معادلة شرودينغر السابقة هو $(\psi = e^{-ar})$ حيث (a) يرمز إلى ثابت يطلب تعيينه. باشتقاق التابع $(\psi = e^{-ar})$ نحصل على:

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = -ae^{-ar} \quad ; \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = a^2e^{-ar}$$

بتعويضها في معادلة شرودينغر الأخيرة نجد ما يلي:

$$a^2e^{-ar} - \frac{2}{r}ae^{-ar} + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)e^{-ar} = 0$$

أو بالشكل التالي:

$$a^2 - \frac{2a}{r} + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right) = 0$$

بإعادة ترتيب العلاقة السابقة يمكن كتابة التالي:

$$a^2 + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}E + \left(\frac{8\pi^2\mu}{h^2}e^2 - 2a\right)\frac{1}{r} = 0$$

فإذا كانت المعادلة السابقة صحيحة من أجل كل قيم (r)، لا بد أن يساوي الصفر كل من الحد الثابت والحد الذي هو أمثال $\left(\frac{1}{r}\right)$، أي يمكن كتابة التالي:

$$a^2 + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}E = 0$$

$$\frac{8\pi^2\mu}{h^2}e^2 - 2a = 0$$

الآن بحل المعادلتين السابقتين، ومن أجل a و E نحصل على:

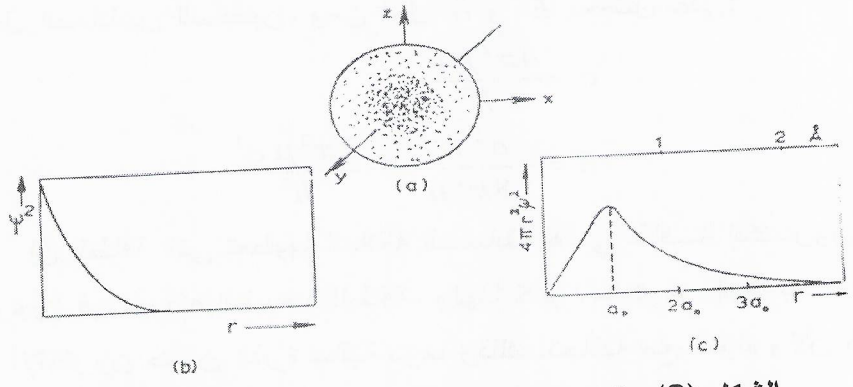
$$a = \frac{4\pi^2 \mu e^2}{h^2}$$

$$E = -\frac{a^2 h^2}{8\pi^2 \mu} = -\frac{2\pi^2 \mu e^4}{h^2}$$

إن الطاقة التي تعطيها العلاقة السابقة هي طاقة إلكترون ذرة الهيدروجين في سويته الطبيعية للطاقة، ولهذا كثيراً ما نرمز إليها بـ E_1، وطاقة الإلكترون ضمن الذرة سالبة دوماً وذلك لتجاذبه مع النواة ولأن طاقته معدومة فرضاً في اللانهاية.

إن المقدار $E-$ هو طاقة التشرد، أي الطاقة الضرورية لاقتلاع الإلكترون كلياً من ذرة الهيدروجين، والقيمة التجريبية له هي $(13{,}6\,eV)$ تتفق مع القيمة المحسوبة من العلاقة السابقة.

من أجل إدراك أهيمة المقدار (a) يمكننا دراسة إيجاد الإلكترون في مناطق مختلفة حول النواة، لقد سبق وعلمنا أن $\psi^2 dV$ يمثل احتمال إيجاد الإلكترون في عنصر الحجم dV. فإذا قُسم الفراغ حول النواة إلى طبقات كروية رقيقة للغاية كان حجم الطبقة الواحدة التي تقع على بعد (r) من النواة والتي سمكها dr هو $(4\pi r^2 dr)$، وكان احتمال وجود الإلكترون في هذه الطبقة هو $(4\pi r^2 \psi^2 dr)$. يعرف المقدار $(4\pi r^2 \psi^2)$ بالكثافة الإحتمالية القطرية. ففي المثال الذي ندرسه أخذنا $(\psi = e^{-ar})$ ولذا فإن احتمال وجود الإلكترون في طبقة كروية يكون $(4\pi r^2 e^{-2ar})$ فإذا رُسم التابع الأخير بالنسبة لـ (r) نحصل على الشكل (8).



