

## الفصل التاسع

### ذرة الأيدروجين

## The Hydrogen Atom

من الأنسب أن تعالج ذرة الأيدروجين والشبيهه بالأيدروجين، مثل  $Li^+$ ،  $He^+$  مثلاً معاً. حيث أنهم يختلفوا فقط في النواه أى فى شحنتها كما أن طاقة الوضع للإلكترون فى الشبيهه بالأيدروجين قد تناول فى الفصل الخامس، حيث يمكن أن تبين هنا على هذا الشكل:-

$$V = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad - 1$$

حيث ( $r$ ) مسافة الإلكترون من النواه فى أى إتجاه، ( $z$ ) العدد الذرى، ( $e$ ) الشحنة الإلكترونية.

معادلة شرودنجر لهذا النظام يمكن أن تأخذ الشكل :-

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

بوضوح الكتلة المختزلة للنواه والإلكترون يجب أن يستخدم بدلاً من ( $m$ )، كتلة الإلكترون. حيث النواه تعتبر كجسيم ضخم، على أى حال، بأنه لا يوجد معنى الفرق بين هاتين الكميتين كما وضع معامل لابلاس إحداثيات الدائرة القطبية الدائرية للمعادلة (2) لتأخذ الشكل:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0 \quad - 3$$

كما أن أول الترمين للتعبير لمعامل لابلاس، والترم الأول فى المعادلة (1) فى الفصل السابع يمكن أن يوجد كما يلى :-

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{1}{r^2} \left( r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

وطريقة الحل للمعادلة (3) تعتبر مشابهة لذلك المستخدمة في الدوار المشدود، ولكن في هذه الحالة (r) تعتبر متغيره ولهذا  $\psi$  يجب الإشارة إليها كدالة للثلاث متغيرات (r,  $\theta$ ,  $\varphi$ ) ومن المفروض مبدئياً أن المتغيرات يمكن فصلها وأن ( $\psi$ ) ربما تشير كنتاج للثلاث دوال، كل واحدة تكون دالة واحدة فقط للمتغيرات. وقد فرض بسبب ذلك، أن :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot T(\theta) \cdot F(\varphi) \quad - 4$$

حيث أن (R) داله فقط لـ (r)، T تكون دالة فقط ( $\theta$ ) و F دالة فقط للحد ( $\varphi$ ). المعادلة (4) يمكن أن تكتب بأكثر بساطة مثلما.

$$\psi = R T F$$

استبدل ( $\psi$ ) في المعادلة (3) ثم بعد ذلك بالقسمة من خلالها وذلك بالمقدار RTF لتعطي:

$$\frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{1}{T} \frac{d}{d\theta} \left( \sin^2 \theta \frac{dT}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{1}{F} \frac{d^2 F}{d\varphi^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = 0$$

بالضرب بالمقدار ( $r^2 \sin^2 \theta$ ) ثم بالتعديل :

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin^2 \theta}{T} \frac{d}{d\theta} \left( \sin^2 \theta \frac{dT}{d\theta} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = - \frac{1}{F} \frac{d^2 F}{d\varphi^2} \quad - 6$$

الجانب الأيمن من المعادلة (6) يحتوى فقط على متغير واحد ثم بعد ذلك المعادلة يجب أن تحتوى لكل القيم r,  $\theta$ ,  $\varphi$ ، وكل جانب للمعادلة يعتبر ثابت. ثم بين هذا الثابت بالمقدار ( $m^2$ ) ويخصص كل جانب للمعادلة (6) لكي تكتب على هذه الصورة :

$$\frac{1}{F} \frac{d^2 F}{d\varphi^2} = - m^2 \quad - 7$$

وا

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin^2 \theta}{T} \frac{d}{d\theta} \left( \sin^2 \theta \frac{dT}{d\theta} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = m^2 \quad - 8$$

والمعادلة الأخيرة مازالت تحتوى على إثنين من المتغيرات، ولكن يمكن أن نفصل

ذلك بقسمة المعادلة بالحد  $\sin^2\theta$  ثم بالتعديل لتعطى العلاقة :-

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}) r^2 = \frac{m^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{T \sin^2\theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{dT}{d\theta}) \quad - 9$$

