



محاضرات في الفيزياء

الذرية والأطياف

إعداد

أ.د. خالد صلاح الدين

كلية العلوم

قسم الفيزياء

2023-2024

الكلية: التربية

المادة: الفيزياء الذرية والأطياف

الفرقة: الثالثة اساسي

التخصص: علوم

تاريخ النشر: 2023

عدد الصفحات: 77

المؤلفون: أد/ خالد صلاح

المحتويات:

الفصل الأول: مراجعة على النماذج الذرية

الفصل الثاني: الطيف الذري

الفصل الثالث: نموذج بور للذرة

الفصل الرابع: المعالجة الكمية لذرة الهيدروجين

الفصل الخامس: النموذج المتجهي للذرة

الفصل السادس: التأثير المتبادل بين الذرات و المجال المغناطيسي

الفصل الأول

مراجعة على النماذج الذرية

منذ بداية القرن العشرين و أبحاث الفيزيائيين تسير نحو التعمق فى دراسة تركيب المادة بعد أن سبقتها محاولات عدة.

1- أولى هذه المحاولات كانت على يد الفلاسفة حيث اشاروا إلى انه اذا تم تقسيم أى جزء من المادة إلى جزئين أصغر فاصغر وأذا استمر التقسيم إلى أن نصل إلى اصغر جزء يمكن تنقسم له المادة أى اننا نصل إلى مايعرف بالذرة لذلك فأن:

الذرة " هى أصغر جزء أو عنصر يمكن ان تنقسم له المادة"

2- تلتها محاولات على يد كل من بويل R. Boyle عام 1662 و بيرنولى D. Bernoulli عام 1738 و ماكسويل J. C. Maxwell و بولتزمان L. Boltzmann و ذلك بدراسة حركة الغازات حيث تم فرض أن " الغاز يتكون من عدد كبير من الجسيمات والتي تتحرك حركة عشوائية و تتصادم مع بعضها تسمى الجزيئات كما انها متماثلة و صغيرة نسبيا بالنسبة للمسافة بينها و بين بعضها"

3- بالتوازي مع المحاولات السابقة درس الكيميائيين الاتحاد الكيميائى و ذلك على يد بروتست J. L. Proust و دالتون J. Dalton و أفوجادرو A. Avogadro حيث تم افتراض ان المادة تتكون من ذرات حيث تتحد مع بعضها لتكوين المركبات كما امكنهم تعيين الاوزان النسبية للذرات.

تلى ذلك محاولات جادة لوضع نموذج لماهية تكوين الذرة ومن هذه النماذج:

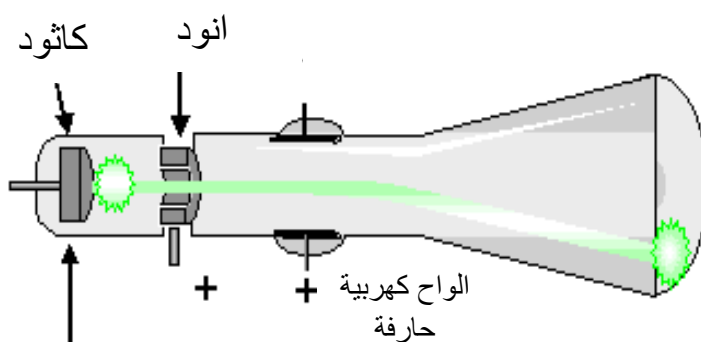
- نموذج طومسون
- نموذج رزرفورد
- نموذج بوهر

تلى ذلك مقترحات و محاولات للوصول إلى التركيب الأمثل الذي يصف تركيب الذرة مثل مقترحات نموذج سمر فيلد ثم رؤية ميكانيكا الكم لذرة الهيدروجين و الذرات الأخرى.

التركيب الذري

1- نموذج طومسون

قبل بداية القرن التاسع عشر تركزت دراسة العلماء على توصيل الكهرباء خلال الغازات حيث قاموا بتطبيق جهد كهربائي كبير على أنبوب زجاجي به كمية قليلة من غاز مثل الزئبق والنيون وعندها مر تيار كهربائي خلال الغاز من القطب السالب (الكاثود) إلى القطب الموجب (الأنود) وعرف ذلك التيار بأشعة الكاثود (Cathode rays). و بعد هذه التجربة ادهش طومسون الأوساط العلمية بإعلانه عن أن الجسيمات المكونة لأشعة الكاثود هي أصغر حجماً بكثير من الذرات، وقد سميت هذه الجسيمات بالإلكترونات.



وقد استخدم العالم البريطاني طومسون في عام 1897 الجهاز الموضح بالشكل التالي وحصل على نتائج مهمة وهي :

- إذا وضعت الأنبوب داخل مجال كهربائي أو مغناطيسي فإن شعاع الإلكترونات ينحرف عن مساره.
- وأستطاع بهذا الجهاز قياس النسبة بين شحنة الإلكترون وكتلته (e/m) ووجد أن هذه القيمة لا تعتمد على نوع الغاز داخل الأنبوب أو نوع مادة الكاثود.

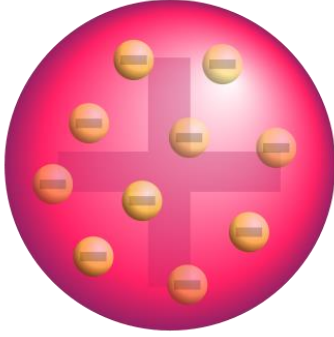
وأستطاع طومسون أستنتاج الآتي :

- تتكون هذه الأشعة من جسيمات صغيرة جدا مشحونة بشحنة سالبة أطلق عليها أسم "الإلكترونات".

• لأن النسبة (e/m) لا تعتمد علي نوع الغاز ولا نوع ماده الكاثود فإن الإلكترون يمثل المكون الأساسي لجميع الذرات.

• لأن النسبة (e/m) كبيرة جدا فإن كتلة هذا الإلكترون صغيرة جدا.

حيث توصل طومسون إلى ان:



1. الذرة كرة مصمتة موجبة الشحنة.

2. تتخلل الالكترونات السالبة الذرة (كما تتخلل البذور ثمرة البطيخ كما يتضح من الشكل التوضيحي لذلك سمي هذا النموذج بنموذج البطيخة).

3. الذرة متعادلة كهربائياً.

و لقد نجح نموذج طومسون في ذلك الوقت في تفسير بعض الظواهر الفيزيائية و الكيميائية مثل :

1. أعطى صورة مرضية لتصنيف العناصر دورياً.

2. في محاولة لتفسير الإشعاعات الطيفية المنبعثة إفترض أنه نظراً لأن الإلكترون جسيم مشحون فإنه ينتج من ذبذبه حول مركز اتزانه اشعاعاً ذو طول موجى يتناسب مع تردد الذذببة.

3. فسر وجود الأيونات السالبة و الموجبة ، فاكنتساب الذرة المتعادلة للإلكترون يحولها لايون سالب بينما فقدها له يحولها لأيون موجب.

4. فسر انبعاث الإلكترونات في ظاهرة الانبعاث الأيونى الحرارى.

5. قدم النموذج المرن لنظرية الحركة للغازات.

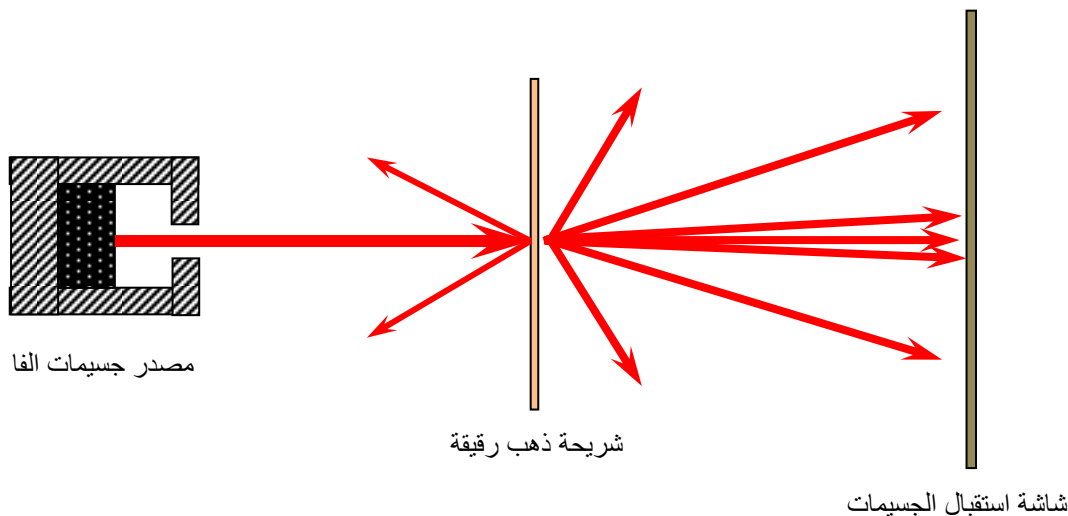
و لكنه فشل في تفسير بعض الظواهر الأخرى مثل حيث انه فشل في الربط بين ترددات الإلكترونات و ترددات الخطوط الطيفية المنبعثة و ايضا في تفسير انبعاث خطوط طيفية متعددة لذرة مثل الهيدروجين على الرغم من انه يحتوى على إلكترون واحد فقط.

2- نموذج رذرفورد

قام العالم رذرفورد في عام 1911 بعمل تجربة عملية لاختبار نموذج طومسون للذرة، علماً بأن رذرفورد هو أحد طلبة العالم طومسون. وكانت التجربة التي استخدمها لاختبار نموذج طومسون للذرة هو دراسة تشتت جسيمات ألفا عندما تصطدم بشريحة من الذهب، ولقد علم رذرفورد أن جسيمات ألفا هي أنوية ذرة الهيليوم He^{++} أي ان ذرة هيليوم متأين بمعنى انه فقد الكتروناته. يمكن الحصول على جسيمات ألفا من العديد من العناصر المشعة.

تجربة تشتت جسيمات ألفا

في الشكل الموضح أدناه نرى الفكرة الرئيسية من ترتيب تجربة قياس تشتت جسيمات ألفا والتي تتكون من مصدر لجسيمات ألفا تنطلق من عنصر مشع يتم تحديد حزمة منها من خلال لوجي التوجيه لتسقط جسيمات ألفا على شكل حزمة متوازية على شريحة رقيقة من الذهب بحيث تستطيع جسيمات ألفا النفاذ منها، وهنا فإن سرعة جسيمات ألفا سوف تقل بشكل صغير وكذلك عند اصطدامها بذرات شريحة الذهب وتتعرض إلى حيود تحت تأثير القوى الكهربائية (قوى كولوم) نتيجة لاقترابها من الشحنة الموجبة والسالبة للذرة علماً بأن جسيمات ألفا ذات شحنة موجبة.



وحيث ان حيود جسيمات ألفا عند نفاذها من الشريحة المعدنية يعتمد على مسارها بالنسبة لذرات الشريحة فإن الحيود النهائي بعد النفاذ من الشريحة المعدنية سيكون مختلف لكل

جسيم من جسيمات ألفا. وعليه يكون فإن الحزمة المتوازية من جسيمات ألفا ستنفذ كحزمة مشتتة.

و قد توصل رذرفورد إلى النتائج التالية:

1. وجد ان عدد صغير ينتشتت بزوايا اكبر من 90 درجة أو تترتد بزاوية 180 درجة مما يدل على ان التشتت ناتج عن تنافر جسيمات ألفا مع جسم ذو شحنة موجبة وهو صغير جدا لصغر عدد ألفا المشتت وقد سمي بالنواة.

2. أن النواة لا تتحرك ولا تترتد عند اصطدام جسيمات ألفا بها وذلك لأن كتلتها أكبر بكثير من كتلة جسيمات ألفا.

3. معظم جسيمات ألفا تخترق الرقيقة دون ان تعاني انحرافا يذكر مما يدل على ان معظم الذرة فراغ.

و قد اقترح رذرفورد تصورا جديدا لتركيب الذرة طبقا لنتائج تجربة التشتت التي اجراها و هو:

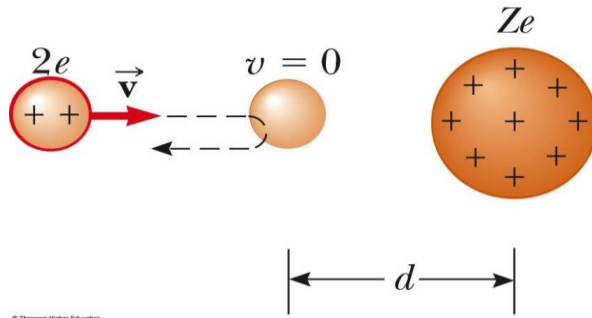
- 1- نواة الذرة صغيرة الحجم تحمل كل الشحنة الموجبة للذرة ، تتركز فيها معظم الكتلة الذرة.
- 2- تدور الإلكترونات حول النواة و على بعد كبير نسبيا منها.
- 3- حجم مكونات الذرة (النواة و الإلكترونات) صغير إلى حد يمكن إهماله بالنسبة لحجم الذرة نفسها ، أي معظم الذرة فراغ.

وبالتالى نجح رذرفورد فى :

1. تقديم نموذج واضح المعالم عن النموذج الذي قدمه طومسون.
2. استطاع بتجربته فى حساب ابعاد قطر النواة حيث وجدت فى حدود الفيرمي fm .
3. أصبحت تجربته من التجارب الهامة و المستخدمة فى دراسة تركيب المواد المختلفة وأيضا فى التعرف على بعض المركبات و المواد المختلفة.

- و قد تمكن كل من جايجر و مرزذن عام 1913 من التحقق من التوقعات النظرية المستقاه من من علاقة رذرفورد عمليا مما يؤكد النجاح الكبير لنموذج رذرفورد فى وضع اللبنة الأولى فى التصور الصحيح لتركيب الذرة.

إيجاد نصف قطر النواة



بفرض ان جسيم ارتد بزاوية 180 درجة كما موضح بالشكل و بفرض انه يتحرك نحو النواة التي لها شحنة Ze بسرعة v و بتطبيق قانون بقاء الطاقة فأن

$$(K.E + P.E)_{\text{قبل التشتيت}} = (K.E + P.E)_{\text{بعد التشتيت}}$$

$$K.E + 0 = 0 + k_e \frac{2e Ze}{d}$$

$$d = k_e \frac{(\text{شحنة النواة}) (\text{شحنة الجسيم})}{K.E}$$

و قد تم حساب قيم d و وجد انها لا تقل عن حوالي 10^{-15} m و هو القيمة المقترحة لنصف قطر النواة.

ملاحظات :

نلاحظ أن شكل القانون يتغير بتغير شحنة الجسيم المستخدم لقذف نواة الهدف مثلاً.

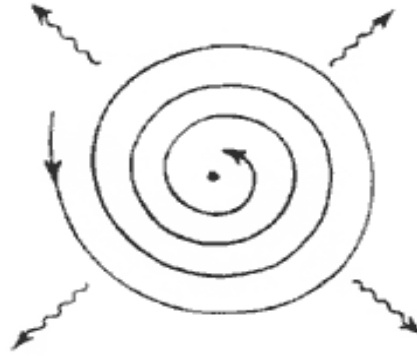
1- إذا كان الجسيم هو نواة ذرة الهيليوم (جسيم ألفا) يكون القانون

$$d = k_e \frac{2Ze^2}{K.E}$$

2- إذا كان الجسم هو نواة ذرة الهيدروجين (بروتون أو ديوتيريوم أو تريتيوم) يكون القانون

$$d = k_e \frac{Ze^2}{K.E}$$

على الرغم من نجاحه في تقديم نموذج واضح إلى حد ما للذرة و نجاحه ايضا في حساب نصف قطر النواة إلا أنه فشل في تفسير الاشعاع المنبعث من الذرة حيث طبق النظرية الكلاسيكية والتي توضح أن الإلكترون في مداره حول النواة سوف يطلق شعاع كهرومغناطيسي بصورة متصلة لأنه يتحرك في مسار دائري وهذا يعني أنه يفقد طاقة باستمرار مما يؤدي إلى أن يكون المدار حلزوني كما في الشكل المقابل وفي النهاية سيؤول الإلكترون إلى النواة وتتلاشى الذرة مما يتعارض مع كون الذرة مستقرة. كما لم ينجح نموذج رزفورد في تفسير طيف ذرة الهيدروجين .



مثال : جسيمات الفا بطاقة حركة 2MeV تستطار برقيقة من الذهب ، مستخدما نموذج الاستطارة لردفورد ، احسب اقصر مسافة اقتراب.

الحل:

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$K.E = 2 \text{ MeV} = 2 \times 10^6 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$Z = 80$$

$$k_e = 8.987 \times 10^9 \text{ N.m}^2/\text{C}^2$$

$$d = k_e \frac{2e^2 Z}{K.E}$$

$$d = 8.987 \times 10^9 \times \frac{2 \times (1.6 \times 10^{-19})^2 \times 80}{2 \times 10^6 \times 1.6 \times 10^{-19}}$$

$$d = 8.987 \times 10^9 \times \frac{2 \times (1.6 \times 10^{-19})^2 \times 80}{2 \times 10^6 \times 1.6 \times 10^{-19}}$$

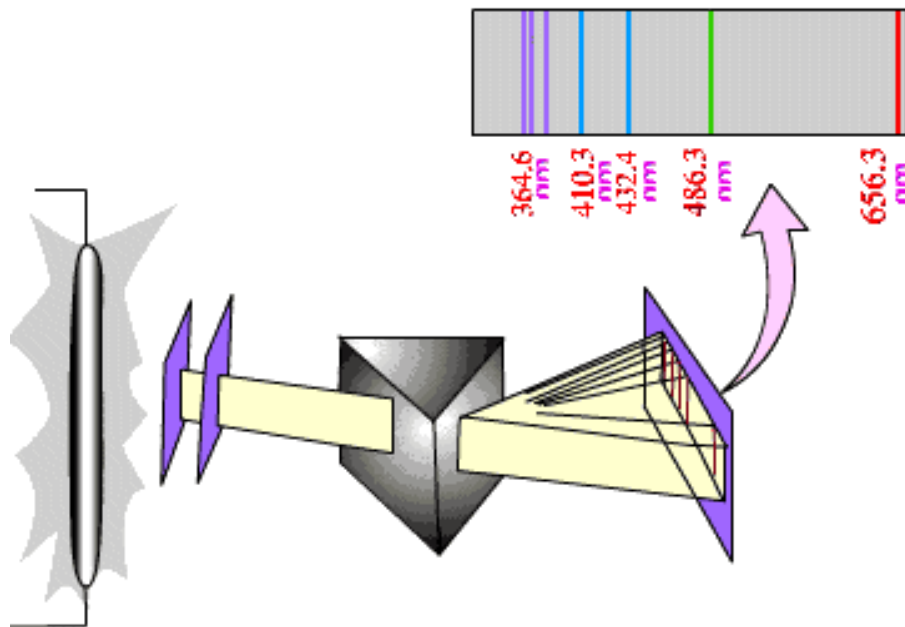
$$d = 1.15 \times 10^{-13} \text{ m}$$

الفصل الثاني

الطيف الذري

Atomic Spectrum

علم الطيف هو دراسة الإشعاع الممتص أو المنبعث من الذرة و هو له من الاهمية قدرا كبيرا و يعتبر تقنية مهمة للتعرف على العناصر المختلفة حيث أن لكل عنصر من العناصر الموجودة في الطبيعة طيف كهرومغناطيسي خاص به ولا يوجد عنصرين لهما نفس الطيف. ويقصد بدراسة الطيف هو توزيع الشدة الضوئية للطيف الكهرومغناطيسي كدالة في التردد أو الطول الموجي و تعد دراسة الأطياف من أهم الطرق لدراسة التركيب الذري و في الدراسات الفلكية حيث تستخدم النتائج لمعرفة خواص النجوم و المواد المكونة لها و درجة حرارتها و ايضا معرفة خواص طبقات الغلاف الجوي للأرض. ولدراسة الطيف الكهرومغناطيسي نحتاج معمليا إلى المطياف (كما موضح بالشكل) لقياس الطيف و للمطياف أنواع متعددة و جميعها لها نفس الأساس حيث يتكون من ثلاث أجزاء هي مصدر ضوئي (ذرات المادة) و المحلل الطيفي (إما بواسطة المنشور prism أو بواسطة محزوزة الحيود diffraction grating) و الذي يقوم بفصل إلى عناصره إلى الترددات المختلفة و الجزء الثالث هو جهاز يسجل الشدة الضوئية لكل الترددات التي تم تحليلها و المكونة للضوء الأصلي.