الشكل (8): إلكترون ذرة الهيدروجين في سويته الطبيعية.
(a) الغمامة الإلكترونية والسطح الكروي الحدودي للمدار. (b) تغير التوزع الإحتمالي أو الكثافة الإلكترونية الإحتمالية بتغير البعد r. (c) تغير الكثافة الإلكترونية الإحتمالية القطرية بتغير البعد r.

يلاحظ أن الكثافة الإحتمالية القطرية تكون أعظم ما يمكن عندما يكون $r=\frac{1}{a}$، فإذا كان $\left(\frac{1}{a}=a_0\right)$، ومنه:

$$a_0=\frac{h^2}{4\pi^2\mu e^2}$$

وعند حساب a_0 وجد أنه يساوي $0,5292\ A^o$. هذه القيمة هي نصف قطر بور للمدار الأول كما حسبه بور في نظريته. وهكذا بدلاً من القول في نظرية بور أن الإلكترون يدور فى سوية الطاقة الطبيعية على مدار دائري نصف قطره a_0 يُقال فى الميكانيك الكوانتي أن أعظم احتمال لوجود الإلكترون فى سويته الطبيعية هو على بعد قدره a_0، وهناك فرصة جيدة كما يلاحظ لوجوده في نقاط أقرب من a_0 وأبعد منه في منطقة ذات حجم كبير.

تمثل الكثافة الإجمالية كما يلاحظ من الشكل السابق تصويرياً على شكل غمامة إلكترونية وهو الشكل الذي يمكن الحصول عليه إذا أُخذت سلسلة

من الصور الفوتوغرافية لمواقع الإلكترون في لحظات مختلفة. تحاط الغمامة الإلكترونية بسطح كروي يحوي داخله معظم الكثافة الإحتمالية الإلكترونية ويعتبر عملياً حدود المدار.

مثـــال (7):

برهن أن المعادلة (108) تتحول عند اسخدام العلاقة (109) إلـــى العلاقة (110).

الحـــل:

نلاحظ أن:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d}{dr}\left(\frac{R_1}{r}\right)\right]=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR_1}{dr}-R_1\right)$$

$$=\frac{1}{r^2}\left(\frac{dR_1}{dr}+r\frac{d^2R_1}{dr^2}-\frac{dR_1}{dr}\right)$$

$$=\frac{1}{r}\frac{d^2R_1}{dr^2}$$

الآن بالتعويض عن الحد الأول من هذه المعادلة والضرب بـــ (r) تتحـــول المعادلة إلى الشكل التالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2R_1}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2r^2\mu}R_1-K\frac{Ze^2}{r}R_1=ER_1$$

أو بالشكل:

$$\frac{d^2R_1}{dr^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}-K\frac{Ze^2}{r}-E\right]R_1=0$$

$$\Rightarrow\frac{d^2R_1}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_e)R_1=0$$

حيث أن:

$$V_e=-K\frac{Ze^2}{r}+\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}$$

مسائل على الفصل الخامس

1- ادرس حركة جسيم حر محدداً معادلة شرودينغر له ومن ثم حل هذه المعادلة للحصول على التوابع الخاصة والقيم الطاقية الخاصة. ثم ما هو شكل الحل العام؟

2- اكتب معادلة شرودينغر لذرة الهيدروجين.

3- إذا كان لمعادلة شرودينغر عند قيمة معينة لطاقة الوضع (V) حلولاً هي $\psi_1(x,t)$ و $\psi_2(x,t)$ و $\psi_3(x,t)$، أثبت أن التجميع الخطي الاختياري التالي:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3$$

هو أيضاً حل لنفس المعادلة.

4- برهن أن التابع الموجي للجسيم الحر: $\psi(x,t) = \sin(Kx - \omega t)$ لا يحقق معادلة شرودينغر الموجية العامة:

$$\alpha\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\,\psi(x,t) = \beta\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

إلا في حالة خاصة يطلب إيجادها.

5- اكتب معادلة شرودينغر لأيون ذرة الهيليوم He^+ ، وكذلك لأيون ذرة الليثيوم Li^{++} .