كل جانب من المعادلة يحتوى واحد متغير فقط. لأن المعادلة يجب أن يحتوى لكل

القيم  $r, \theta$ ، وكل جانب للمعادلة يجب أن يكون ثابت القيمة. مبيناً لهذا الثابت بواسطة  $(\beta)$

لكى تكتب كما يلى :-

$$\frac{m^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{T \sin^2\theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{dT}{d\theta}) = \beta \quad -10$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}) r^2 = \beta \quad -11$$

ومن هنا من الممكن فصل المتغيرات الثلاث فى المعادلة (3) لتكتب الفصائل الثلاث

فى المعادلات (7, 10, 11)، لكل متغير. الإفتراض الأسمى المعبر عنه فى المعادلة (4) تكون

بذا كافية والمسألة قد تختزل لحل الثلاث معادلات المنفصلة. هذه المعادلات يمكن أن تكتب

على النحو التالى:-

$$\frac{1}{F} \frac{d^2 F}{d\phi^2} = -m^2 \quad -12$$

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

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + [\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}) - \frac{\beta}{r^2}] R = 0 \quad -14$$

والمعادلات (12), (13), (14) يمكن التعبير عنهم على التوالى بالدوال  $R, T, F$ .

### The F equation

### المعادلة F :

المعادلة (F) تعتبر هى نفس المعادلة التى كانت محسوبة فى مسألة الدوار

المعادلة (20) فى الفصل الثامن، وكلاهما يكونا، بالطبع، نفس المعادلة للجسيم على الحلقة

(المعادلة 6 فى الفصل السابع). والحلول للمعادلة (F) فى سياق هذا الكلام بسبب ذلك هى

نفسها بالنسبة لمعادلة F فى الدوار المشدود والمعادلة للجسيم على الحلقة. هذه الحلول

يمكن التعبير عنها في الدوال المثلثية أو في الشكل الأسى المعقد. ويمكن أن تعيد من الدراسة القائمة على الجسيم على الحلقة أن الموقع المهم في العزم الزاوي للجسيم، سيكون حد الأس المعقد الذي يعتبر مناسباً. ولنا أن نرى فيما بعد أن عدد الكم المشتق من المعادلة (F) المصاحبة لتركيبية العزم الزاوي للإلكترون في ذرة الأيدروجين. ولهذا فمن المناسب بالنسبة للزمن الموجود اللازم، لإيجاد الحل للمعادلة (F) في جزئية الأس المعقد، فربما يكون الحل هكذا :-

$$F = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad - 15$$

حيث

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \quad - 16$$

### The T equation

### المعادلة T:

مرة أخرى تكون المعادلة T هي نفس الشكل مثلما في المعادلة T والخاصة في الدوار المشدود (المعادلة 29) في الفصل الثامن، وكذلك نفس طريقة الحل والشكل. هذه الحلول ستدخل عدد الكم (m)، وعدد الكم الإضافي والتي قد نرسم له بالرمز  $\ell$  في حالة الحركة الإلكترونية مثلما توازن بالنسبة للطيف الدوراني. فعدد الكم  $\ell$  إذا يكون متعلق للكمية  $\beta$  في المعادلة (13) بالعلاقة:

$$\beta = \ell(\ell + 1) \quad - 17$$

والعدد المسموح به للحد ( $\ell$ ) يعطى بالعلاقة :

$$\ell = 0, 1, 2, 3 \quad - 18$$

وكذلك يوجد علاوة على ذلك قيد أن :-

$$|m| \leq \ell \quad - 19$$

### The R equation:

### المعادلة R

من حل المعادلة (R) سوف يتولد لدينا عدد كم آخر (n)، حيث يأخذ العلاقة مع عدد الكم  $\ell$ . ولكن القول أن المعادلة (R) - المعادلة (14) تحتوى الكميات  $\beta$  والتي تعطى بالمعادلة (17). عدد الكم  $\ell$  والذي سوف يدخل في الحل للمعادلة (R). وحل المعادلة (R)

عبارة عن دالة والتي تعرف بمتعدد الحدود للاجوير Laguerre polinomial واعتبر هذه الدالة التي سوف نشرح العلاقة بين عدد الكم (n), (f).