و تعتبر دراسة الاشعاعات التي تنبعث من العنصر او تلك التي يمتصها من الدراسات الهامة و التي يستعين بها الباحث في تعيين التركيب الذري للعناصر. و قد تم التعرف على العناصر الموجودة في الشمس و النجوم و غيرها بواسطة تحليل الضوء القادم منها. وقد تعرض الهيدروجين و هو اوسط العناصر جميعا لبحوث تجريبية و نظرية مستفيضة لدراسة الطيف و التي مكنت العلماء من وضع تصور انجح للتركيب الذرة.

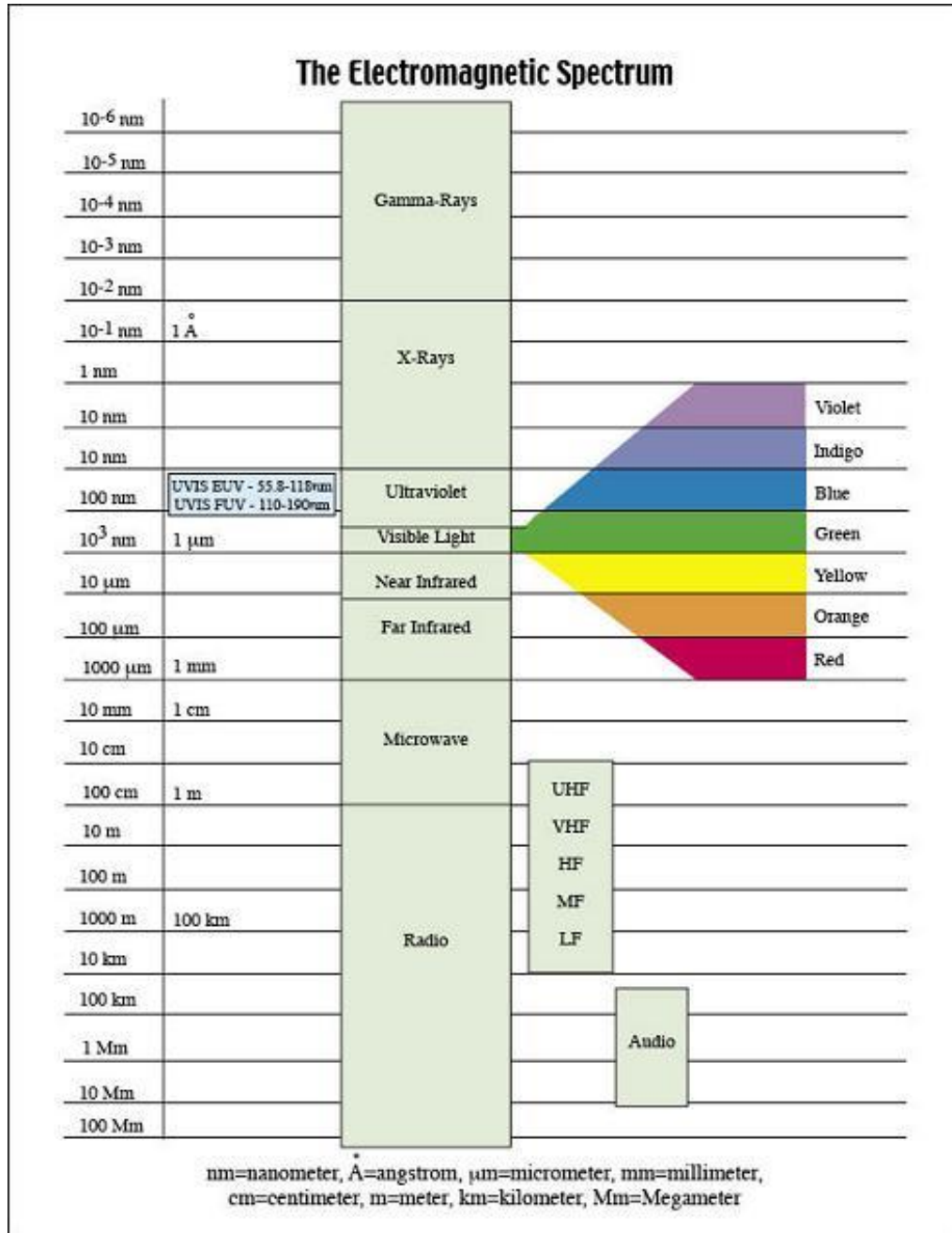
لدراسة الطيف يتم إثارة ذرات العنصر مثل الهيدروجين من خلال التفريغ الكهربى electric discharge حيث يوضع الغاز عند ضغط منخفض في انبوبة زجاجية مفرغة وبتطبيق فرق جهد كهربى على طرفى الأنبوبة الزجاجية، تحدث تصادمات بين الإلكترونات وذرات الغاز داخل الأنبوبة وتعمل على إثارة هذه الذرات إلى مستويات طاقة عالية ما تلبث إلى أن تعود الذرة إلى الحالة المستقرة وتنتقل طاقة على شكل شعاع كهرومغناطيسى يحمل فرق الطاقة بين مستوى الطاقة الأعلى و مستوى الطاقة الأقل ليخرج الشعاع على شكل طيف كهرومغناطيسى ليسقط على المنشور والذي يعمل على تحليله على أساس أن لكل طول موجى زاوية انحراف معينة ويتم استقبال الضوء المتحلل على شاشة ويسمى العلم الذي يدرس الطيف الكهرومغناطيسى بـ Spectroscopy والجهاز المستخدم لتحليل الضوء بالمطياف Spectrograph .

الطيف الكهرومغناطيسى

يمكن تقسيم الطيف الكهرومغناطيسى إلى عدة مناطق أو أقسام و ذلك حسب طول الموجة في هذا الطيف (أو حسب تردد الموجة و هو المفهوم المرتبط بطول الموجة أيضا) ومن خلال تقسيمه ينتج لدينا العديد من أنواع الأمواج الكهرومغناطيسية حيث يبدأ الطيف الكهرومغناطيسى بالأمواج الأقل طولاً (و الأكثر ترددا بالطبع) ثم يتدرج باستمرار فيزداد طول الموجة و يتناقص ترددها و يمكننا تقسيم الطيف إلى ما يلى :

منطقة الطيف	التردد (Hz)	الطول الموجي (Å)
أشعة جاما Gamma rays	$> 3 \times 10^{19}$	< 0.1
الأشعة السينية X-Rays	$3 \times 10^{17} - 3 \times 10^{19}$	$10 - 0.1$
الأشعة فوق بنفسجية Ultraviolet	$7.5 \times 10^{14} - 3 \times 10^{17}$	$4000 - 10$
الضوء المرئي Visible	$4.3 \times 10^{14} - 7.5 \times 10^{14}$	$7000 - 4000$

$10^6 - 7000$	$3 \times 10^{12} - 4.3 \times 10^{14}$	Infrared الأشعة تحت الحمراء
$10^6 - 10^9$	$3 \times 10^9 - 3 \times 10^{12}$	Microwave الأشعة الميكروافية
$> 10^9$	$< 3 \times 10^9$	Radio موجات الراديو



يمكن تصنيف الطيف الكهرومغناطيسي معتمدا على حالة المادة التي تبعث أو تمتص الطيف حيث يؤثر ذلك على تباعد أو تقارب الخطوط الطيفية وبالتالي يكون هناك نوعين للطيف الكهرومغناطيسي فالطيف الكهرومغناطيسي يكون إما طيف خطي Line Spectrum أو طيف متصل continuous spectrum

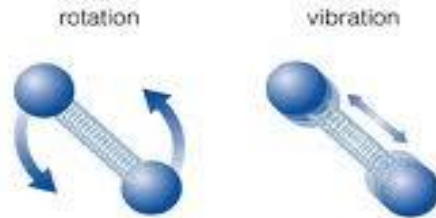
1- الطيف الخطي:

ويتألف من خطوط مضيئة على خلفية مظلمة (إذا كان طيف انبعاث) أو خطوط مظلمة على خلفية مضيئة (إذا كان طيف امتصاص) و تكون الخطوط مقابلة لترددات محددة يمكن تمييزها. تباعد الخطوط عن بعضها يعتمد على حالة المادة فإذا كانت المادة عبارة عن ذرات مفردة فاننا نحصل على خطوط طيفية متباعدة و تنتج الخطوط عندما تنتقل الإلكترونات في الذرة بين مستويات الطاقة المختلفة للذرة و تنبعث موجات كهرومغناطيسية طاقتها مساوي الفرق بين طاقة المستويات و تقابل تردد محدد هو تردد الخط الطيفي. مثل طيف مصباح النيون أو طيف مصباح الصوديوم.

Line Spectrum



أما إذا كانت المادة جزيئية أي عبارة عن جزيئات فان الخطوط تكون متقاربة جدا و تكون على شكل حزم من الخطوط الطيفية و تنتج الموجات الكهرومغناطيسية المكونة للطيف الجزيئي إما من دوران ذرات الجزيئات حول محور معين أو من اهتزازها حول موضع اتزانها.



2- الطيف المتصل أو مستمر:

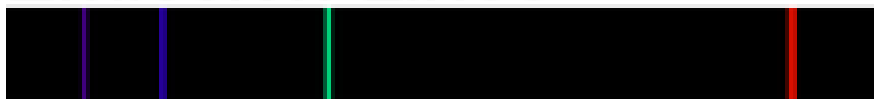
يحتوي على كل الترددات وهي متدرجة بشكل مستمر بحيث لا يمكن تمييز حد فاصل بينها أي يمثل هذا الطيف عدد كبير من الترددات أو الأطوال الموجية. و ينتج هذا النوع من الأجسام الصلبة التي تصدر أشعة و من الغازات أو الأبخرة ذات الكثافة العالية.

Continuous Spectrum



ويمكن للطيف الكهرومغناطيسي بنوعيه أن يكون طيف امتصاص أو انبعاث حيث يمكن للمادة أن تمتص ترددات معينة تعمل على إثارة الذرات إلى مستويات طاقة أعلى أو تعمل على زيادة طاقة اهتزاز أو دوران الجزيئات فنحصل على طيف الامتصاص حيث نحصل على طيف يحتوي على جميع الترددات ماعدا الخطوط الممتصة و التي تظهر على هيئة خطوط مظلمة و عندما تفقد المادة الطاقة الممتصة فإنها تبعث الطيف الكهرومغناطيسي على هيئة خطوط مضيئة على خلفية مظلمة.

Emission Lines



Absorption Lines



طيف الهيدروجين و علاقة رايدبرج

تعتبر محاولة بالمر Balmer في عام 1885 هي أولى المحاولات للتعرف على طبيعة الخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين حيث قدم العلاقة التجريبية و التي تربط بين الأطوال الموجية لخطوط الطيف المرئي لذرة الهيدروجين وهي الإنتقالات التي يحدثها الإلكترون في ذرة الهيدروجين من مستويات طاقة $n \geq 3$ إلى مستوى الطاقة $n = 2$ و هي:

$$\lambda = G \frac{n_2^2}{n_2^2 - n_1^2}$$

حيث $n_1 = 2$ و $n_2 = 3, 4, 5, \dots$ و $G = 3645.6 A^0$

وبهذه القيم وجد بالمر اتفاقا شديدا بين القيم المحسوبة و القيم المقاسة عمليا و الجدول التالي يوضح ذلك:

Transition الانتقال $n_2 \rightarrow n_1$	Line Name أسم الخط الطيفي	Calculated Value (λ) القيمة المحسوبة	Measured Value القيمة المقاسة
3 \rightarrow 2	H_α	6562.08	6562.10
4 \rightarrow 2	H_β	4860.80	4860.74
5 \rightarrow 2	H_γ	4340.00	4340.10
6 \rightarrow 2	H_δ	4101.30	4101.20

تلى ذلك دراسة مجموعات أخرى من الخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين و بالتالي يكون هناك مجموعات أو سلاسل طيفية معروفة و هي :

- 1- سلسلة ليمان Lyman وهي في مدى الأشعة فوق البنفسجية و نحصل عليها من انتقال الإلكترون من أى مدار إلى المدار الأول ($n_f = 1$).
- 2- سلسلة بالمر Balmer وهي في مدى الضوء المرئي و نحصل عليها من انتقال الإلكترون من أى مدار إلى المدار الثاني ($n_f = 2$).
- 3- سلسلة باشن Paschen وهي في مدى الأشعة تحت الحمراء و نحصل عليها من انتقال الإلكترون من أى مدار إلى المدار الثالث ($n_f = 3$).

4- سلسلة براكيت Brackett وهي في مدى الأشعة تحت الحمراء و نحصل عليها من انتقال الإلكترون من أى مدار إلى المدار الرابع ($n_f = 4$).

5- سلسلة بيفوند Pfund وهي في مدى الأشعة تحت الحمراء و نحصل عليها من انتقال الإلكترون من أى مدار إلى المدار الخامس ($n_f = 5$).

وقد وضعت العديد من المعادلات التي تحسب هذه المجموعات من الأطوال الموجية وفي العام 1890 توصل العالم ريدبيرج Rydberg إلى معادلة واحدة لحساب كل الأطوال الموجية لكل الانتقالات المتوقعة من الذرة و هي.

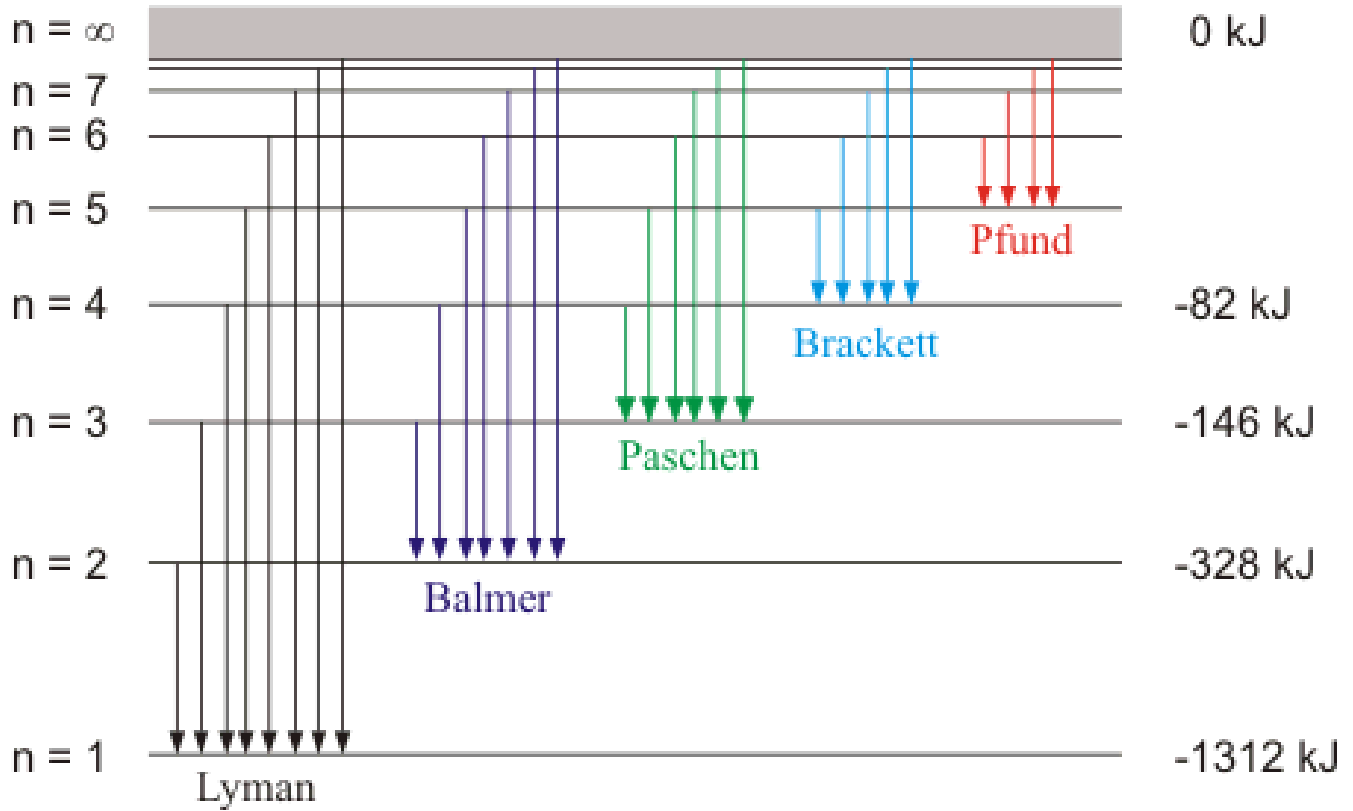
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

والجدول التالي يوضح المجموعات المختلفة لخطوط طيف الهيدروجين

The Hydrogen Series

Names	Wavelength Ranges	Formulas
Lyman	Ultraviolet	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n = 2, 3, 4, \dots$
Balmer	Near ultraviolet and visible	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n = 3, 4, 5, \dots$
Paschen	Infrared	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n = 4, 5, 6, \dots$
Brackett	Infrared	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n = 5, 6, 7, \dots$
Pfund	Infrared	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n = 6, 7, 8, \dots$

الرسم التوضيحي ايضا يوضح المجموعات المختلفة لخطوط طيف الهيدروجين



الفصل الثالث

نموذج بور للذرة

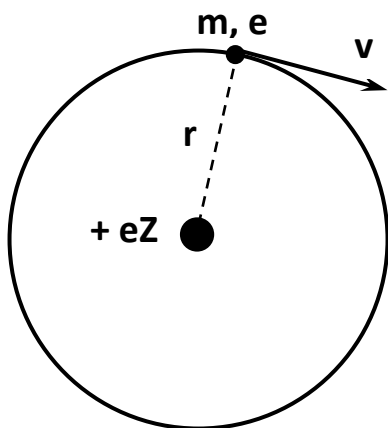
Bohr's Atomic Model

حاول بور وضع نموذج متكامل لتركيبة الذرة عام 1912 و لقد اتخذ بور نموذج رذرفورد للذرة اساساً لنظريته حيث صور أن الذرة متعادلة كهربياً بها نواة صغيرة موجبة الشحنة توجد في مركز الذرة و تدور الإلكترونات حول النواة في مدارات دائرية. كما استخدم أفكار ماكس بلانك في تكمية الإشعاع الكهرومغناطيسي المنبعث من الذرة. كما أن بور أول من توصل بنظريته عن ذرة الهيدروجين إلى استنتاج كمي صحيح لمعادلة بالمر.

فروض نظرية بوهر

1- الفرض الأول

تدور الإلكترونات حول النواة في مدارات دائرية لها طاقات كمية منفصلة حول النواة. للإلكترون أثناء حركته حول النواة طاقة معينة تتوقف على بعد مستوى طاقته عن النواة حيث تزداد طاقة المستوى كلما زاد نصف قطره. يتأثر الإلكترون بقوتين قوة جذب النواة (قانون كولوم) وقوة طرد مركزية (قوانين الحركة الدائرية). نصف قطر المدار و تردد الإلكترون و طاقته أو طاقة المستوى يمكن حسابهم كما يلي:



أ. نصف قطر المدار (r)

كما موضح بالشكل يدور الإلكترون ذو الشحنة (e) و الذي له كتلة (m) حول النواة التي لها شحنة (eZ) في مدار نصف قطره (r) و بسرعة (v).

- تتساوى قوة الجذب الكهربى مع قوة الطرد المركزى حيث:

$$k_e \frac{e^2 Z}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$$v^2 = k_e \frac{e^2 Z}{mr} \quad 3.1$$

- من المعروف ان الطاقة الكلية تساوى مجموع طاقتى الوضع و الحركة.

$$Total\ energy = K . E + P . E$$

$$Total\ energy = \frac{1}{2} mv^2 + \left(-k_e \frac{e^2 Z}{r} \right)$$

$$Total\ energy = k_e \frac{e^2 Z}{2r} - k_e \frac{e^2 Z}{r}$$

$$Total\ energy = -k_e \frac{e^2 Z}{2r} \quad 3.2$$

- نلاحظ ان الطاقة الكلية تساوى طاقة حركة الالكترون لكن باشارة سالبة

المدار الذي يسكنه الالكترون حول النواة هو المدار الذي تكون فيه كمية التحرك الزاوية orbital angular momentum (L) تساوي عدد صحيح من ثابت بلانك مقسوم على 2π أي

$$L = mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \quad 3.3$$

where $n = 1, 2, 3, \dots$

بالتعويض عن قيمة السرعة لايجاد نصف القطر

$$(mvr)^2 = (n\hbar)^2$$

$$m^2 \left(k_e \frac{e^2 Z}{mr} \right) r^2 = (n\hbar)^2$$

$$r = \frac{n^2(\hbar)^2}{k_e m e^2 Z}$$

3.4

ب. تردد الإلكترون (ν)

بالتعويض عن السرعة في المعادلة 3.1 بدلالة السرعة الزاوية حيث $v = \omega r$

$$\omega^2 r^2 = k_e \frac{e^2 Z}{mr}$$

$$\omega^2 = k_e \frac{e^2 Z}{mr^3} = 4\pi^2 \nu^2$$

$$\nu^2 = \frac{1}{4\pi^2} k_e \frac{e^2 Z}{mr^3}$$

و بالتالي يكون التردد هو

$$\nu = \frac{e}{2\pi} \sqrt{\frac{k_e Z}{mr^3}}$$

3.5

ت. طاقة المدار أو الإلكترون (E_n)

و بالتعويض عن قيمة (r) في معادلة الطاقة الكلية لتصبح:

$$\text{Total energy} = -k_e \frac{e^2 Z}{2 \left(\frac{n^2(\hbar)^2}{k_e m e^2 Z} \right)}$$

$$E_n = -k_e^2 \frac{m e^4 Z^2}{2 n^2 \hbar^2}$$

$$E_n = - \left(\frac{k_e^2 m e^4 Z^2}{2 \hbar^2} \right) \frac{1}{n^2}$$

3.6

و هذه المعادلة تدل على ان طاقة الالكترون كمماه و هذا يعنى ايضا ان طاقة المستوى كمماه
بمعنى ان لكل مستوى طاقة محددة تعتمد على رقم كم رئيسى و هو (n) و المناطق بين
المستويات تعتبر مناطق محرمة على الالكترونات حيث يتواجد الالكترون فى مدار أو مستوى
ما اذا امتلك الطاقة التى تساوى طاقة هذا المستوى.

بالتعويض عن القيم الموجودة فى المعادلة السابقة نجد أن:

$$E_n = - \frac{2.18 \times 10^{-18}}{n^2} \quad \text{joules}$$

$$E_n = - \frac{13.6}{n^2} \quad \text{eV}$$

من هذه المعادلة يمكن تعيين طاقة المستويات الخاصة بذرة الهيدروجين كما يلى:

$$n = \infty \quad \text{—————} \quad E_{\infty} = 0.00 \text{ eV}$$

$$n = 5 \quad \text{—————} \quad E_5 = -0.54 \text{ eV}$$

$$n = 4 \quad \text{—————} \quad E_4 = -0.85 \text{ eV}$$

$$n = 3 \quad \text{—————} \quad E_3 = -1.51 \text{ eV}$$

$$n = 2 \quad \text{—————} \quad E_2 = -3.4 \text{ eV}$$

$$n = 1 \quad \text{—————} \quad E_1 = -13.6 \text{ eV}$$

2- الفرض الثاني

المدارات هي الأماكن المسموحة فقط لتواجد الإلكترونات حيث تكون طاقتها مقداراً ثابتاً و هذا يعني أنه لا يتولد عن حركة الإلكترون حول النواة إشعاعات كهرومغناطيسية بخلاف النظرية الكلاسيكية.

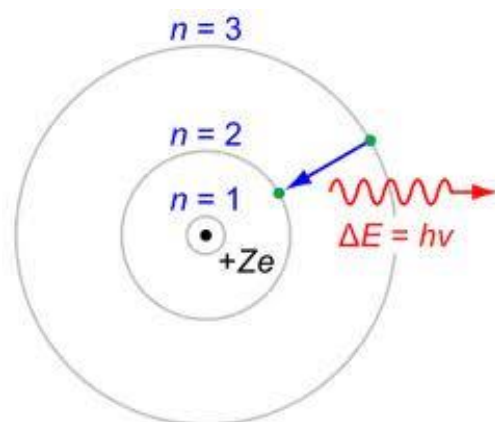
3- الفرض الثالث

يمكن للإلكترون أن يصدر إشعاعاً كهرومغناطيسياً (الفوتونات) عندما ينتقل من مستوى طاقة أعلى (مستوى الطاقة الابتدائي E_i) إلى مستوى طاقة أقل (مستوى الطاقة النهائي E_f) حيث تكون طاقة الفوتون المكون للإشعاع الكهرومغناطيسي مساوياً للفرق بين طاقة المستويين.

$$h\nu = \Delta E = E_i - E_f$$

$$h \frac{c}{\lambda} = E_i - E_f$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{ch} (E_i - E_f)$$



وبالتعويض عن قيمة طاقة المستوى المعطاه في معادلة 3.6 ينتج

$$\frac{1}{\lambda} = -\frac{1}{ch} \frac{k_e^2 m e^4 Z^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{k_e^2 m e^4 Z^2}{4\pi \hbar^3 c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

و بالمعادلة السابقة استطاع بور حساب الطول الموجي لأي خط طيفي ينبعث من الذرة نتيجة انتقال الإلكترون من مدار إلى آخر و بالتالي نجح في تقديم تفسير واضح و محدد لإنبعاث الخطوط الطيفية من الذرات.

يفضل في دراسة الأطياف التعبير عن الطول الموجي بالعدد الموجي و هو مقلوب الطول الموجي و بالتالي تصبح المعادلة السابقة كما يلي:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{k_e^2 m e^4}{4\pi \hbar^3 c} \cdot Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\bar{\nu} = R_{\infty} Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad 3.7$$

حيث R_{∞} هو ثابت و قد وضع بور أن هذا الثابت مساويا لثابت رايدبيرج حيث

$$R_{\infty} = \frac{k_e^2 m e^4}{4\pi \hbar^3 c} = 10973700 \text{ m}^{-1} = 1.09737 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$$

وبهذه المعادلة استطاع بور حساب الأطوال الموجية للخطوط الطيفية المكونة للسلاسل الطيفية المعروفة لذرة الهيدروجين.

جهد التأين (I_p)

من المعروف أن جهد التأين هو الطاقة اللازمة لتحرير الإلكترون من الذرة و طبقا لنموذج بور فإن جهد التأين لذرة الهيدروجين هو الفرق في الطاقة لانتقال الإلكترون من المستوى الأول إلى المستوى اللانهائي أى من $n = 1$ إلى $n = \infty$ أو نفس قيمة العكس. لذلك استطاع بور حساب جهد التأين للذرات الهيدروجينية (الأيونات إحادية الإلكترون مثل He^+ , Li^{++}).

$$I_p = \frac{k_e^2 m e^4 Z^2}{2 \hbar^2}$$

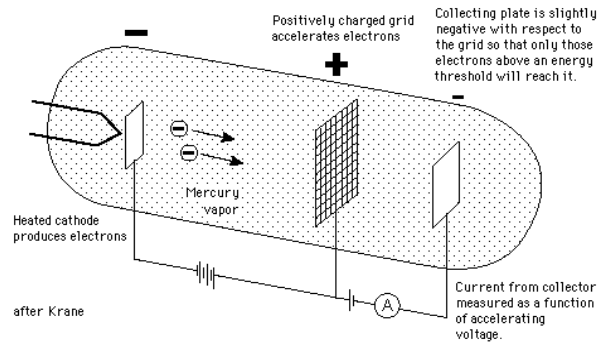
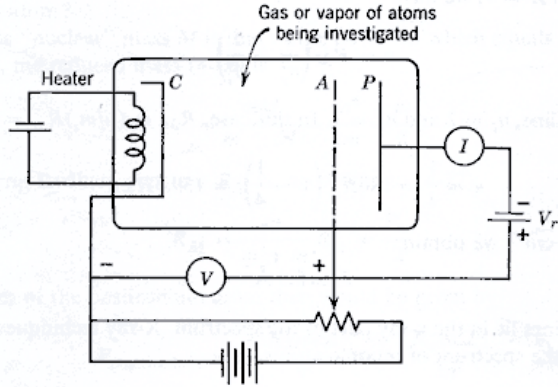
مع العلم أن طاقة المستوى يمكن أن تكتب على الصورة الآتية

$$E_n = -\frac{I_p}{n^2}$$

تجربة فرانك و هيرتز

لقد تبين في نموذج بور أن مستويات الطاقة للذرة مكممة أى أن مستويات الطاقة التي يمكن للإلكترون لها قيم محددة لتواجد الإلكترون فيها و قد استطاع كل من فرانك و هيرتز 1913 من اثبات ذلك عمليا من خلال تجربتهما العملية و المعروفة بتجربة فرانك و هيرتز و التي

يتضح تصميمها في الشكل التالي:

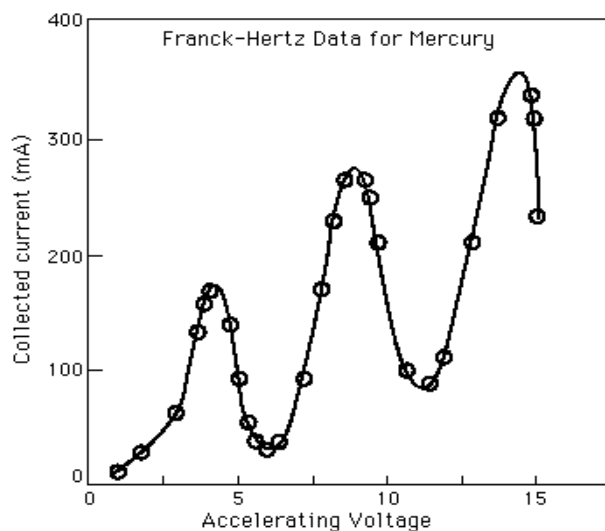


والتي تتكون من انبوبة مفرغة من الهواء وبها غاز الزئبق عند ضغط منخفض، مصدر للإلكترونات و هو الكاثود C ذو الجهد السالب و الذي يتم تسخينه عن طريق فتيلة يمر بها تيار كهربى ، و الأنود A ذو الجهد الموجب و الذي يتكون من من شبكة معدنية و تنتهي الأنبوبة بلوح باتجاه لوح P (the collector) ذو جهد سالب متصل بأميتر لقياس شدة التيار الناتج عن الإلكترونات التي تصطم بهذا اللوح.

فكرة عمل التجربة

يعتمد الأساس العلمي للتجربة على التصادم بين الإلكترونات و الذرات حيث تفقد الإلكترونات جزءا من طاقتها إلى الذرات و التي بدورها تنتقل من مستويات إلى مستويات أعلى و قد يؤدي هذا التصادم إلى تأيين الذرات إذا كانت طاقة الإلكترونات عالية بما يكفي.

تنطلق الإلكترونات المنبعثة من الكاثود باتجاه الأنود تحت تأثير فرق جهد التعجيل الذي يكسب الإلكترونات طاقة حركة فانها تنفذ من خلال شبكة الأنود متجها إلى اللوح P وإذا كانت طاقة حركة الإلكترونات كافية للتغلب على الجهد السالب للوح فإنها تعبر في الدائرة الكهربائية و تظهر على شكل تيار كهربى يمكن قياسه بواسطة الأميتر. أما إذا فقدت الإلكترونات جزءا من طاقتها نتيجة اصطدامها بذرات الزئبق فانها لا تستطيع التغلب على الجهد السالب للوح و بالتالي تقل شدة التيار الكهربى و قد لوحظ أن زيادة الجهد الموجب للأنود يعمل على زيادة شدة التيار و عند جهد معين أى طاقة إلكترونات معينة تناسب مستويات طاقة ذرات الزئبق تنتقل هذه الطاقة إليها فتقل شدة التيار و تتكرر هذه العملية مع زيادة الجهد الموجب كما موضح بالرسم التالي و الذي يوضح العلاقة بين شدة التيار و جهد النود.



و تدل نتيجة التجربة على أن الذرات لا تمتص إلا طاقات محددة مما يدل على أن الطاقة مكممة و قد اجريت هذه التجربة على غازات مختلفة و جميعها أعطت نفس النتيجة مؤكدة على الطبيعة الكمية لمستويات الطاقة في الذرة.

موجات دي برولي

لقد أشار بور في فرضه الأول أن كمية التحرك الزاوية ($L = mvr = n\hbar$) تتحدد برقم المدار (n) و بتطبيق مبدأ دي برولي و الذي ينص على أن أى جسم متحرك تصاحبه موجة لها طول موجي يعتمد على كمية تحركه والذي يعطى بـ

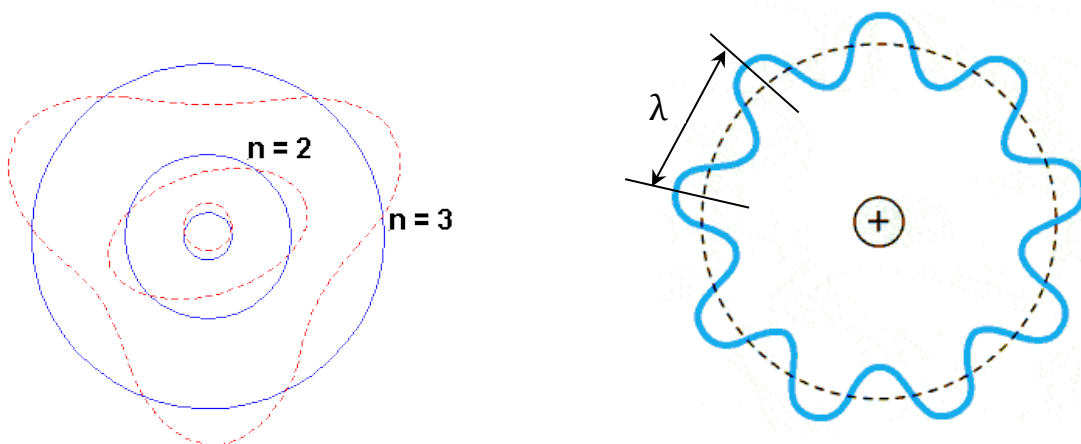
$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\left(\frac{n\hbar}{r}\right)} = \frac{2\pi r}{n}$$

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\left(\frac{n\hbar}{r}\right)} = \frac{2\pi r}{n}$$

$$2\pi r = n\lambda$$

3.8

و تدل المعادلة السابقة على أنه يكون لدينا مدار يجب ان يكون طول محيط المدار يساوي عدد صحيح من الاطوال الموجية للموجة الموقوفة المصاحبة للإلكترون كما في الشكل التوضيحي التالي



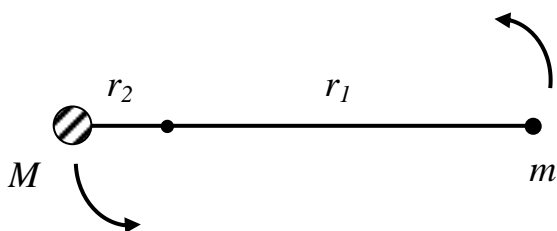
قصور نموذج بور

- 1- لم يستطع شرح طيف الذرات متعددة الإلكترونات.
- 2- لم يقدم طريقة لحساب شدة الخطوط الطيفية.
- 3- لم يستطع تفسير التركيب الدقيق للخطوط الطيفية حيث أثبتت الأجهزة المطيافية ذات القدرة العالية أن الخط الطيفي يتكون من خطين متقاربين أو أكثر.

إن نموذج بور المبسط عن ذرة الهيدروجين قد نجح نجاحا كبيرا حيث اسهم بشكل كبير في التوضيح الكمي لمتسلسلات طيف ذرة الهيدروجين ، كما أنه كان حافزا على ادخال بعض التحسينات على هذا النموذج و أيضا بعض المقترحات و التي قد ينظر البعض إليها على انها نماذج جديدة ، وسوف نتناولها على قدر الإمكان.

تأثير حركة النواة

لقد أعتبر أن كتلة النواة لانهاية بالنسبة لكتلة الإلكترون و هذا يجعل أن النواة تكون ملازمة مكانا ثابتا عند مركز المدارات الدائرية ، ولكن لما أن كتلة النواة محدودة بالمقدار M فإن كلا من النواة و الإلكترون يدورا حول مركز ثقل مشترك و بسرعة زاوية ω مشتركة و يقع محور الدوران على الخط الواصل بين النواة و الإلكترون بحيث يقسم بنسبة عكسية لكتلتيهما. فإذا كان بعدى الإلكترون و النواة عن محور الوران هما r_2, r_1 كما موضح بالرسم



$$r = r_1 + r_2 \quad \frac{r_1}{r_2} = \frac{M}{m}$$

$$\frac{r_1}{r_1 + r_2} = \frac{M}{m + M} \rightarrow r_1 = r \frac{M}{m + M}$$

$$\frac{r_1 + r_2}{r_2} = \frac{m + M}{m} \rightarrow r_2 = r \frac{m}{m + M}$$

السرعة الخطية = نصف القطر × السرعة الزاوية

$$v_1 = r_1 \omega \quad \& \quad v_2 = r_2 \omega$$

$$K.E = \frac{1}{2} M v_2^2 + \frac{1}{2} m v_1^2 = \frac{1}{2} M r_2^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m r_1^2 \omega^2$$

$$K.E = \frac{1}{2} M r^2 \left(\frac{m}{m+M} \right)^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m r^2 \left(\frac{M}{m+M} \right)^2 \omega^2$$

$$K.E = \frac{1}{2} r^2 \omega^2 \frac{mM}{(m+M)^2} \cdot (m+M)$$

$$K.E = \frac{1}{2} \left(\frac{mM}{m+M} \right) r^2 \omega^2 = \frac{1}{2} \mu r^2 \omega^2$$

أى أنهما يتحركا بكتلة مختزلة μ و بالتالى تصبح المعادلة 3.7 التي تعطي العدد الموجي هي

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \left(\frac{mM}{m+M} \right) \frac{e^4 k^2}{4\pi \hbar^3 C} Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\bar{\nu} = \left(\frac{M}{m+M} \right) R_\infty Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

3.9

و يمكن أن تكتب على الصورة الآتية

$$\bar{\nu} = R_M Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

حيث أن المقدار R_M تتغير قيمته بتغير نواة الذرة حيث

$$R_M = \left(\frac{M}{m+M} \right) R_\infty$$

الأنظمة الهيدروجينية

المقصود بالانظمة الهيدروجينية هي الذرات المتأينة و التي تحتوي بعد تأينها على إلكترون واحد لذلك يطلق عليها أيضا بشبهات الهيدروجين و بالتالي يمكن أن نطبق عليها المعادلة السابقة لحساب الأطوال الموجية للخطوط الطيفية الصادرة منها مع الأخذ في الإعتبار اختلاف كل من العدد الذري و كتلة النواه لها عن الهيدروجين ، مثال لذلك أيون الهيليوم إحداني التآين (He^+) و كذلك أيون الليثيوم ثنائي التآين (Li^{++}).

نظائر الهيدروجين

النظائر هي ذرات نفس العنصر و التي لها نفس العدد الذري و تختلف في العدد الكتلي و لعنصر الهيدروجين ثلاث نظائر هم

1. البروتيوم (H^1)

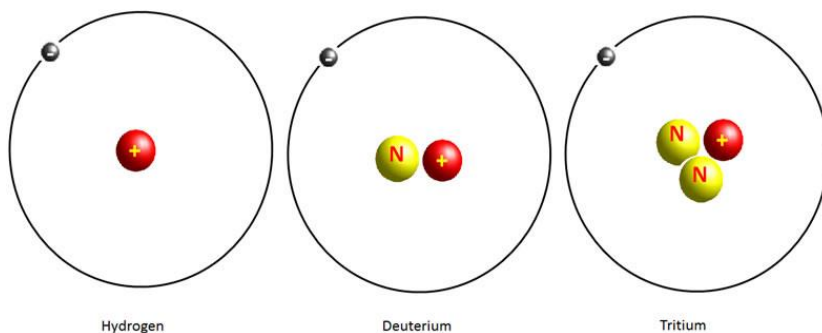
هو أكثر نظائر الهيدروجين شيوعا وله و يوجد بنسبة تفوق 99.98% و يسمى بهذا الأسم لأن نواته تتكون من بروتون وحيد.

2. الديوتيريوم (H^2)

هو النظير الثاني المستقر للهيدروجين و يعرف باسم الديوتيريوم و تتكون نواته من بروتون واحد و من نيوترون واحد.