ومتعدد الحدود للاجوير (k) في المتغير (k) يمكن الإشارة إليه مثل  $L_{(k)}(q)$  ونحصل عليها بتفاضل التعبير  $q^k e^{-q}$ ، حيث (k) الزمن، ثم بضرب الناتج بالمقدار  $e^2$  إذا :-

$$L_{K(q)} = e^q \cdot \frac{d^K (q^K e^{-q})}{dq^K} \quad - 20$$

فمثلاً نحصل على متعدد الحدود للاجوير المرافق بواسطة تفاضل المقابل لمضروب متعدد الحدود للاجوير (s). بينما متعدد الحدود للاجوير المرافق بواسطة  $L_R^S(q)$  إذا :-

$$L_R^S(q) = \frac{d^S L_K(q)}{dq^S} \quad - 21$$

من المناقشة السابقة سوف نقرر أن كلامنا (k) ، (s) مطلوبين ليكونا عدد صحيح موجب بعد ذلك كل منهما يبين عدد عمليات التفاضل. والعدد (k) ربما يأخذ صفر عندما  $L_0(q)=1$ . فمن المعادلة (20) فإتينا نرى أن أعلى أس للرمز (q) في متعدد الحدود  $L_K(q)$  هو  $q^K$ . وبتفاضل  $L_K q$ ، (s) لعدد من المرات تختزل أعلى أس للحد q إلى  $q^{K-S}$  ولهذا فإن لو  $S > K$ ، فسوف يتلاشى متعدد الحدود  $L_K^S(q)$ . والقيمة (s) يجب أن تكون أقل من أو تساوى (k)، ولهذا التقيد على القيمة (k) ، (s) يجب أن تكون :

$$k = 0, 1, 2, 3 \quad - 22$$

$$S \leq k \quad - 23$$

في الحل للمعادلة (R) المصاحب لمتعدد الحدود للاجوير Laguerre يأخذ الشكل:

$$L_{n+1}^{2\ell+1} \left( \frac{2zr}{n a_0} \right)$$

حيث  $(a_0)$  تعطى بواسطة

$$a_0 = \frac{(4\pi\epsilon_0)h^2}{4\pi^2 m e^2}$$

وفي الحقيقة يكون مساوياً لنصف قطر ذرة بوهر.

ثم بعد ذلك  $(2l+1)$  تقابل للرمز  $(s)$  في المعادلة (21) ، تقابل الحد  $(k)$  وهو في المعادلة (23) شريطة العلاقة بين  $(l, n)$  على النحو التالي :

$$(2l+1) \leq n+1$$

$$\text{or} \quad l \leq (n-1) \quad - 24$$

ثم اقل قيمة من حيث أن  $(l)$  يمكن تأخذها هي صفر، ولتتبع من المعادلة (24) أن أقل قيمة للمقدار  $(n)$  يكون الوحدة، ولهذا فالقيمة المسموح بها للحد  $(n)$  تعطى بالعلاقة :

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad - 25$$

### The energy levels : مستويات الطاقة

في المعادلات الثلاث السابقة لكل من  $F, T, R$ . مجموع الطاقة الكلية  $(E)$  يظهر في المعادلة  $(R)$  (14). عدد الكم  $(n)$  والذي يظهر في متعدد الحدود للاجوير المصاحب **associated Laguerre polynomials** حيث يكون الحل للمعادلة  $(R)$  المتعلق للطاقة الكلية  $F$ . المعادلة  $R$  الكلية ترينا أن مصاحب متعدد الحدود للاجوير تكون الحل شريطة أن:-

$$n^2 = - \frac{2\pi^2 Z^2 m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2 E}$$

ومن هذا

$$E = - \frac{2n^2 Z^2 e^4 m}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 h^2} \quad - 26$$

الطاقة لذرة الايدروجين تكون إذا مكمه ويعتمد على عدد الكم  $(n)$  والذي يعرف بعدد الكم الاساسى. وأعداد الكم الأخرى  $(m, l)$  اللذان يعرفان بعدد الكم الثانوى، عدد الكم المغناطيسى **Principal quantum, Magnetic quantum number, Azimuthal quantum** على التوالي. القيم الممكنة لكل أعداد الكم الثلاثة، يمكن تلخيصها كما يلى :-

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad - 27$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (m-1) \quad - 28$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l \quad - 29$$

وخصائص الحالة المستقلة للذرة تتطلب خصائص القيم لكل أعداد الكم الثلاثة. والطاقة للذرة، على أى حال، والتي تعطى بواسطة المعادلة (26) تعتمد فقط على القيمة (n) ولكن مع نفس القيمة للحد (n)، تصبح إذا متولدة :-