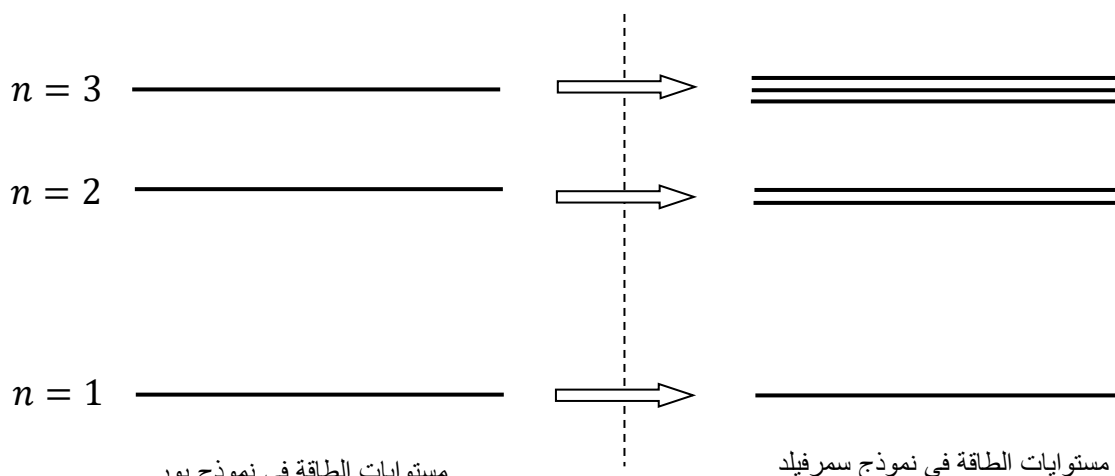
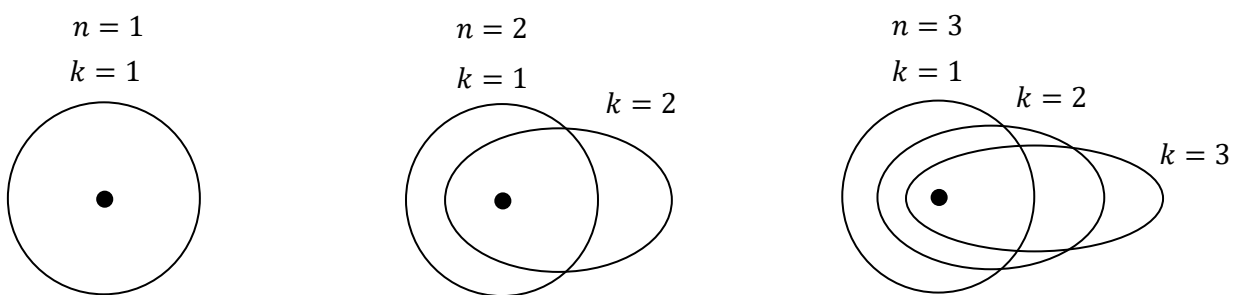
3. التريتيوم (H^3)

هو النظير الثالث و تتكون و تتألف نواته من بروتون واحد و نيوترونان اثنان و هو نظير مشع أى غير مستقر.



تعديلات سمر فيلد

لقد طور العالم الألماني أرنولد سمر فيلد نموذج بور في محاولة منه لتفسير التركيب الدقيق لخطوط الطيف (تشقق الخط الطيفي إلى أكثر من خط) حيث افترض سمر فيلد أن الإلكترونات تدور حول النواة في مدارات ببيضاوية أي على شكل قطع ناقص تقع النواة في أحد بؤرتيه و يكون المسار الدائري هو حالة خاصة لهذا المدار البيضاوي. من المعروف القطع الناقص له محوران ، المحور الأكبر و المحور الأصغر أي هناك درجتين من درجات الحرية و بالتالي يستلزم وجود شرطان كميان و لهذا أدخل سمر فيلد عدد كم آخر (k) بخلاف عدد الكم الرئيسي و الذي اقترحه بور و لقد أسماه عدد الكم الثانوي أو عدد الكم السمتي. وقد اثبتت المعادلات التي حصل عليها سمر فيلد أن نصف قطر المحور الأكبر يتحدد بعدد الكم الرئيسي (n) بينما يتحدد نصف القطر الأصغر بعدد الكم السمتي و الذي يأخذ بدوره قيم تتوقف على قيمة (n) حيث ($n \rightarrow k = 1$) و يعني ذلك أن زيادة (n) تؤدي إلى زيادة عدد المدارات البيضاوية المختلفة في الشكل و الأبعاد و التي تختلف بدورها في مقدار الطاقة. وهذا يعني ان مستوى الطاقة الرئيسي يمكن أن ينشق إلى عدد معين من المستويات المختلفة في الطاقة و أن انتقال الإلكترون بين هذه المستويات و مستويات أخرى يظهر على هيئة انشقاق في الخطوط الطيفية.



مستويات الطاقة في نموذج بور

مستويات الطاقة في نموذج سمر فيلد

أمثلة محلولة

مثال 1

إذا كان جهد التأين لذرة الهيدروجين هو ، احسب نصف قطر هذه الذرة.

$$I_P = 13.6 \text{ eV} = 13.6 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J} = 2.2 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$I_P = \frac{k_e^2 m e^4 Z^2}{2 \hbar^2} \quad , \quad r = \frac{n^2 (\hbar)^2}{k_e m e^2 Z} = \frac{(\hbar)^2}{k_e m e^2 Z} \quad (n = 1)$$

$$I_P = \frac{k_e Z e^2}{2 \left(\frac{\hbar^2}{k_e m e^2 Z} \right)} = \frac{k_e Z e^2}{2(r)}$$

$$r = \frac{k_e Z e^2}{2(I_P)} = \frac{9 \times 10^9 \times 1 \times (1.6 \times 10^{-19})^2}{2 \times 2.2 \times 10^{-18}}$$

$$r = 5.24 \times 10^{-11} \text{ m} = 0.524 \text{ \AA}$$

مثال 2

عين جهد التأين لذرة الهيدروجين إذا كان أقصر طول موجي له في سلسلة بالمر هو 3650 \AA .
أقصر طول موجي للخط الطيفي في سلسلة بالمر ناتج من إنتقال الإلكترون من $n_i = \infty$ إلى $n_f = 2$.

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = E_i - E_f$$

$$\frac{hc}{\lambda} = 0 - \frac{I_P}{2^2}$$

$$I_P = \frac{4hc}{\lambda} = \frac{4 \times 6.625 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{3650 \times 10^{-10}}$$

$$I_P = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J} = \frac{2.18 \times 10^{-18}}{1.6 \times 10^{-19}} = 13.6 \text{ eV}$$

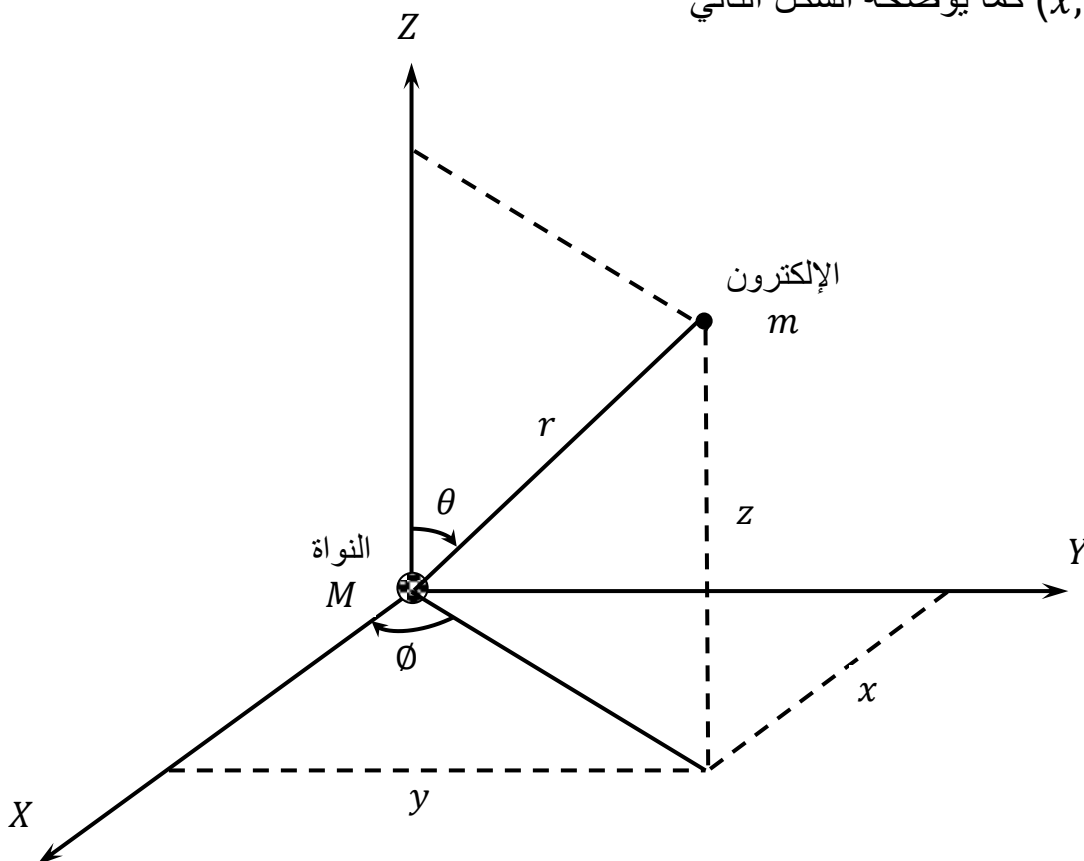
الفصل الرابع

المعالجة الكمية لذرة الهيدروجين

Quantum Theory of Hydrogen Atom

ذرة الهيدروجين (أو شبيهات ذرة الهيدروجين) هي أبسط أنواع الذرات ، تتكون من جسيمين فقط: إلكترون يدور حول النواة منجذباً إليها بواسطة قوة الجذب الكهربائية الكولومية. لمعرفة صفات هذا الإلكترون المختلفة (الطاقة، السرعة، المكان الذي يتواجد فيه، الخ) يجب علينا القيام بحل معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين.

بفرض أن النواة لذرة الهيدروجين و التي لها كتلة (M) و شحنة (Ze) تقع في نقطة الأصل ، أما الإلكترون ذو الكتلة (m) و شحنة (e) يوجد في الفراغ عند نقطة لها إحداثيات (x, y, z) كما يوضحه الشكل التالي



و نلاحظ من الشكل ما يلي:

$$x = r \sin\theta \cos\phi, \quad y = r \sin\theta \sin\phi, \quad z = r \cos\theta$$

و تكون معادلة شرودنجر في الأبعاد الثلاثة لهذه الحالة هي

$$\nabla^2\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \quad (1)$$

حيث $\psi = \psi(x, y, z)$ هي الدالة الذاتية للإلكترون و $\mu = \frac{Mm}{M+m}$ هي الكتلة المختزلة للإلكترون و النواة و ∇^2 هو مؤثر لابلاس و الذي يعطى بالعلاقة:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

و حيث أن الإلكترون يتحرك تحت جهد كولوم فإن الجهد V يعطى بالعلاقة

$$V = -k_e \frac{Ze^2}{r}$$

و بالتالي تكتب معادلة شرودنجر على الشكل التالي

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0$$

و بالتعويض عن قيمة كل من x و y و z بدلالة r و θ و ϕ تصبح معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين في الإحداثيات القطبية هي

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (2)$$

لتبسيط هذه المعادلة لحلها يجب استخدام طريقة فصل المتغيرات أى تحويلها إلى ثلاث معادلات مختلفة و يتم ذلك بفرض أن الدالة الموجية ψ تتكون من حاصل ضرب ثلاث دوال أخرى ، الأولى \mathcal{R} و هي دالة فى r فقط و الثانية Θ و هي دالة فى θ فقط و الثالثة Φ و هي دالة فى ϕ فقط حيث

$$\psi(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

و بالتالي يكون

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = \Theta \Phi \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \mathcal{R} \Phi \frac{\partial \Theta}{\partial \theta}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = \mathcal{R} \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}$$

بالتعويض عن ذلك في معادلة شرودنجر في الإحداثيات القطبية و القسمة على $\mathcal{R} \Theta \Phi$ ينتج

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{1}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r} \right) \right] + \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{1}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \right] + \left[\frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) = 0$$

بالضرب في $r^2 \sin^2 \theta$ و إعادة ترتيب المعادلة نحصل على

$$-\frac{\sin^2 \theta}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r} \right) - \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - r^2 \sin^2 \theta \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) = \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

نلاحظ في المعادلة السابقة أن الطرف الأيسر دالة في r و θ فقط و الطرف الأيمن دالة في ϕ فقط و يتحقق ذلك بتساوي الطرفين لمقدار ثابت و الذي ليكن $-m_l^2$ و بالتالي نحصل على

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m_l^2$$

$$\frac{\sin^2 \theta}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + r^2 \sin^2 \theta \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) = m_l^2$$

بالقسمة على $\sin^2 \theta$ و إعادة ترتيب المعادلة السابقة نحصل على

$$\frac{1}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) = \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right)$$

نلاحظ ايضا في المعادلة السابقة أن الطرف الأيسر دالة في هي دالة في r و الطرف الأيمن دالة في θ فقط و يتحقق ذلك بتساوي الطرفين لمقدار ثابت و الذي وضع ليكون $l(l+1)$ و بالتالي نحصل على

$$\frac{1}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) = l(l+1)$$

$$\frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) = l(l+1)$$

و بالتالي تم فصل المعادلة الرئيسية لشروندجر إلى ثلاث معادلات منفصلة كل معادلة دالة في متغير مختلف كما يلي

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + k_e \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] r^2 \mathcal{R} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 \quad (4)$$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m_l^2 \Phi = 0 \quad (5)$$

و يعتبر حل الثلاث معادلات السابقة هو حل لمعادلة شروندجر لذرة الهيدروجين و تعتبر المعادلة الأولى دالة في نصف القطر لذلك تسمى المعادلة القطرية (Radial equation) ، أما المعادلتين الاخرتين فهما دالتين في الزوايا و يعرفتا بالمعادلات الزاوية (Angular equations)

1- حل المعادلة القطرية Solution of radial equation

بعد إجراء التفاضل الموضح في الحد الأول للمعادلة و الأخذ في الاعتبار الخصائص العامة للمستوى الأرضي للطاقة (ground state) و على أن $l = 0$ تتحول المعادلة على النحو التالي

$$r^2 \frac{d^2 \mathcal{R}}{dr^2} + 2r \frac{d\mathcal{R}}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right] r^2 \mathcal{R} = 0$$

$$\frac{d^2 \mathcal{R}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\mathcal{R}}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right] \mathcal{R} = 0$$

و تعتبر \mathcal{R} دالة اسية يمكن كتابتها على الشكل التالي

$$\mathcal{R}(r) = C e^{-r/a_0}$$

حيث C و a_0 مقداران ثابتان حيث a_0 وحدات الطول

$$\frac{d\mathcal{R}}{dr} = -\frac{C}{a_0} e^{-r/a_0} = -\frac{\mathcal{R}}{a_0}$$

$$\frac{d^2 \mathcal{R}}{dr^2} = \frac{C}{a_0^2} e^{-r/a_0} = \frac{\mathcal{R}}{a_0^2}$$

بالتعويض عن ذلك في المعادلة نحصل على

$$\left[\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{r} \frac{1}{a_0} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + k_e \frac{Ze^2}{r} \right) \right] \mathcal{R} = 0$$

و حيث \mathcal{R} لا يمكن ان تكون صفر فان ما بين الأقواس يساوي صفر و الذي يعاد ترتيبه على النحو التالي

$$\left(\frac{1}{a_0^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E \right) + \left(\frac{2\mu k_e Ze^2}{\hbar^2} - \frac{2}{a_0} \right) \frac{1}{r} = 0$$

و هذه المعادلة تتحقق لكل قيم r من 0 إلى ∞ بتساوي ما بين الأقواس بالصفر ، و بالنسبة للقوس الأول نحصل على

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} = -\frac{\mu k_e^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV} = E_1$$

و هي نفس قيمة طاقة المستوى الأول المحسوبة بواسطة بور و على ذلك يكون الشكل العام للعلاقة التي تعطي طاقة المستويات لذرة الهيدروجين و شبيهاتها هي

$$E_n = -\frac{\mu k_e^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

حيث n هو عدد كم يسمى "عدد الكم الرئيسي" **Principal Quantum Number** ويأخذ

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots, \infty$$

و بالنسبة للقوس الثاني نحصل على

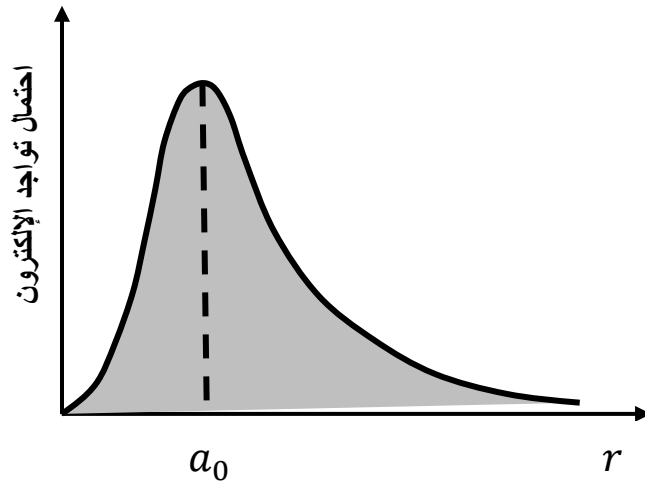
$$\frac{2}{a_0} = \frac{2\mu k_e Z e^2}{\hbar^2}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu k_e Z e^2} = 0.53\text{\AA} = r_1$$

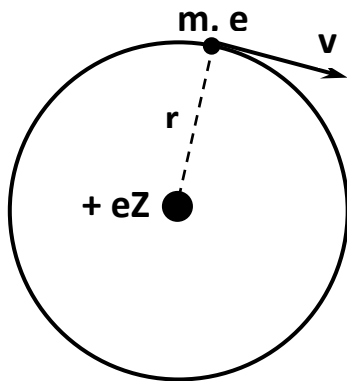
و هي نفس القيمة المحسوبة بواسطة بور للمدار الأول لذرة الهيدروجين و بالمثل تكتب العلاقة العامة و التي تعطي انصاف الأقطار لمستويات ذرة الهيدروجين بـ

$$a_n = \frac{n^2 \hbar^2}{\mu k_e Z e^2}$$

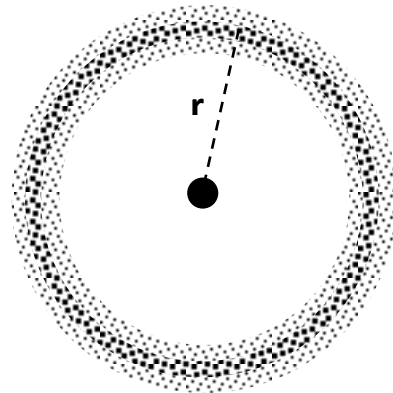
تم أيضا باستخدام ميكانيكا الكم حساب احتمال تواجد الإلكترون في مكان ما و قد بينت الحسابات بالنسبة للمدار الأول على سبيل المثال أن احتمال تواجد الإلكترون متاح لقيم r من 0 إلى ∞ و تبلغ اقصى قيمة لها عند a_0 و يوضح الشكل المقابل توزيع احتمال تواجد الإلكترون مع المسافة.



و بمقارنة هذه النتيجة مع النتيجة التي حصل عليها بور ، نلاحظ كما يتضح من الشكل التالي أن الإلكترون في نموذج بور له مسار محدد نصف قطره a_0 لكن مع ميكانيكا الكم يحتمل للإلكترون أن يتواجد في أماكن عدة و تبلغ اقصاها عند a_0 و هذا ما يعرف بالسحابة الإلكترونية.



نظرية بور



ميكانيكا الكم

2- حل المعادلات الزاوية Solution of angular equations

يمكن حل معادلة (4) بوضع قيم l تبدأ من 0 إلى $n - 1$ أى

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, (n - 1)$$

وهذا يعطي عدد n من الحلول للدالة الزاوية Θ لكل حل نصف قطري للدالة \mathcal{R} و يعرف العدد l بـ "عدد الكم المداري Orbital Quantum Number" أو "عدد كم كمية التحرك الزاوي المداري Angular Momentum Quantum Number" و يحدد هذا العدد الكمي مدى تغير الدالة الموجية الرئيسية ψ بتغير الزاوية θ لقيم ثابتة من r, ϕ حيث يكون التغير فى الدالة ψ شديداً للقيم الكبيرة من l و يكون التغير بطئاً للقيم الصغيرة من l أما $l = 0$ فتعني أن الدالة ψ لا تتغير مع الزاوية θ و بالتالي تكون للدالة $\Theta(\theta)$ نفس القيمة فى جميع الاتجاهات.

ولقد جرت العادة فى علم الطيف استخدام رموز خاصة للدلالة على حالات الطاقة حيث يكتب العدد الكم الرئيسي n متبوعاً بأحد الحروف الآتية و التي تدل على عدد كم كمية التحرك الزاوي المداري l .

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$$

$$s, p, d, f, g, h$$

ولقد اشتقت هذه الحروف من تصنيف الأطياف إلى مجموعات طيفية هي كما يلي:

sharp حادة $\rightarrow s$ الرئيسية $\rightarrow p$ principal

diffused منتشرة $\rightarrow d$ أساسية $\rightarrow f$ fundamental

و هي مجموعات ظهرت قبل وضع النموذج الذري ، اما الحروف الأخرى g, h هي الحروف التالية للحرف f فى الترتيب الأبجدي. بالتالي يمكن التعبير عن مستوى الطاقة بكتابة الرقم الدال على عدد الكم الرئيسي على يسار الحرف الدال على عدد كم كمية التحرك الزاوي المداري. فمثلاً

$3s$ تدل على أن عدد الكم الرئيسي $n = 3$ ، و عدد الكم المداري $l = 0$

$2p$ تدل على أن عدد الكم الرئيسي $n = 2$ ، و عدد الكم المداري $l = 1$

4d تدل على أن عدد الكم الرئيسي $n = 4$ ، و عدد الكم المداري $l = 2$

أما بالنسبة للمعادلة (5) و التي لها معادلة تفاضلية يكون حلها بسيط على النحو التالي

$$\Phi(\varnothing) = Ae^{im_l\varnothing}$$

حيث A مقدار ثابت و الذي يمكن معرفة قيمته بتطبيق شرط إحادية القيمة (التعادل) كما يلي :

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varnothing) \cdot \Phi(\varnothing) d\varnothing = 1 \quad \int_0^{2\pi} Ae^{-im_l\varnothing} \cdot Ae^{im_l\varnothing} d\varnothing = 1$$

$$A^2 \int_0^{2\pi} d\varnothing = 1 \quad A^2(2\pi) = 1 \quad A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

نلاحظ أننا في التكامل أعلاه جعلنا حدود التكامل من 0 إلى 2π ، لأن هذه هي الحدود التي تتحرك فيها الزاوية \varnothing ، و حيث أن الحركة متكررة كل دورة و أن الدالة الموجية يجب أن تكون أحادية القيمة، فإن قيمة الدالة Φ عند الزاوية \varnothing يجب أن تكون مساوية لقيمتها عند الزاوية $\varnothing + 2\pi$ ، لأنهما في حقيقة الأمر نفس الزاوية. رياضيا و يكتب ذلك كما يلي:

$$\Phi(\varnothing) = \Phi(\varnothing + 2\pi)$$

$$Ae^{im_l\varnothing} = Ae^{im_l(\varnothing+2\pi)} = Ae^{im_l\varnothing} \cdot e^{im_l2\pi}$$

$$e^{im_l2\pi} = 1$$

$$\cos(2\pi m_l) + i \sin(2\pi m_l) = 1$$

$$\cos(2\pi m_l) = 1$$

$$\therefore m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

و يتضح من قيم m_l أنه عدد كم و يعرف بـ "عدد الكم المغناطيسي المداري **Magnetic** و القيمة المطلقة $|m_l|$ له يجب أن تكون اقل من أو تساوي l لذلك يكتب على الشكل

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm \ell$$

$$m_\ell = -\ell, -(\ell - 1), -(\ell - 2), \dots, -1, 0, 1, \dots, (\ell - 1), \ell$$

و تعني القيم الكبيرة لقيمة $|m_\ell|$ المطلقة أن الدالة ψ تتغير بشدة مع \emptyset و القيم الصغيرة تعني أنها تتغير ببطء أما $m_\ell = 0$ فتعني أن الدالة لا تتغير.

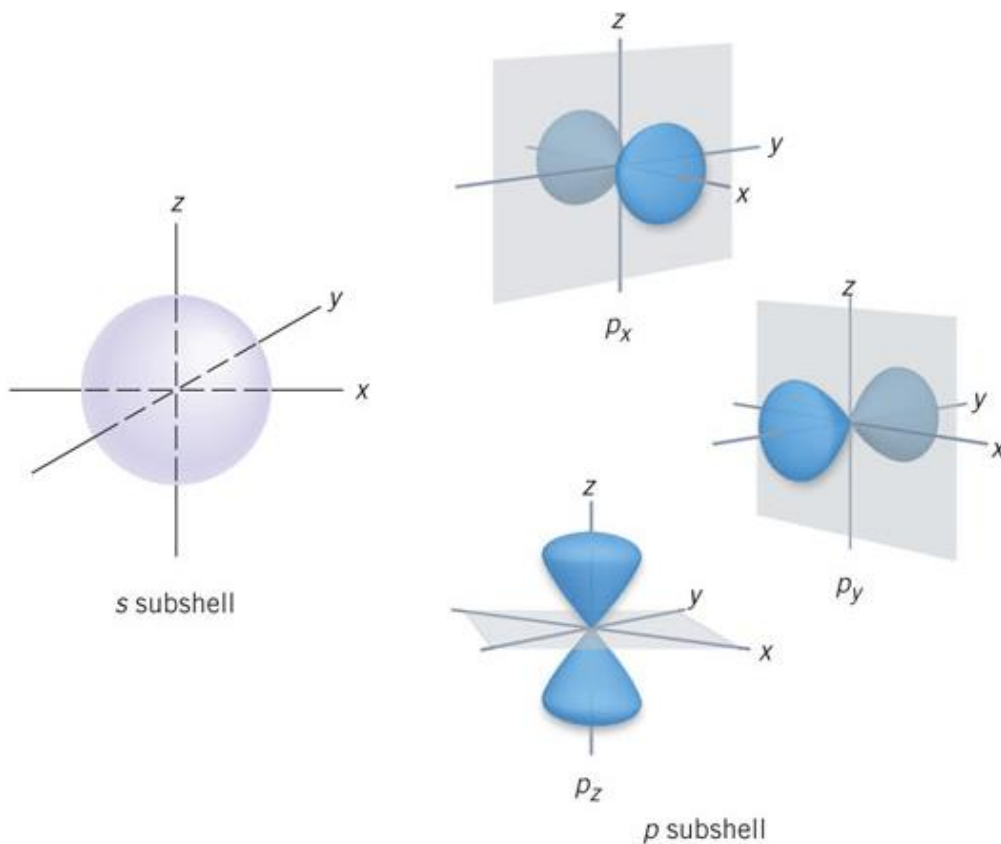
وبالتالي فإن دراسة ذرة الهيدروجين باستخدام ميكانيكا الكم قد قدمت ثلاث اعداد كم n, ℓ, m_ℓ بدلا من عدد الكم الرئيسي n في نظرية بور. و نلاحظ مما سبق أن ميكانيكا الكم أوضحت أن لكل قيمة من n عدد n من قيم ℓ و لكل قيمة من ℓ عدد $(2\ell + 1)$ من m_ℓ و هذا يعني أن لكل قيمة من n عدد n^2 من الحلول للدالة الموجية و عدد الحلول يعني أن مستوى الطاقة الرئيسي ينفسخ إلى عدد من مستويات الطاقة الفرعية مساوي لعدد الحلول كما يوضحه الجدول التالي.

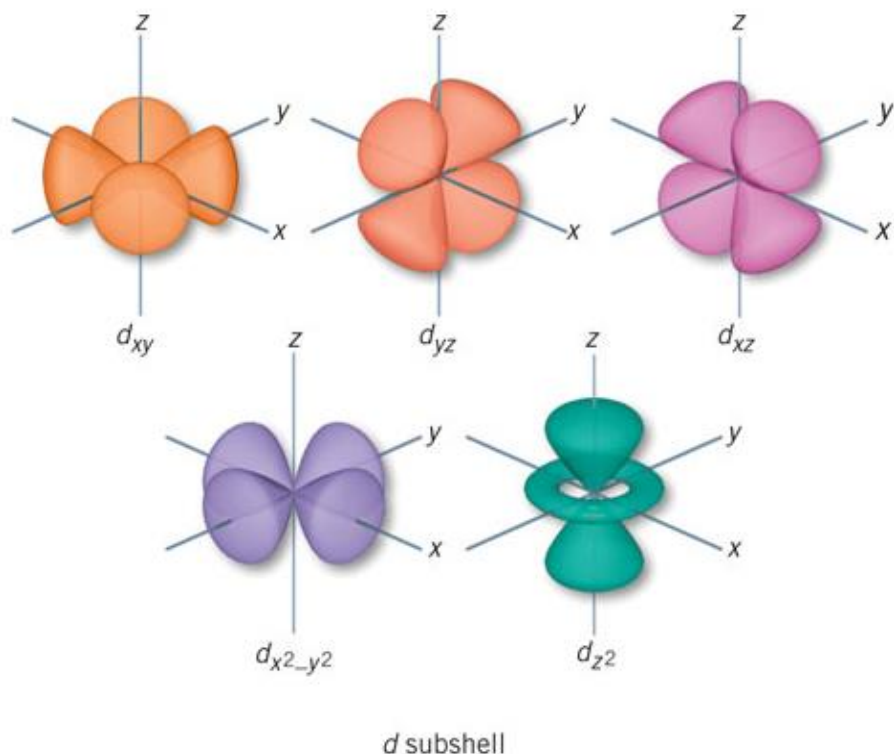
n	ℓ	m_ℓ	(n, ℓ, m_ℓ)	العدد الكلي لمستويات الطاقة
1	0	0	(1, 0, 0)	1
2	0	0	(2, 0, 0)	4
	1	-1, 0, 1	(2, 1, -1), (2, 1, 0), (2, 1, 1)	
3	0	0	(3, 0, 0)	9
	1	-1, 0, 1	(3, 1, -1), (3, 1, 0), (3, 1, 1)	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	(3, 2, -2), (3, 2, -1), (3, 2, 0), (3, 2, 1), (3, 2, 2)	
4	0	0	(4, 0, 0)	16
	1	-1, 0, 1	(4, 1, -1), (4, 1, 0), (4, 1, 1)	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	(4, 2, -2), (4, 2, -1), (4, 2, 0), (4, 2, 1), (4, 2, 2)	
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	(4, 3, -3), (4, 3, -2), (4, 3, -1), (4, 3, 0), (4, 3, 1), (4, 3, 2), (4, 3, -3)	

كثافة الاحتمال (السحابة الإلكترونية)

تصور بور في نموذج الذري أن الإلكترون يدور حول النواة في مسار دائري ثم اقترح سمر فيلد أن هذا المدار يكون على شكل قطع ناقص وأن الدائرة حالة خاصة و يعني ذلك أنه

كان من الممكن تحديد كل من مكان و كمية تحرك الإلكترون معا و في نفس اللحظة ، و لكن هذا يتعارض مع ميكانيكا الكم و التي قامت على عدة مبادئ و التي منها مبدأ اللايقين لهيزنبرج (Uncertainty Principal, Werner Heisenberg) و الذي أوضح أنه من المستحيل تحديد مكان و كمية تحرك الإلكترون في نفس الوقت. لذلك تم دراسة مكان الإلكترون بحساب احتمال وجود الإلكترون في مكان ما أى حساب كثافة الشحنة السالبة حول النواة و التي تعرف بالسحابة الإلكترونية و التي تتكون من مواضع وجود الإلكترون حول النواة. ولقد تم استخدام الدوال الموجية لحساب كثافة الاحتمال على أبعاد مختلفة من النواة و عند زوايا مختلفة ولقد وجد أن هذه الكثافة أو السحابة تتخذ أشكالا مختلفة و يسمى الفراغ المحيط بالنواة و الذي يتواجد فيه هذه الكثافة الإلكترونية العالية بالأوربيتالات فمثلا و كما ذكرنا سابقا أنه عند $l = 0$ و $m_l = 0$ فإن الدالة الموجية ψ لا تتوقف على الزوايا θ و ϕ ، لذلك يكون الأوربيتال **s** كرويا في الشكل و متماثل حول النواة بينما في الأوربيتال **p** تتخذ فيه الكثافة الإلكترونية شكل كمثريتين متقابلتين عند الرأس. أما باقي الأوربيتالات فتأخذ أشكالا متباينة في الفراغ حول النواة كما يوضحه الشكل التالي كمثل لبعض الأوربيتالات.





مغزلية الإلكترون

لقد قدمت ميكانيكا الكم ثلاث اعداد كم (n, l, m_l) لشرح التركيب الذري لكن استمرار العلماء لتفسير الطيف الذري وجدوا أن الثلاث اعداد الكم غير كافية لتفسير كل الانتقالات الملاحظة عمليا فعلى سبيل المثال كان يعتقد أن العديد من الانتقالات هي عبارة عن خطوط طيفية مفردة لكن باستخدام مطياف ذو قوة تحليلية عالية أن الخطوط ليست مفردة بل مزدوجة أى تتكون من خطين متقاربين جدا في الطول الموجي مثل خطين الـ D في طيف الصوديوم و اللذان لهما طول موجي متقارب $(\lambda_1 = 5890\text{\AA}, \lambda_2 = 5896\text{\AA})$ وهو ما يعرف بالتركيب الدقيق للخطوط الطيفية و قد أوضحت القياسات الطيفية أن هذ يحدث دون تسليط مجال مغناطيسي خارجي على الذرة مما يعني وجود خاصية أخرى في البنية الذرية لا يمكن وصفها بالأعداد الكمية الثلاثة (n, l, m_l) .

لذلك اقترح كل من Uhlenbeck و Goudsmit عام 1925 و في نفس التوقيت و بشكل منفصل كل من Urey و Bichowsky وجود حركة مغزلية للإلكترون حول نفسه أي أن الإلكترون يدور أو يلف حول محوره إما في اتجاه عقارب الساعة أو عكس عقارب الساعة كما موضح في الشكل التخطيطي التالي.



و هذا يعني أن للإلكترون كمية تحرك زاوية مغزلية **Spin Angular Momentum** إلى جانب كمية الحركة الزاوية المدارية و تعتمد على عدد كم m_s يسمى "عدد الكم المغناطيسي المغزلي" **Spin Magnetic Quantum Number** ويأخذ قيمتين فقط

$$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

أعداد الكم الأربعة

يتضح مما سبق أننا لدينا حتى الآن اربع أعدادا من الكم و التي تتحكم في وصف التركيب الذري و هم كما يلي:

(1) عدد الكم الرئيسي (n) Principal Quantum Number

هو عدد الكم الذي يحدد رقم "غلاف الطاقة الرئيسي" أو "مستوى الطاقة الرئيسي" و يأخذ القيم التالية:

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots, \infty$$

(2) عدد الكم المداري (l) Orbital Quantum Number

هو عدد الكم الذي يحدد عدد "مستويات الطاقة الفرعية" أو "تحت الأغلفة الرئيسية" و يأخذ القيم التالية:

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, (n - 1)$$

و يمكن التعبير عن القيم المختلفة له بالحروف التالية.

$$l = 0 , 1 , 2 , 3 , 4 , 5$$

$$s , p , d , f , g , h$$

(3) عدد الكم الممغناطيسي المداري (m_l) Orbital Magnetic Quantum Number

هو عدد الكم الذي يحدد عدد "الاوربيتالات" أو "الأفلاك" في مستوى الطاقة الفرعي و يأخذ القيم التالية:

$$m_l = -l, -(l - 1), -(l - 2), \dots, -1, 0, 1, \dots, (l - 1), l$$

حيث أن عدد الاوربيتالات في المستوى الفرعي يساوي $(2\ell + 1)$ و عدد الاوربيتالات في الغلاف الرئيسي هو (n^2) .

(4) عدد الكم المغناطيسي المغزلي (m_s) Spin Magnetic Quantum Number

هو عدد الكم الذي يحدد اتجاه لف الإلكترون حول نفسه و يأخذ القيم التالية:

$$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

عدد الكم الرئيسي (n)	عدد الكم المداري (ℓ)	عدد الكم المغناطيسي (m_ℓ)	عدد الاوربيتالات في المستوى الفرعي ($2\ell + 1$)	اسم الاوربيتالات	عدد الاوربيتالات في الغلاف الرئيسي (n^2)
1	0	0	1	1s	1
2	0	0	1	2s	4
	1	-1, 0, 1	3	2p	
3	0	0	1	3s	9
	1	-1, 0, 1	3	3p	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	3d	
4	0	0	1	4s	16
	1	-1, 0, 1	3	4p	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	4d	
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7	4f	

الفصل الخامس

النموذج المتجهي للذرة

The Vector Model of Atom

لقد درسنا في الفصول السابقة النماذج المختلفة للذرة و المقترحة من علماء الفيزياء متبوعا بالمعالجة الكمية للذرة و قد اتت المحاولات بثمارها حيث أنهم قدموا تصور واضح المعالم للتركيب الذري و لكن مع ذلك كان هناك العديد من الاعتراضات و الأسئلة المطروحة و التي تحتاج إلى التفسير فمثلا ما هي القواعد التي تحكم الانتقالات المختلفة بين مستويات الطاقة ؟ هل كل الانتقالات المحتملة مسموحة أم لا ؟

لذلك تم استخدام النموذج المتجهي للذرة للتعبير عن قواعد الانتقاء (الاصطفاء) ، و التي وضعت أصلا على أساس تجريبي بواسطة الميكانيكا الموجية ، بدلالة التغيرات الممكنة في أعداد الكم المتصلة أتصالا وثيقا بالتركيب الذري. هذه الطريقة المبسطة للتعبير عن قواعد الانتقاء مكنتنا أن نحصل على أفضل التفسيرات لكثير من النقاط المتعلقة بالظواهر الذرية المختلفة.

3- كمية التحرك الزاوية المدارية Orbital Angular Momentum

لقد اشار بور أن الإلكترون في ذرة الهيدروجين يتحرك في مسار دائري بسرعة زاوية (ω) و التي تعتبر كمية متجهه و تمثل بمتجه ينطبق على محور الدوران و عموديا على مستوى المدار و بالتالي يكون للإلكترون كمية تحرك زاوية و التي تعطى طبقا لفروض بور بالعلاقة:

$$L = I\omega = mvr = n\hbar$$

أى أن كمية التحرك الزاوية طبقا لفرض بور عبارة عن مضاعفات لثابت بلانك المختزل.

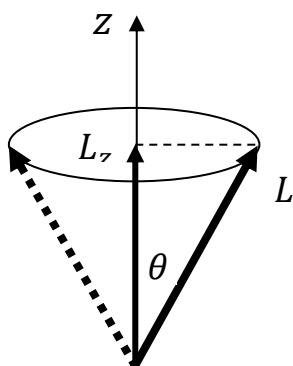
كمية التحرك الزاوية أيضا كمية متجهه و تمثل بمتجه ينطبق على محور الدوران و قد وضحت ميكانيكا الكم أنها تمثل بعدد الكم المداري بالعلاقة التالية:

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar$$

تدل المعادلة السابقة أن كمية التحرك الزاوية المدارية تكون بدلالة ℓ و ليس n كما أوضح بور و هذا يعني أن L المحسوبة طبقا لنظرية بور لها قيمة واحدة لكل قيمة من n بينما لها عدد n من القيم لكل قيمة من ℓ .

أوضحت ميكانيكا الكم أيضا أن مركبة كمية الحركة الزاوية المدارية للإلكترون في اتجاه z مكماه و تأخذ قيمة محددة فقط هي $m_l\hbar$ و هو ما يعرف بتكميم المكان أو التكميم الفراغي لكمية التحرك الزاوية *space quantization of the angular momentum*.

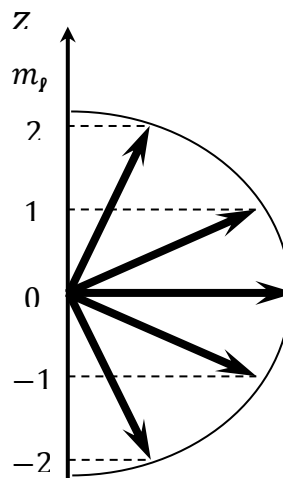
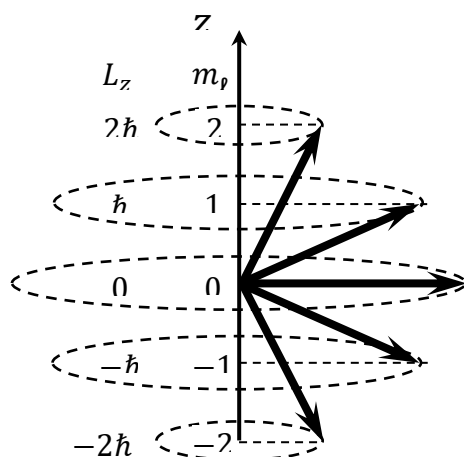
$$L_z = m_l\hbar$$



إذا كان المتجه L يدور حول محور z صانعا زاوية θ كما موضح في الرسم المقابل فان الزاوية تعطى بالعلاقة

$$\cos\theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_l\hbar}{\sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar} = \frac{m_l}{\sqrt{\ell(\ell + 1)}}$$

و حيث ان m_l تأخذ عدد من القيم تساوي $(2\ell + 1)$ فإن متجه كمية التحرك الزاوية L يأخذ عدد $(2\ell + 1)$ من التوجيهات الفراغية و التي لها نفس العدد من المساقط L_z و يوضح الرسم التالي ذلك لـ $\ell = 2$.