لأجل قيمة محددة (n)، المعادلة (28) ترينا أنه يوجد للحد (n) قيم مختلفة ممكنة للحد (l) والمعادلة (29) ترينا أنه يوجد (2l+1) قيم مختلفة للحد (m). والمجموع الكلى للحالات بنفس الطاقة إذا أعطى بالعلاقة :

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 1 + 3 + 5 \dots + (2n-1) = \frac{(1+2n-1)n}{2} = n^2 \quad - 30$$

إذا يوجد (n<sup>2</sup>) - ثلاثى مضاعف لذرة الأيدروجين.

فمن المهم لتقدير أن هذا الثلاثى الناتج من الحقيقة أن طاقة الوضع للإلكترون سوف يعطى بواسطة التفاعل الداخلى الكولومبى Colombic interaction للإلكترون الأحدى مع النواه كما هو محدد المعادلة (1). وفى الذرة عديدة الإلكترون حيث يوجد تفاعل بين الإلكترونات بالإضافة إلى التفاعل بين النواه - الإلكترون، فالطاقة للذرة إذا سوف تعتمد على كل من (n)، (l). وفى هذه الحالة توجد قيم مختلفة للحد (l) سوف تودى إلى طاقات مختلفة. عدد الكم المغناطيسى (m) يمكن، على أى حال، مازال يأخذ (2l+1) قيم مختلفة للقيمة المعطاه للحد (l) ولهذا على نحو تحت هذه الظروف سوف يوجد (2l+1) ثلاثى مضاعف. فى وجود فقط للمجال المغناطيسى لأن هذا الثلاثى المتبقى سيزال، وحالات بقيم مختلفة للحد (m) تأخذ قيم مختلفة.

ولنا أن نبين أن تأثير المجال الكهربي يعتبر مختلف بسيط. ففى المجال المغناطيسى فإن طاقة الذره تعتمد على قيم الحد (m) ، ولكن فى المجال الكهربي يعتمد على النموذج للحد (m) للحالات m=+1 ، m=1 ، كمثال سيستمر الثلاثى.

### The angular momentum of the electron العزم الزاوى للإلكترون

فى الفصل السابق، لقد رأينا أن عدد الكم الأساسى principle quantum number يحدد الطاقة لذرة الأيدروجين المعزولة، وأن عدد الكم الثانوى azimuthal quantum number سوف تعطى بعض الإسهامات لإيجاد الطاقة للذرات عديدة الإلكترونات. وعدد الكم

الثاوى يكون علاوة على ذلك مصاحب مع العزم الزاوى للإلكترون كما أن أيضاً تكون عدد الكم المغناطيسي.

وقبل إعتبار العزم الزاوى لنظام الكم الميكانيكى مثل ذرة الأيدروجين التى سوف تستخدم لإعتبار العزم الزاوى التقليدى. والعزم الزاوى للجسيم حول نقطة سوف يعين مثلما العزم الخطى مضروباً بالمسافة العمودية للنقطة من الخط من عند نقطة تحرك الجسيم. ولنفترض أن جسيم له كتله ( $m$ ) يرتحل فى دائرة ذات نصف قطر ( $r$ ) فى المستوى ( $xy$ )، والمركز للدائرة تعتبر أصل محاور النظام .

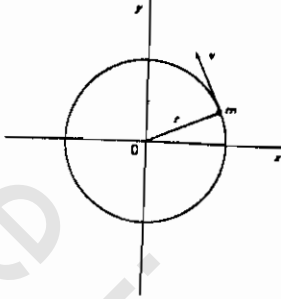


Fig. (1): Angular momentum

هذا الوضع قد يمثل فى الشكل (1). فلو السرعة الخطية للجسيم هى ( $v$ )، وعليه فإن العزم الخطى سوف يكون هو ( $mv$ ). والإتجاه المستمر للإرتحال عبارة أيضاً عن مماس الدائرة، والأصل يكون مساوياً لنصف القطر للدائرة ( $r$ ) والقيمة للعزم الزاوى لهذا الجسيم تكون إذا ( $mvr$ ) والإتجاه المعاكس (عكس إتجاه عقرب الساعة) حول الأصل ستؤخذ بالموجب ولهذا فإن السرعة للجسيم ستمثل فى الشكل (1)، بقيمة موجبه ومن هنا العزم الزاوى سوف يكون موجب.

والعزم الزاوى حول نقطة الأصل، فربما تمثل بالمتجه العمودى على مستوى الحركة من خلال. الأصل. فتكون حركة اليد اليمنى لللف ستطبق لهذا التمثيل، لهذا الوضع المبين فى الشكل (1). فإ المتجه العزم الزاوى سوف يقذف عالياً من السطح للمخطط على طول المحور ( $z$ ). ولو أن الجسيم يكون العكس (من عقارب الساعة) فيكون الإتجاه أسفل المستوى وتكون بقيمة سالبة. هذا القصور كما هو مبين فى الشكل (2).

والعزم الزاوى المبين فى الشكلين (2, 1) يمكن الإشارة إليه بالرمز ( $L_z$ ) حيث ( $z$ ) تعرف بتركيبة العزم الزاوى. فى هذا المثال المحدد. مكون ( $z$ )، فى الحقيقة، مساوية لمجموع العزم الزاوى ، لأن الجسيم قد يفترض للحركة فقط فى المستوى  $xy$ .



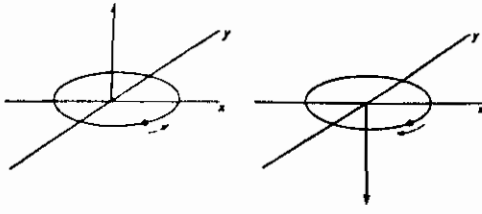


Fig. (2): Vector representation of angular momentum

فالحركة فى مستوى  
(xy) والتي ليست من الضرورى  
دائرية، المكون (z) للعزم الزاوى  
يمكن التعبير بشقوق كمية  
التحرك الخطية للجزئ ء الموازى  
للمحور y,x. هذه النقطة قد تفهم  
بواسطة الشكل (3).

السرعة (v) لحركة الجسم فى المستوى (xy) يمكن تحليله إلى المكون (v<sub>y</sub>) موازياً للمحور (y)، المكون (v<sub>x</sub>) موازياً للمحور (x)، والعزم الخطى لهذين المتجهين سيأخذان القيم (mv<sub>x</sub>)، (mv<sub>y</sub>) والتي سوف نرمز لها بالرمز P<sub>x</sub>, P<sub>y</sub> على التوالى :-

والعزم الزاوى حول نقطة الأصل الناشئة عن P<sub>y</sub> سنحصل عليها بضرب (P<sub>y</sub>) بالمسافة العمودية من الأصل إلى خط السرعة (v<sub>y</sub>) المكون، والتي يمكن أن نراها من الشكل (3) أن هذه المسافة تكون مساوية للمحور (x) للجسيم. مثلما (v<sub>y</sub>) عبارة عن الإتجاه المعاكس لعقرب الساعة حول نقطة الأصل، فناتج العزم الزاوى يكون موجب ويكون مساوياً للحد (xP<sub>y</sub>). والعزم الزاوى حول نقطة الأصل الناشئ عن P<sub>x</sub> نحصل عليه بالمثل ونفس الطريقة كما فى (v<sub>x</sub>) لإتجاه عقرب الساعة. ويكون الناتج بالسالب كما يلى -yP<sub>x</sub>. والمجموع الكلى للعزم مساوياً لمجموع العزمين الفرعى التحرك المحسوبة بعاليه ومن هنا :-

$$L_z = xP_y - yP_x \quad - 31$$

ولو أن الجسم يتحرك فى الثلاث محاور غير المستوى (xy) فقط، سوف يوجد مكونين للعزم الزاوى على المحند (x) والمحور y، وسوف يعطيان بالعلاقات الآتية :-

$$L_x = yP_z - zP_y \quad - 32$$

$$L_y = zP_x - xP_z \quad - 33$$

ومجموع العزم الكلى (L) يعتبر متعلق للمحاور (z, y, x) بالعلاقة :

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad - 34$$

ولإيجاد العزم الزاوى للكم الميكانيكى للنظام، دالة الموجه يمكن أن تعمل على معامل العزم الزاوى المناسب. ويجب أن نتذكر أن معامل الكم الميكانيكى يبنى بكتابة فيما بعد التعبير