مثال (1)

أوجد قيم كمية التحرك الزاوية المدارية للقيم $\ell = 0, 1, 2, 3$ ثم وضح بالرسم التوجيهات الفراغية لها في كل حالة.

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)\hbar}$$

$$\ell = 0$$

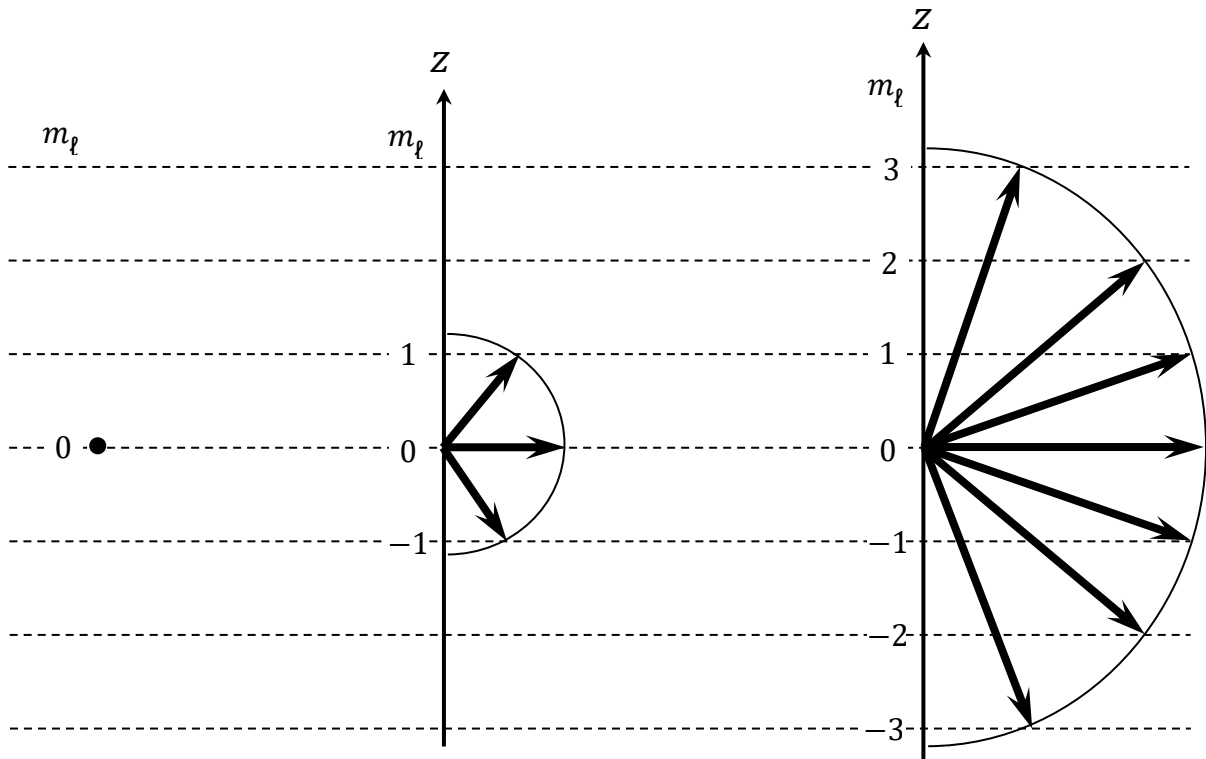
$$\ell = 1$$

$$\ell = 3$$

$$L = 0$$

$$L = \sqrt{2}\hbar$$

$$L = \sqrt{12}\hbar$$



حل الجزء الخاص بـ $\ell = 2$ قد تم رسمه سابقا قبل المثال و تكون $L = \sqrt{6}\hbar$

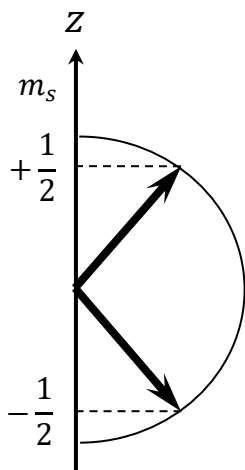
4- كمية التحرك الزاوية المغزلية Spin Angular Momentum

لقد أثبت ديراك 1928 نظريا بمعالجته الكمية باستخدام ميكانيكا الكم وجود مغزلية الإلكترون وبصورة مطابقة للوجود الافتراضي و الذي افترضه جودسميث و قد وجد أن القيمة العددية لمتجه كمية التحرك الزاوية المغزلية S يعطى بعلاقة مشابهة للعلاقة التي تعطي القيمة العددية لمتجه كمية التحرك الزاوية المدارية L حيث

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

حيث s هو عدد الكم المغزلي *spin quantum number* و بالتالي فان القيمة العددية للمتجه S تساوي $(S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar)$ و بالمثل كما في حالة كمية التحرك الزاوية المدارية أوضحت ميكانيكا الكم ايضا أن مركبة كمية الحركة الزاوية المغزلية للإلكترون في اتجاه z مكماه و تأخذ قيما محددة فقط هي $m_s\hbar$ و هو أيضا تكميم فراغي لكمية التحرك الزاوية المغزلية *space quantization of the spin angular momentum*.

$$S_z = m_s\hbar$$



ويوضح الرسم المقابل التوجيه الفراغي لكمية التحرك الزاوية المغزلية و تكون القيمة هي

$$S = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

مثال (2)

احسب التوجيهان الفراغيان المتاحان لمتجه كمية التحرك الزاوية المغزلي S بالنسبة لاتجاه المجال المغناطيسي

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad \text{where } s = \frac{1}{2}$$

Also $S_z = m_s\hbar \quad \text{where } m_s = \pm \frac{1}{2}$

و يمكن حساب الزاوية التي تعطي التوجيه الفراغي من العلاقة :

$$\cos\theta = \frac{S_z}{S} = \frac{m_s\hbar}{\sqrt{s(s+1)}\hbar} = \frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}$$

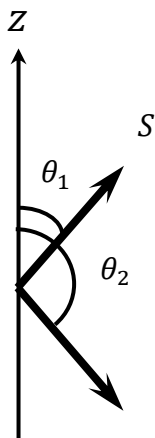
For $m_s = +\frac{1}{2}$

$$\cos\theta_1 = \frac{\frac{1}{2}}{\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}} = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0.577 \quad \rightarrow \quad \theta_1 = 54^\circ 45'$$

For $m_s = -\frac{1}{2}$

$$\cos\theta_2 = \frac{-\frac{1}{2}}{\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}} = -\frac{1}{\sqrt{3}} = -0.577 \quad \rightarrow \quad \theta_2 = 125^\circ 15'$$

و بالتالي يكون التوجيه الفراغي كما بالشكل التالي



5- كمية التحرك الزاوية الكلية Total Angular Momentum

عندما نتحدث عن كمية التحرك الزاوية لذرة ما فإنه يجب الحديث عن كميات التحرك الزاوية للإلكترونات التي تدور حول النواة بنوعها المدارية و المغزلية و هذا يعني أن كمية التحرك الزاوية الكلية لأي ذرة هي عبارة عن مجموع كمية التحرك الزاوية المدارية و كمية التحرك الزاوية المغزلية للإلكترونات. و بالتالي يكون متجه كمية التحرك الزاوية الكلية للذرة (**Total Angular Momentum vector**) **J** هو عبارة عن مجموع متجه كمية التحرك الزاوية المدارية **L** و متجه كمية التحرك الزاوية المغزلية **S** كما توضحه المعادلة التالية :

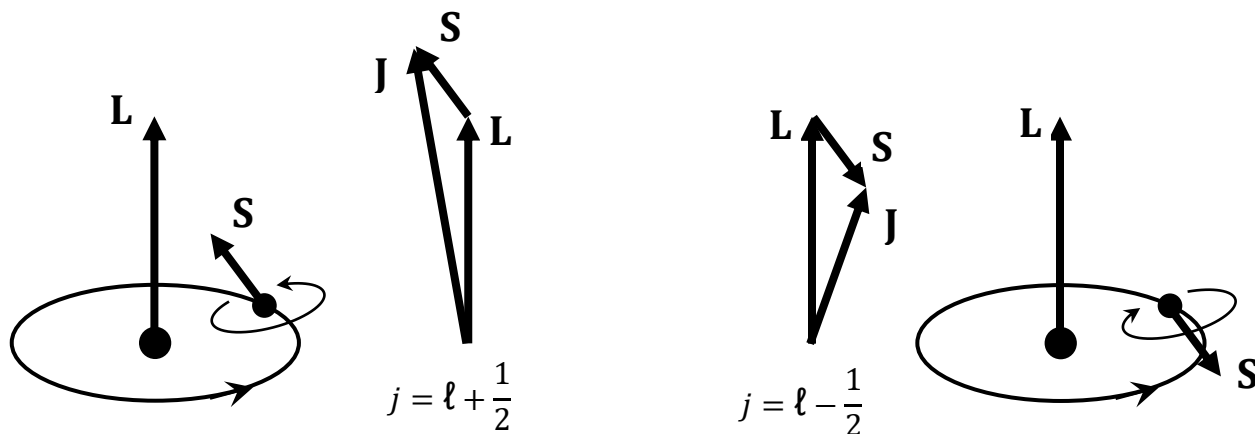
$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

و بالمثل تعطى القيمة العددية للمتجه **J** بمعادلة مماثلة للقيم العددية للمتجهات **L** و **S** كما يلي:

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

حيث يسمى j بعدد كم كمية التحرك الزاوية الكلية (*total angular momentum quantum number*) مما يدل على أن المتجه **J** يأخذ قيم محددة أى مكتم مثل **L** و **S**.

الرسم التالي يوضح التمثيل و الجمع الاتجاهي لمتجه كمية التحرك الزاوية المدارية **L** و متجه كمية التحرك الزاوية المغزلية **S**.



ويكون عدد الكم كمية التحرك الكلية يساوي المجموع الجبري لعدد الكم المغزلي و عدد الكم المداري.

$$j = \ell + \frac{1}{2} \qquad j = \ell - \frac{1}{2}$$

1- For $\ell = 1$, $j = \frac{3}{2}$ or $j = \frac{1}{2}$

2- For $\ell = 2$, $j = \frac{5}{2}$ or $j = \frac{3}{2}$

و يوضح ذلك أن المستويات المقابلة لـ ℓ و التي كان يفترض انها مستويات فردية تكون مستويات مزدوجة ماعدا المستوى s و الذي له $\ell = 0$ و عندها تكون $j = \frac{1}{2}$

كما استخدمت القيمة المعبرة عن j في الرموز المعبرة عن مستويات الطاقة كما يلي

$n = 1$, $\ell = 0$, $j = \frac{1}{2}$ the state will be $1S_{1/2}$

$n = 2$, $\ell = 0$, $j = \frac{1}{2}$ the state will be $2S_{1/2}$

$n = 2$, $\ell = 1$, $j = \frac{3}{2}$ or $\frac{1}{2}$ the state will be $2P_{3/2}$ and $2P_{1/2}$

و لمتجه كمية التحرك الزاوية الكلية توجيه فراغي ايضا و له مسقط في اتجاه المجال و يكون مكتم أيضا بالعلاقة الآتية

$$J_z = m_j \hbar$$

حيث m_j هو عدد الكم المغناطيسي لكمية التحرك الزاوية الكلية *magnetic total angular momentum quantum number* و هو يحدد القيم العددية لمسقط المتجه **J** في اتجاه المجال و يأخذ عدد $(2j + 1)$ من القيم لكل قيمة من j أي من $+j$ إلى $-j$ و غير متضمنة القيمة الصفرية كما يلي

$$m_j = -j, (-j + 1), \dots, (+j - 1), +j$$

و بتطبيق قانون الجتا ليجاد المتجه المحصلة J للمتجهين L و S يمكن حساب الزاوية بين المتجهين L و S .

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2LS \cos\theta$$

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2 \quad L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2 \quad S^2 = s(s+1)\hbar^2$$

$$j(j+1)\hbar^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2 + s(s+1)\hbar^2 + 2\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{s(s+1)}\hbar^2 \cos\theta$$

$$\cos\theta = \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{s(s+1)}}$$

مثال

بالنسبة لإلكترون موجود في المستوى الفرعي d لذرة احادية الإلكترون ، احسب ما يلي:

- أ- قيمة كل من s و l و j
- ب- قيمة كل من L و S و J
- ت- الزوايا الممكنة بين L و S

الحل

أ- للمستوى الفرعي d نجد

$$\ell = 2 \quad , \quad s = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \therefore j = 2 + \frac{1}{2} = \frac{5}{2} \quad \text{and} \quad j = 2 - \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

معنى ذلك أن هناك مستويين ، مستوى لـ $j = \frac{5}{2}$ ومستوى آخر لـ $j = \frac{3}{2}$

ب- العلاقات التي تعطي كل من L و S و J

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar \quad S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

$$\text{For } \ell = 2 \quad L = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

$$\text{For } s = 1/2 \quad S = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

$$\text{For } j = \frac{5}{2} \quad J = \sqrt{\frac{5}{2} \left(\frac{5}{2} + 1 \right)} \hbar = \frac{\sqrt{35}}{2} \hbar$$

$$\text{For } j = \frac{3}{2} \quad J = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right)} \hbar = \frac{\sqrt{15}}{2} \hbar$$

ت- لايجاد الزوايا يجب أن نطبق معادلة الزاوية و هي

$$\cos\theta = \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{s(s+1)}}$$

$$\text{For } \ell = 2 \quad , \quad s = \frac{1}{2} \quad , \quad j = \frac{5}{2}$$

$$\cos\theta = \frac{\frac{5}{2} \left(\frac{5}{2} + 1 \right) - 2(2+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)}{2\sqrt{2(2+1)}\sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)}} = \frac{\sqrt{2}}{3}$$

$$\therefore \theta = \cos^{-1} \frac{\sqrt{2}}{3} = 42^\circ$$

$$\text{For } \ell = 2 \quad , \quad s = \frac{1}{2} \quad , \quad j = \frac{3}{2}$$

$$\cos\theta = \frac{\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right) - 2(2+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)}{2\sqrt{2(2+1)}\sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)}} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\therefore \theta = \cos^{-1} \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \right) = 135^\circ$$

ترابط كمية التحرك الزاوية Spin-Orbit Coupling

هو ترابط مغزلي مداري أو ترابط العزم المغزلي بالعزم المداري أي هي عملية ترابط العزم المغزلي للإلكترون بالعزم المغزلي لمداره في الذرة لتكوين محصلة تشكل العزم الزاوي الكلي. و هناك نوعين من الترابط أو الاقتران و التي تتراكب بها متجهات كميات التحرك للإلكترونات لتعطي المتجهات الممثلة للذرة ككل و هما

$$1- \text{ ترابط } L - S$$

$$2- \text{ ترابط } J - J$$

1- ترابط $L - S$ (ترابط راسل ساندرز)

يحدث هذا النوع من الترابط في الذرات الخفيفة (وهي بصفة عامة ذات عدد ذري أقل من 30) حيث

- تتراكب جميع متجهات العزوم المغزلية للإلكترونات s_i ليكونوا سويا محصلة للعزم المغزلي الكلي S .

$$S = \sum_i s_i = s_1 + s_2 + s_3 + \dots$$

- تتراكب أيضا جميع متجهات العزوم المدارية للإلكترونات l_i ليكونوا سويا محصلة للعزم المداري الكلي L .

$$L = \sum_i L_i = L_1 + L_2 + L_3 + \dots$$

- ثم يتراكب المتجهان الكليان S و L لتكوين المتجه الكلي J و الذي يمثل متجه كمية التحرك الزاوية الكلية للذرة حيث.

$$J = L + S$$

$$J = (L_1 + L_2 + L_3 + \dots) + (s_1 + s_2 + s_3 + \dots)$$

2- ترابط J - J

يكون الوضع في حالة في الذرات الثقيلة مختلف ، ففي الذرات ذات العدد الذري الكبير أي ذات شحنة كبيرة في النواة يكون التفاعل كمية التحرك المغزلية و كمية التحرك المدارية لكل إلكترون على حده أشد من التفاعل بين الإلكترونات وبعضها ، في تلك الحالة ، تميل كل كمية تحرك مدارية للإلكترون l_i إلى الارتباط بكمية التحرك المغزلية s_i لنفس الإلكترون مكونا كمية تحرك زاوية كلية خاصة بهذا الإلكترون j_i وتتحد مع بعضها مكونة كمية تحرك زاوية كلية J للذرة.

$$J = \sum_i j_i = \sum_i (L_i + s_i)$$

$$J = [(L_1 + s_1) + (L_2 + s_2) + (L_3 + s_3) + \dots]$$

و نلاحظ ما يلي

- أ- قيمة المتجه L تأخذ دائما عدد صحيح حيث أن L تأخذ اعدادا صحيحة
 ب- قيمة المتجه S يمكن أن تكون عدد صحيح أو نصف عدد صحيح متوقفا على عدد الإلكترونات ، فإذا كان عدد الإلكترونات زوجي فإن S تكون عدد صحيح و إذا كان عدد الإلكترونات فردي فإن S تكون عدد نصف صحيح كما يتضح من الجدول التالي

أربع إلكترونات (عدد زوجي)			ثلاث إلكترونات (عدد فردي)		إلكترونين (عدد زوجي)		عدد الإلكترونات
↑	↑	↑	↑	↑	↓	↑	التمثيل لمتجه كمية التحرك المغزلي
↑	↑	↑	↑	↑	↓	↑	
↓	↑	↑	↓	↑	↑	↑	
↓	↓	↑	↓	↑	↑	↑	
0	1	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	0	1	قيمة S

ت- لذلك فإن قيمة المتجه \mathbf{J} يمكن أن تكون عدد صحيح أو نصف عدد صحيح متوقفا على عدد الإلكترونات أيضا ، فإذا كان عدد الإلكترونات زوجي فإن \mathbf{J} تكون عدد صحيح و إذا كان عدد الإلكترونات فردي فإن \mathbf{J} تكون عدد نصف صحيح

قواعد الاختيار (الانتقاء) للانتقالات الإلكترونية

وجد عمليا أن الانتقالات المحتملة للإلكترونات بين مستويات الطاقة المختلفة لا تظهر كخطوط طيفية مما يعني أن هناك انتقالات تحدث و انتقالات لا تحدث أى هناك انتقالات مسموحة و أخرى غير مسموحة و قواعد الاختيار هي التي تحكم الانتقالات المسموحة و الانتقالات الغير مسموحة. و يوجد ثلاث قواعد اختيار تخص أعداد كم كل من كمية التحرك الزاوية المغزلية S و المدارية L و الكلية J .

1- قواعد اختيار أعداد كم كمية التحرك الزاوية المغزلية
الانتقال المسموح هو الانتقال الذي يكون مصحوب بالتغير الآتي

$$\Delta s = 0 \quad \text{or} \quad \Delta m_s = 0$$

معنى ذلك أن الإلكترون الذي يتحرك حركة مغزلية في اتجاه معين (في اتجاه عقارب الساعة أو عكسها) ينتقل من مستوى طاقة إلى آخر بحيث لا يتغير اتجاه حركته المغزلية.