الكلاسيكى (التقليدى) لأجل الشق المهم الملاحظ لمجاور العزم الزاوى (كمية التحرك)، ثم بعد ذلك نستبدل كل أجزاء العزم بواسطة معامل العزم الزاوى وهو  $(\partial/\partial q)$   $(h/2\pi i)$ . ولنفترض أن  $(z)$  مكون للعزم الزاوى، فالتعبير التقليدى فى الشقوق للمحاور والعزم سيعطى بالمعادلة (31). لبناء المكون  $(z)$  لمعامل العزم الزاوى، نرمز بالرمز  $(\ell_z)$  فالشقين  $(P_x, P_y)$  فى المعادلة (31) سوف يستبدلان من معامل العزم عندما :-

$$\ell_z = \frac{h}{2\pi i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad - 35$$

فالمعامل بالنسبة  $(x, y)$  للعزم الزاوى  $\ell_x, \ell_y$  على الترتيب أيضاً بالمثل بواسطة:-

$$\ell_y = \frac{h}{2\pi i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad - 36$$

$$\ell_x = \frac{h}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad - 37$$

علاوة على ذلك المعامل لمربع مجموع العزم الكلى  $\ell^2$ ، يمكن التعبير فى معاملات

المكونات

$$\ell^2 = \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2 \quad - 38$$

للمعمل على دالة الموجة لذرة الأيدروجين، فالعمل يجب أن يحول إلى محاور قطبية

دائرية وبالنسبة  $\ell_z, \ell^2$  فالنتائج هو :-

$$\ell_z^2 = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad - 39$$

$$\ell^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad - 40$$

والمعادلة (39) عبارة عن معامل وتستخدم لحساب العزم للجسيم على الحلقة فى

الفصل الرابع، لأن الجسيم يتحرك فقط فى السطح  $xy$ . متذكرون أن  $(\psi)$  تعين بالمعادلة (5)

كنتائج للمعادلات  $F, T, R$ .

$$\psi = R T F$$

والعمل لـ  $\ell^2$  على  $\psi$  التى ربما تمثل :-

$$\ell^2 \psi = \text{equation (40)} \times R T F$$

$$\text{or} \quad \ell^2 \psi = - \frac{h^2}{4\pi^2} \left[ \frac{RF}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} (\sin \theta \frac{dT}{d\theta}) + \frac{RT}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 F}{d\phi^2} \right] \quad - 41$$

ومن المعادلة T، المعادلة (13) والمعادلة (17)، فالشق الأول فى القوس فى المعادلة (41) ستعطى بالعلاقة

$$\frac{RF}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} (\sin \theta \frac{dT}{d\theta}) = - RF (\ell (\ell + 1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta}) T \quad - 42$$

فمن المعادلة (F) المعادلة (12)، الشق الثانى فى القوس فى المعادلة (41) ستعطى بالمعادلة:

$$\frac{RT}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 F}{d\phi^2} = - \frac{RTF m^2}{\sin^2 \theta} \quad - 43$$

بالإستبدال من المعادلات 42, 45 إلى المعادلة 41 :-

$$\begin{aligned} \ell^2 \psi &= - \frac{h^2}{4\pi^2} \left[ RTF (-\ell (\ell + 1) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta}) - \frac{RTF m^2}{\sin^2 \theta} \right] \\ &= \frac{h^2}{4\pi^2} \ell (\ell + 1) RTF \end{aligned}$$

or

$$\ell^2 \psi = \frac{h^2}{4\pi^2} \ell (\ell + 1) \psi$$

فالناتج للعملية تعطى عدد حقيقى مضروب بدالة الموجه الأصلية، ولهذا فالعدد الحقيقى يكون مساويا لمربع مجموع العزم الزاوى، ثم :-

$$L^2 = \frac{h^2}{4\pi^2} \ell (\ell + 1)$$

or

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)} \frac{h}{4\pi} \quad - 44$$

من هذه نرى أن عدد الكم الثانوى تعين مجموع العزم الزاوى مضروباً بالحد  $(h/2\pi)$ .