2- قواعد اختيار أعداد كم كمية التحرك الزاوية المدارية
الانتقال المسموح هو الانتقال الذي يكون مصحوب بالتغير الآتي

$$\Delta \ell = \pm 1 \quad \text{or} \quad \Delta m_\ell = 0, \pm 1$$

- امثلة لانتقالات مسموحة

$$s \rightarrow p, \quad p \rightarrow d, \quad d \rightarrow f$$

- امثلة لانتقالات غير مسموحة

$$s \rightarrow s, \quad s \rightarrow d, \quad p \rightarrow f, \quad s \rightarrow f$$

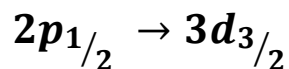
3- قواعد اختيار أعداد كم كمية التحرك الزاوية الكلية
الانتقال المسموح هو الانتقال الذي يكون مصحوب بالتغير الآتي

$$\Delta j = 0, \pm 1$$

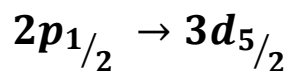
or

$$\Delta m_j = 0, \pm 1$$

- امثلة لانتقالات مسموحة



- امثلة لانتقالات غير مسموحة



و يجب الإشارة إلى انه لا يوجد قيود في الانتقال على العدد الكمي الرئيسي n

التوزيع الإلكتروني

يمكن فهم الشكل الإلكتروني للذرة وكيفية توزيع الإلكترونات على أفلاكها من خلال القواعد الآتية.

أولاً: قاعدة أوف باو:

في الحالة الأرضية للذرة (الحالة التي توجد عليها بطبيعتها) يتبع التوزيع الإلكتروني قاعدة أوف باو . وطبقاً لهذه القاعدة تدخل الإلكترونات في مستويات الطاقة الفرعية ذات الطاقة المنخفضة أولاً ثم تملأ الأعلى منها بعد ذلك ، والترتيب الذي يتم ملئ المستويات الفرعية به كالتالي:

$$n = 1 \text{ (K)}$$

1s

$$n = 2 \text{ (L)}$$

2s

2p

$$n = 3 \text{ (M)}$$

3s

3p

3d

$$n = 4 \text{ (N)}$$

4s

4p

4d

4f

$$n = 5 \text{ (O)}$$

5s

5p

5d

5f

5g

$$n = 6 \text{ (P)}$$

6s

6p

6d

6f

6g

6h

$$n = 7 \text{ (Q)}$$

7s

7p

7d

7f

7g

7h

7i

ثانيا : مبدأ الاستبعاد "قاعدة باولي":

وضع باولي عام 1925 مبدأ هام يحكم توزيع الالكترونات حول أنويه الذرات وينص على أنه

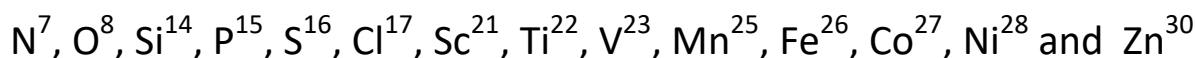
"لا يمكن لإلكترونين أو أكثر في نفس الذره امتلاك نفس قيم أعداد الكم الأربعة بينما يمكن أن يشتركا في رقم واحد أو رقمين أو ثلاثة أرقام فقط"

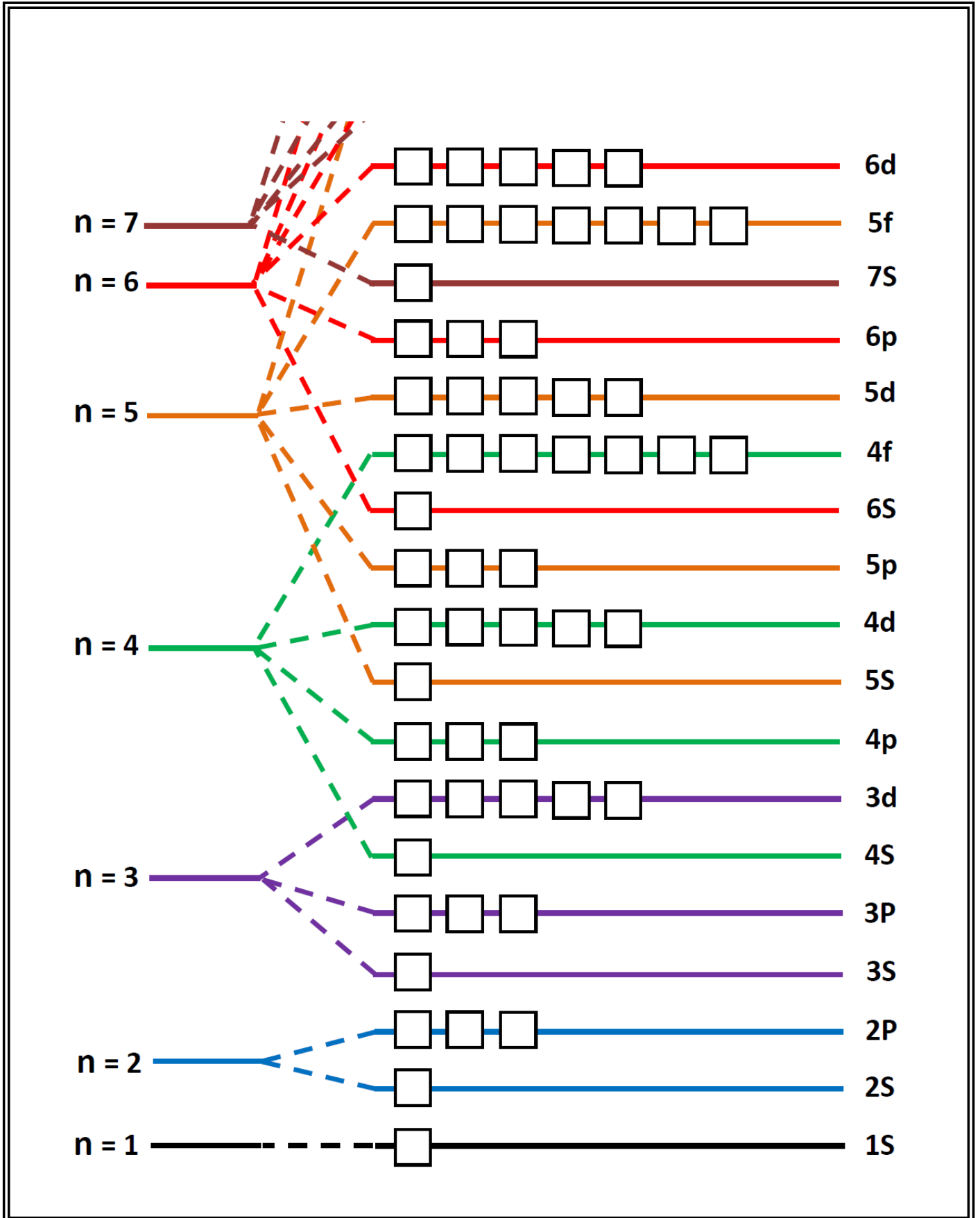
ثالثا : قاعدة هوند:

استطاع العالم هوند لدى دراسة الخواص المغناطيسية أن يضع قاعدته التي وضح فيها بأن الإلكترونات لا تتزوج في اوربيتالات المستوى الفرعي الواحد إلا إذا كان عددها أكبر من عدد هذه الأوربيتالات ، أي تتوزع الالكترونات على أوربيتالات المستوى الفرعي الواحد فرادى على أن تكون متشابهه في اتجاه الغزل ثم تصبح متزاوجة بعد أن يصبح الفلك نصف ممتلئ وتتص القاعدة على ما يلي "تكون حالة الذرة أكثر ثباتا عندما يتم توزيع إلكترونات المستوى الفرعي الواحد على أكبر عدد ممكن من اوربيتالات ذلك المستوى بنفس اتجاه الغزل قبل البدء بعملية الإزدواج"

1- أوجد أكبر عدد من الإلكترونات التي يمكن ان تشغل المستوى الفرعي p مع توضيح أعداد الكم المختلفة لكل إلكترون في جدول.

2- باستخدام نموذج التوزيع الإلكتروني، وضح التوزيع الإلكتروني للذرات الآتية:





الفصل السادس

التأثير المتبادل بين الذرات و المجال المغناطيسي

العزم المغناطيسية

يمكن التحقق من التوجيهات الفراغية المكعبة للمتجهات L و S و J وذلك بوضع الذرات في مجال مغناطيسي خارجي و الذي يأخذ الاتجاه الافتراضي في اتجاه محور z . لا يتم قياس L بشكل مباشر و لكن عن طريق قياس التفاعل بين ثنائي العزم المغناطيسي μ الناتج من حركة الإلكترونات في الذرة مع المجال المغناطيسي الخارجي . لدراسة ذلك يجب معرفة العزم المغناطيسية للذرة اولا كما يلي.

1- عزم ثنائي القطب المغناطيسي المداري للإلكترون

يتحرك الإلكترون حول النواة في مداره و حيث أنه جسيم مشحون فإن دورانه يؤدي لظهور تيار كهربائي تعطى شدته بالعلاقة الآتية

$$I = \frac{e}{T}$$

حيث e هي شحنة الإلكترون و T هو زمن دورانه في مداره ، ويعطى عزم ثنائي القطب المغناطيسي بحاصل ضرب شدة التيار و مساحة المدار المستوي الذي يدور فيه الإلكترون A كما يلي

$$\mu_{\ell} = IA = \frac{e}{T} A$$

و لتقدير قيمة هذا العزم المغناطيسي نفترض أن الإلكترون أثناء دورانه يدور في مسار دائري نصف قطره r كما افترض بولر للتبسيط حيث تكون المساحة السطحية لهذا المدار هي $A = \pi r^2$ فيكون عزم ثنائي القطب المغناطيسي هو

$$\mu_{\ell} = \frac{e}{T} \pi r^2 = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{e}{2} vr$$

$$\mu_{\ell} = \frac{e}{2m} mvr = \frac{e}{2m} L$$

وحيث أن ميكانيكا الكم أشارت أن كمية التحرك الزاوية المدارية تساوي $\sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar$ فان ثنائي العزم يصبح

$$\mu_l = \frac{e\hbar}{2m} \sqrt{\ell(\ell + 1)}$$

و بالتالي فان ثنائي العزم المغناطيسي ياخذ قيم مختلفة حسب قيمة ℓ كما يلي

For $\ell = 0$	$\mu_l = 0$
For $\ell = 1$	$\mu_l = \frac{e\hbar}{2m} \sqrt{2}$
For $\ell = 2$	$\mu_l = \frac{e\hbar}{2m} \sqrt{6}$

و نلاحظ أن النسبة $\frac{e\hbar}{2m}$ تحتوي على ثوابت كونية و موجودة لأى قيم لثنائي العزم لذلك تستخدم كوحدة للعزم المغناطيسي و تسمى بـ "ماجنتون بور *Bohr magneton*" و يرمز له بالرمز μ_B حيث

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 0.927 \times 10^{-23} \text{ joule/weber/m}^2$$

و بالتالي يمكن إعادة كتابة μ_l على النحو التالي

$$\mu_l = -\frac{\mu_B}{\hbar} L$$

الاشارة السالبة توضح أن اتجاه العزم المغناطيسي عكس اتجاه كنية التحرك الزاوية المدارية ، و باعادة كتابة المعادلة كما يلي

$$\frac{\mu_l/\mu_B}{L/\hbar} = -1 = g_l$$

و g_l هو معامل يسمى "معامل لانديه المداري *Orbital Lande g factor*"

$$\mu_l = \frac{g_l \mu_B}{\hbar} L$$

$$\mu_l = g_l \mu_B \sqrt{\ell(\ell + 1)}$$

2- عزم ثنائي القطب المغناطيسي المغزلي للإلكترون

نتيجة حركة الإلكترون حول نفسه يتولد عزم مغناطيسي μ_s و يكون اتجاهه أيضا معاكس لاتجاه كمية التحرك الزاوية المغزلية و بالمثل يمكن ايجاد عزم ثنائي القطب المغناطيسي ليكون

$$\mu_s = -\frac{\mu_B}{\hbar} S$$

و يمكن أيضا اعادة كتابة المعادلة كما يلي

$$\frac{\mu_s/\mu_B}{S/\hbar} = -1 = g_s$$

و g_s هو معامل يسمى "معامل لانديه المغزلي" *Spin Lande g factor*

$$\mu_s = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} S$$

$$\mu_s = g_s \mu_B \sqrt{s(s+1)}$$

3- عزم ثنائي القطب المغناطيسي لكمية تحرك الإلكترون الزاوية الكلية

عند وجود إلكترون في ذرة ما و له كل من كمية التحرك الزاوية المدارية \mathbf{L} و كمية التحرك الزاوية المغزلية \mathbf{S} فيجب أن ندرس عزم ثنائي القطب الكلي μ_j و المقابل ل كمية التحرك الزاوية الكلية \mathbf{J}

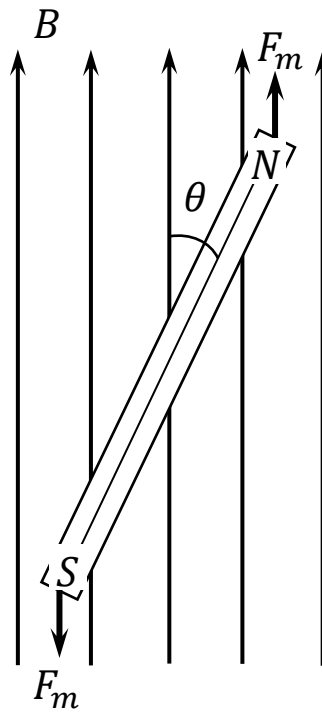
و يمكن أيضا صياغة μ_j بعلاقات مشابهة للعلاقات التي صيغت لـ μ_s و μ_l لكن مع اختلاف قيمة معامل لانديه حيث أن معامل لانديه الكلي *Total Lande g factor* (g_j) و يعطى معامل لانديه الكلي بالمعادلة التالية

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

$$\mu_j = g_j \mu_B \sqrt{j(j+1)}$$

4- تأثير المجال المغناطيسي الخارجي على الذرة

عندما نتحدث عن التفاعل بين الذرة و المجال المغناطيسي الخارجي فإننا نقصد أن هناك تغير ، ΔE ، في طاقة الإلكترون أو الذرة عند وضعها في هذا المجال الخارجي فعند وضع الذرة في مجال مغناطيسي خارجي B فإن عزم ثنائي القطب المغناطيسي المداري μ_l على سبيل المثال يعمل كما لو كان مغناطيس قضيبى موضوع في مجال مغناطيسي كما موضح بالرسم المقابل حيث يتولد عزم محرك يعمل على تعديل وضعه بالنسبة للمجال و يكون العزم المغناطيسي هو



$$\tau = \mu_l \times B$$

$$\tau = \mu_l B \sin\theta$$

ويكون التغير في الطاقة نتيجة تغيير وضع ثنائي القطب هو

$$\Delta E = \int_{90}^{\theta} \tau d\theta = \int_{90}^{\theta} \mu_l B \sin\theta d\theta$$

$$\Delta E = \mu_{\ell} B \int_{90}^{\theta} \sin\theta d\theta = - \mu_{\ell} B \cos\theta$$

$$\Delta E = - \mu_{\ell} \cdot B$$

و بالتالي يمكن كتابة التغير في الطاقة نتيجة تفاعل المجال المغناطيسي الخارجي مع العزم المغناطيس المداريو المغزلي و الكلي كما يلي

$$\Delta E_{\ell} = - \mu_{\ell} \cdot B = - \mu_{\ell} B \cos\theta$$

$$\Delta E_s = - \mu_s \cdot B = - \mu_s B \cos\theta$$

$$\Delta E_j = - \mu_j \cdot B = - \mu_j B \cos\theta$$

تأثير زيمان

تأثير زيمان هو ظاهرة انشقاق الخطوط الطيفية الصادرة من ذرات مصدر معين عند التأثير عليها بمجال مغناطيسي خارجي و يمكن دراسة هذه الظاهرة بدراسة التأثير المتبادل بين المجال المغناطيسي الخارجي و العزوم المغناطيسية للذرات و التي أوضحنا فيها تغير طاقة المستوى بمقدار يعتمد على شدة المجال الخارجي B و العزوم المغناطيسية للذرات μ_{ℓ} , μ_s , μ_j حيث يكون مقدار التغير مكمم أى معتمدا على أعداد الكم. هناك نوعين لظاهرة زيمان معتمدة على شدة المجال المغناطيسي.

1- ظاهرة زيمان العادية Normal Zeeman Effect

تحدث عندما يكون المجال المغناطيسي الخارجي قويا جدا و تكون طاقة التفاعل بينه و بين العزوم المغناطيسية للذرات كبيرة جدا مقارنة لطاقة التفاعل بين العزم المداري مع العزم المغزلي و و للتبسيط إذا كان لدينا ذرة لها كمية تحرك زاوي مداري فقط فيكون التغير أو الإزاحة في الطاقة تعطى بالعلاقة الآتية :

$$\Delta E = \mu_B B (m_{\ell})$$

و يتضح أن الفرق في الطاقة بين المستويات بعد التشقق يعتمد على m_ℓ و الذي بدوره يحدد عدد المستويات بعد التشقق و يمكن توضيح ذلك من خلال الحالة الآتية

في حالة المستوى الرئيسي الثالث أي $n = 3$ يكون لدينا ثلاث مستويات فرعية هي:

$$\ell = 0 \quad \rightarrow \quad m_\ell = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta E = 0$$

معنى ذلك أن المستوى الفرعي s لا يحدث له تشقق و يظل منفردا

$$\ell = 1 \quad \rightarrow \quad m_\ell = 1, 0, -1$$

$$m_\ell = 1 \quad \rightarrow \quad \Delta E = \mu_B B$$

$$m_\ell = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta E = 0$$

$$m_\ell = -1 \quad \rightarrow \quad \Delta E = -\mu_B B$$

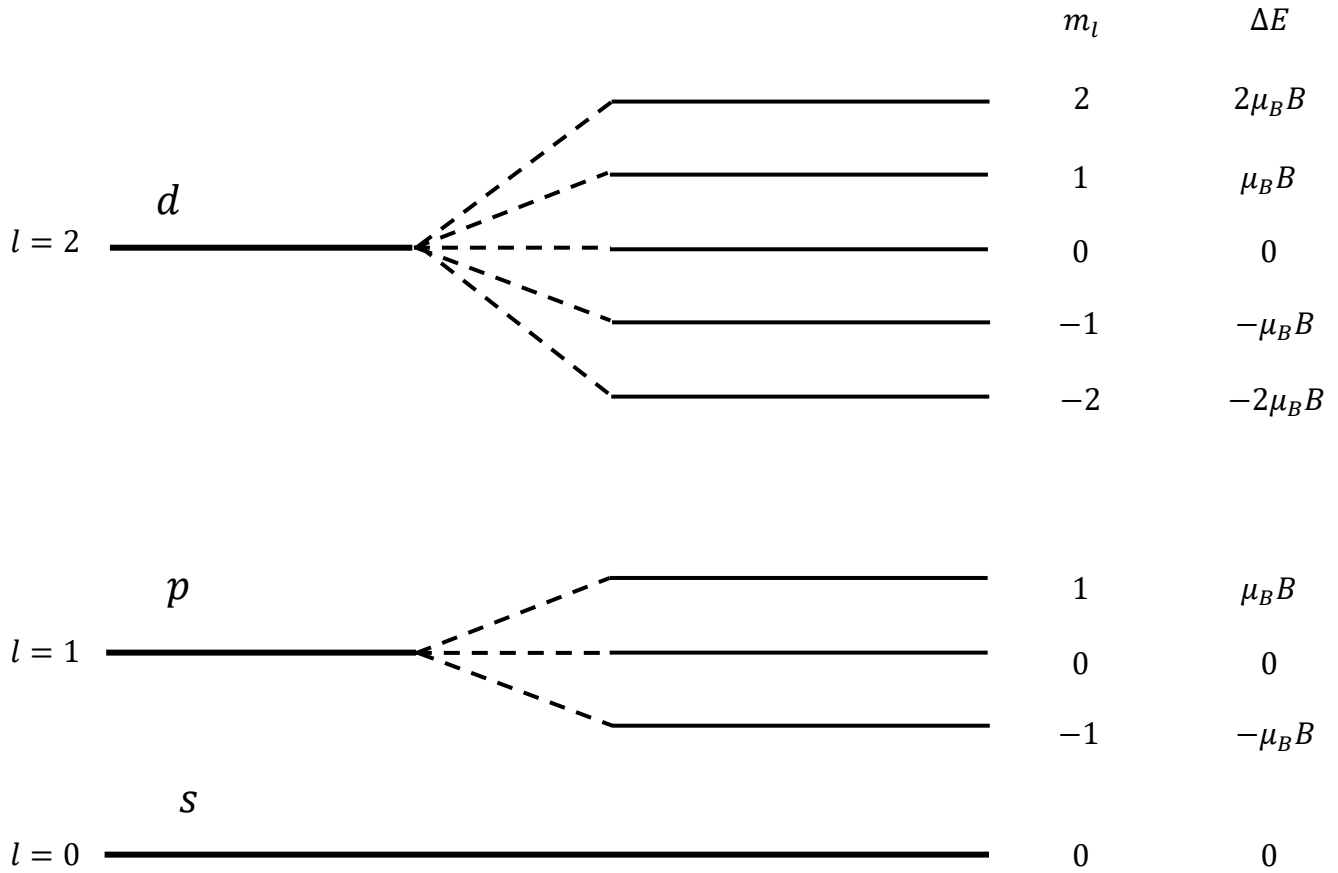
معنى ذلك أن المستوى الفرعي p يتشقق إلى ثلاث مستويات مستوى بطاقة مساوية لطاقة المستوى الأصلي و مستوى آخر بطاقة أكبر من طاقة الأصلي بفرق $\mu_B B$ اما المستوى الثالث بطاقة اقل من الأصلي بنفس المقدار $\mu_B B$.

$$\ell = 2 \quad \rightarrow \quad m_\ell = 2, 1, 0, -1, -2$$

$$\Delta E = 2\mu_B B, \Delta E = \mu_B B, \Delta E = 0, \Delta E = -\mu_B B, \Delta E = -2\mu_B B$$

معنى ذلك أن المستوى الفرعي d يتشقق إلى خمس مستويات مستوى بطاقة مساوية لطاقة المستوى الأصلي و مستوى آخر بطاقة أكبر من طاقة الأصلي بفرق $\mu_B B$ و مستوى ثالث بطاقة أكبر من طاقة الأصلي بضعف الفرق $\mu_B B$ اما المستويين الرابع و الخامس بطاقة اقل من الأصلي بالمقدار $\mu_B B$ و ضعف نفس المقدار.