العمل للحد  $(\ell_z)$  على  $\psi$  يمكن التمثيل بواسطة :-

$$\ell_z \psi = \frac{h}{4\pi i} \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} (RTF)$$

or

$$\ell_z \psi = \frac{h}{2\pi i} \cdot RT \frac{dF}{d\phi} \quad - 45$$

الدالة (F) سنعطى بالمعادلة (15) مثلما :-

$$F = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

ولهذا فالمعادلة (45) تصبح :-

$$\begin{aligned} \ell_z \psi &= \frac{h}{2\pi i} RT \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{d\phi} (e^{im\phi}) \\ &= \frac{h}{2\pi i} RT \frac{im}{\sqrt{(2\pi)}} (e^{im\phi}) \\ &= \frac{mh}{2\pi} RTF \end{aligned}$$

or 
$$\ell_z \psi = \frac{mh}{2\pi} \psi$$

مرة أخرى فالعملية تملك إنتاج عدد حقيقي مضروبة بدالة الموجه الأصلية ولهذا.

$$\ell_z = m \frac{h}{2\pi} \quad - 46$$

من هذا نرى أن عدد الكم المغناطيسي يعين المكون (z) للعزم الزاوي في التكامل المضروب للمقدار  $h/2\pi$ .

فلو  $\ell_x, \ell_y$  تعمل على دالة الموجه، فالنتائج سيكون ليس بعدد حقيقي مضروباً بدالة الموجه الأصلية ولهذا  $\ell_x, \ell_y$  ليست كمياتها واضحة.

لأجل قيمة محددة للحد ( $\ell$ )، أعلى قيمة للحد ( $m$ )، سوف يعين بواسطة  $m=\ell$ ، ولهذا فإن أعلى قيمة للحد  $\ell_z$  هو  $(\ell h/2\pi)$ . هذا قد يكون أقل من  $(\ell h/2\pi) \sqrt{\ell(\ell+1)}$ ، ولهذا المكون (z) للعزم الزاوي يجب أن يكون أقل من مجموع العزم الزاوي. هذا التتابع لمبدأ عدم التأكد (uncertainty-principle). فلو  $L_z$  تكون مساوية لمجموع القيمة للحد  $L$ ، بعد ذلك كل من  $L_x, L_y$  سوف تأخذ قيمة صفر. في هذه الحالة كلاً من المقدار للعزم الزاوي والإتجاه

للمحاور حول الحركة التي تحدث ستكون معلومة التحديد. علاوة على ذلك، فلو كانت  $L_z$  مساوية للحد ( $L$ ). سوف يحصر للحركة في سطح ( $xy$ )، ولهذا سوف يكون مداره عبارة عن مسطح. فثلاً  $L_z$  يجب أن تكون أقل من ( $L$ ). المدار السطحي لا يسمح أو لا يجيز في وصف ميكانيكا الكم لذرة الأيدروجين.

طريقة أخرى تشرح هذه الحقيقة، نعتبر أن العزم الخطي يكون بصفر في اتجاه  $P_z$ ،  $(z)$ ، للجزء المحدد للمسطح ( $xy$ ). بالإضافة، القيمة للمحور  $z$  والخاصة بالجزء يجب أيضاً أن تكون بصفر. الشك في المحور  $z$  هو ( $\Delta z$ ) أو عدم التأكد في المحور ( $z$ ) هو ( $\Delta z$ )، وعدم التأكد في العزم الخطي في المحور ( $z$ ) هو ( $\Delta P$ )، أيضاً كلاهما بصفر: ومن ثم، حاصل ضرب  $\Delta z \cdot \Delta P_z = 0$  حيث يعتبر هذا هو مبدأ عدم التأكد.

في المعادلتين (44)، (46)، لربما نفهم أنه ليس فقط يكون مجموع العزم الزاوي محدود للقيم المعينة بواسطة المعادلات السابقة الذكر، ولكن التوجيه سيخصص للأخذ في اعتبار محدد. المحور ( $z$ ) يجب أن يكون صحيح مضروباً في المقدار  $(h/2\pi)$ .