و يمكن توضيح ما سبق بالرسم التوضيحي التالي

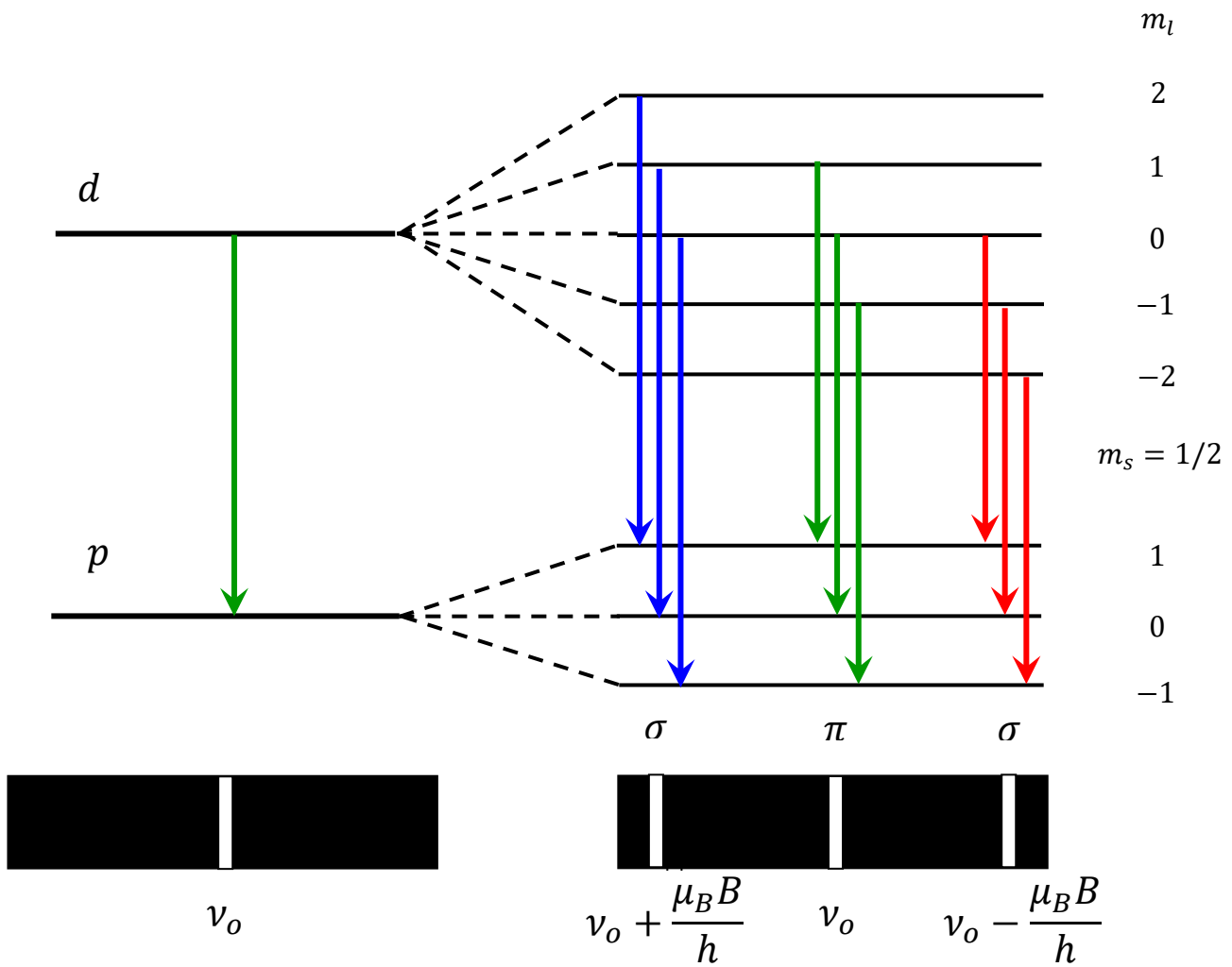


و يمكن توضيح التشقق الحادث في الخطوط الطيفية من خلال المثال التالي

مثال

أشرح التشقق الحادث في الخط الطيفي للانتقال من المستوى d إلى المستوى p إذا وضعت الذرة في مجال مغناطيسي قوي و ذلك في حالة $m_s = 1/2$ إذا علمت أن قواعد الاختيار التي تحكم الانتقالات هي $\Delta m_s = 0$ و $\Delta m_l = 0, \pm 1$

ينشق الخط الطيفي للانتقال من المستوى d إلى المستوى p إلى تسعة خطوط فرعية كما واضح في الرسم لكل ثلاثة خطوط نفس التردد و بالتالي يظهر ثلاث خطوط طيفية.



و نلاحظ ما يلي:

1- الخط الأول له طاقة مساوية لطاقة الخط الصلى أى له نفس التردد و يتحقق هذا الخط

بقاعدة الاختيار $\Delta m_l = 0$ و يسمى بالخط π .

2- الخطان الآخران يتحققا بقاعدة الاختيار $\Delta m_l = \pm 1$ و يكون لأحدهما طاقة أكبر من

طاقة الخط الصلى أى له تردد أكبر من تردد الخط الأصلي بفارق يسوي $\frac{\mu_B B}{h}$ أما

الأخر فله طاقة أقل من طاقة الخط الصلى أى له تردد ينقص عن تردد الخط الأصلي

بفارق يسوي $\frac{\mu_B B}{h}$ و يسمى الخطان بخطين σ .

2- ظاهرة زيمان الشاذ *Anomalous Zeeman Effect*

تحدث هذه الظاهرة عند استخدام مجال مغناطيسي ضعيف و في حالة $S \neq 0$ حيث تكون الطاقة الناتجة من التفاعل بين العزم المداري مع العزم المغزلي كبيرة مقارنة مع طاقة التفاعل بين المجال المغناطيسي الخارجي و العزوم المغناطيسية للذرات. و تكون الخطوط الطيفية الناتجة من التشقق كبيرة مقارنة مع حالة زيمان العادية و لذلك سميت هذه الظاهرة بظاهرة زيمان الشاذة.

و يكون التغير أو الإزاحة في الطاقة تعطى بالعلاقة الآتية

$$\Delta E = g_j \mu_B B (m_j)$$

و يتضح أن الفرق في الطاقة بين المستويات بعد التشقق يعتمد على m_j و معامل لانديه g_j الذي بدوره يعتمد على l, s, j .

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

و قد اوضحنا سابقا أن عدد كم كمية التحرك الزاوية الكلية j تأخذ قيمتين $(l + \frac{1}{2})$ و $(l - \frac{1}{2})$ و هذا يعني أن التغير في الطاقة له معادلتين مختلفتين مما يعني أن التغير في الطاقة يكون مختلف لنفس المستوى الفرعي كما يلي

$$\text{For } j = l + \frac{1}{2} \quad \text{and } s = \frac{1}{2}$$

$$\therefore g_j = \frac{2l+2}{2l+1} \rightarrow \Delta E = \frac{2l+2}{2l+1} \mu_B B (m_j)$$

$$\text{For } j = l - \frac{1}{2} \quad \text{and } s = \frac{1}{2}$$

$$\therefore g_j = \frac{2l}{2l+1} \rightarrow \Delta E = \frac{2l}{2l+1} \mu_B B (m_j)$$

يتضح أيضا أن عدد إزاحات الطاقة يعتمد على عدد الكم المغناطيسي m_j لكمية التحرك الكلية حيث يأخذ قيم

$$m_j = -j, (-j+1), \dots, (+j-1), +j$$

فمثلا بالنسبة للمستوى الفرعي p ($\ell = 1$) و الذي له حالتين $P_{3/2}$ و $P_{1/2}$ و الناتجتين من ترابط كمية الحركة المدارية و المغزلية ، تنشق كل حالة إلى عدد من المستويات كما يلي

$$\text{For } j = \ell + \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad j = \frac{3}{2}$$

$$\therefore m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$$

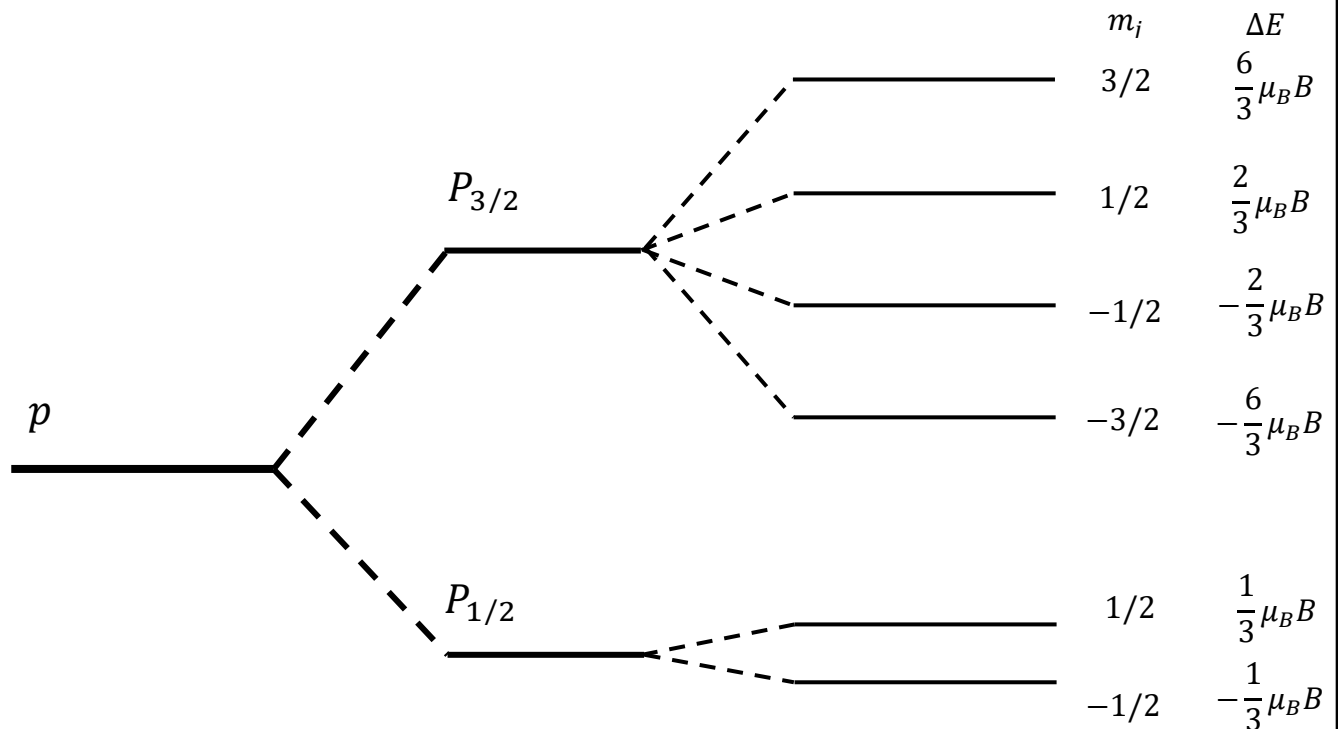
$$\Delta E = \frac{2\ell+2}{2\ell+1} \mu_B B (m_j) \quad \rightarrow \quad \therefore \Delta E = \frac{6}{3} \mu_B B, \frac{2}{3} \mu_B B, -\frac{2}{3} \mu_B B, -\frac{6}{3} \mu_B B$$

$$\text{For } j = \ell - \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad j = \frac{1}{2}$$

$$\therefore m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

$$\Delta E = \frac{2\ell}{2\ell+1} \mu_B B (m_j) \quad \rightarrow \quad \therefore \Delta E = \frac{1}{3} \mu_B B, -\frac{1}{3} \mu_B B,$$

و يوضح ذلك أن الحالة $P_{3/2}$ تنشق إلى أربع مستويات بينما تنشق الحالة $P_{1/2}$ إلى مستويين كما مبين من الرسم التالي



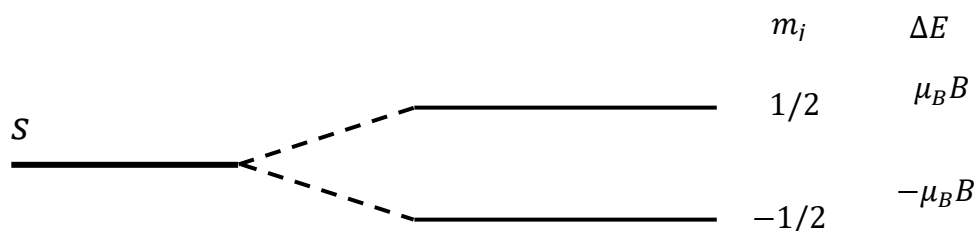
و بالمثل بالنسبة للمستوى الفرعي s ($l = 0$) و ينشق إلى مستويين كما يلي

$$\text{For } j = l + \frac{1}{2} \rightarrow j = \frac{1}{2}$$

$$\therefore m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

$$\Delta E = \frac{2l + 2}{2l + 1} \mu_B B (m_j)$$

$$\therefore \Delta E = \mu_B B, -\mu_B B$$



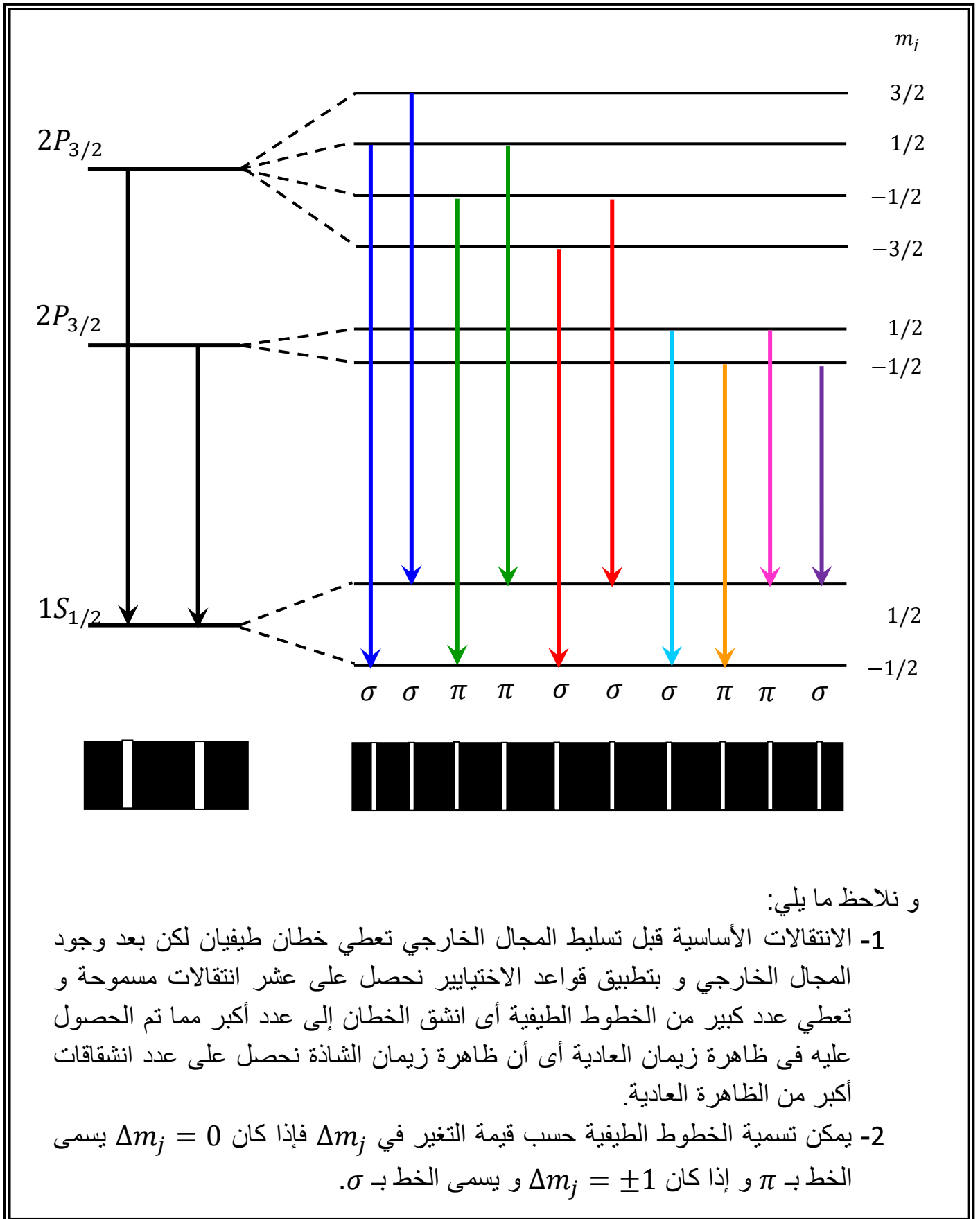
و يمكن توضيح التشقق الحادث في الخطوط الطيفية من خلال المثال التالي

مثال—

أشرحي التشقق الحادث في الخط الطيفي للانتقال من المستوى $2p$ إلى المستوى $1s$ إذا وضعت الذرة في مجال مغناطيسي ضعيف إذا علمتي أن قواعد الاختيار التي تحكم الانتقالات

$$\Delta m_j = 0, \pm 1 \text{ و } \Delta l = \pm 1 \text{ هي}$$

نحن نعلم أن المستوى $2p$ له حالتين ، الأولى $2P_{3/2}$ و تنشق إلى أربع مستويات و الثانية $2P_{1/2}$ والتي تنشق إلى مستويين بينما ينشق المستوى $1s$ إلى مستويين و بالتالي نحصل على المستويات المبينة في الرسم التالي.



تأثير شتارك

تأثير شتارك هو ظاهرة إنشقاق خطوط الطيف للذرات تحت تأثير مجال كهربائي خارجي ، و سميت هذه الظاهرة بهذا الاسم تبعا للعالم الألماني جوهانس شتارك و هو أول من اكتشف تأثير المجال الكهربائي على الطيف وكان ذلك في عام 1913 ، و احيانا تسمى ظاهرة شتارك و لوسوردو و ذلك لأن الظاهرة تم اكتشافها في نفس العام و بشكل منفصل على يد العالم الايطالي لوسوردو ، و هذا التأثير مشابه لتأثير زيمان الذي يظهر فيه إنشقاق خطوط الطيف للذرات تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي ، ويُعتبر هذا التأثير من الظواهر المتعلقة بتركيب الذرة، وهو أحد الظواهر التي ساعدت على فهمنا للتركيب الإلكتروني للذرة.

عند وضع ذرات المادة في مجال كهربائي فإن المجال يعمل على إبعاد الإلكترونات عن النواة وتتأثر طاقة مستوى الإلكترون سوف تتأثر بقابلية انجذاب الإلكترون في اتجاه المجال أو عكسه حيث يمكن أن تزداد أو تقل طاقة المستوى ، و تتأثر إلكترونات المدارات الخارجية أكثر من إلكترونات المدارات الداخلية.