هذا التوجيه المحدود في بعض الأحيان يعرف بالفترة المكملة. مثل هذا يمكن تفسيره، بمثال بالمرجع للوضع حيث  $=1$ . لمثل هذا المثال

$$L = \sqrt{2} \frac{h}{2\pi}$$

وا 
$$L_z = \frac{h}{2\pi}, 0, -\frac{h}{2\pi}$$

بعد ذلك  $m = +1, 0, -1$  for

وطول مجموع متجه العزم الزاوي سيكون إذا مساوياً للحد  $\sqrt{2} (h/2\pi)$ . فبالنسبة  $L_z=0$ ، المتجه  $L$  يجب وقوعه في السطح المخروطي (Conical surface)، والنقطة لأعلى في الإتجاه الموجب، وأما بالنسبة ( $L_z=-h/2\pi$ ). حيث المتجه ( $L$ ) يجب أن يقع في السطح المخروطي. والنقطة لأسفل في الإتجاه ( $z$ ) السالب، هذا يمكن شرحه في الشكل (4a) بتمثيل الثلاث محاور، وفي الشكل (4b) حيث الأشكال الممثلة قد رسمت في محورين فقط لنرى كيف للأطوال المتجهة ( $L$ ،  $L_z$ ) تعين الزاوية للقمع في حالة وقوع المتجه ( $L$ ). والمتجه ( $L$ ) يجب أن يكون حر للحركة في السطح المخروطي، لأن لو أن إتجاهه كان ثابتاً فيكون المضمون هو أن الإلكترون يتحرك في مدار مسطح.

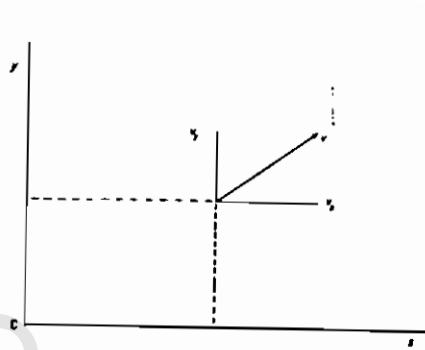


Fig. (3): Angular momentum in terms of linear momentum

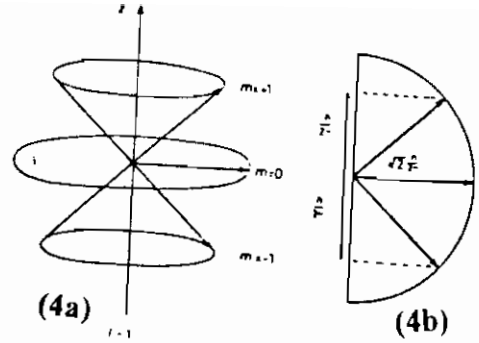


Fig. (4): Surface quantization

ومن الواجب ان نلاحظ بمرور هذا، فالإختيار للمحور (z) مثلما المحور المكم الذي يعتبر محدد تماما واساسا من الطريق المحدد لتلك المحاور القطبية الدائرية. والتي تكون متعلقة بالمحاور الكارتيزيانية Cartesian coordinate.

### The hydrogen wave function : الدالة الموجية للأيدورجين :

الدالة الموجية الكلية  $\psi(r, \theta, \varphi)$  عبارة عن ناتج لكل من الدوال (R, T, and F) كما هو مبين بالمعادلة (4). وتعتمد الدالة الموجية الكلية على كل أعداد الكم الثلاثة، الدالة (R) تعتمد على (n, l) وتعتمد الدالة (T) على (l, m)، وكذلك الدالة (F) تعتمد على (m). هذا العرض ما يتكرر كثيرا إختصارا بواسطة:

$$\psi_{n, l, m}(r, \theta, \varphi) = R_{n, l}(r) \cdot T_{l, m}(\theta) \cdot F_m(\varphi) \quad - 47$$

الدالة ايجن لذرة الأيدروجين تعرف بالمدارات، وتسمى طبقاً لقيم (n, l) القيمة العددية (n) تكون تابعة بواسطة الرموز الميمنة القيمة للزمر (l) طبقاً لما يلي:

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

$$s \quad p \quad d \quad f \quad d$$

ومن ثم من المفروض تعيين القيمة (m) ربما تنجز هذه بواسطة إضافة دليل إلى تدوين المدار. مثال : المدار، حيث  $n=1, l=1, m=-1$ ، ربما تدون بالشكل  $2p_{-1}$ . إضافة،

دالة الموجة ربما تحدد بواسطة قيم لكل من  $(n, l)$  في الأقواس. إذا الدالة الموجية للمدار  $l_s$  كتب  $(l, 0)$  ، وبالنسبة للمدار  $(3, 2)$  ،  $(3, d)$  ،  $(3, 2)$  ،  $\psi$ .

والمغزى للمدارات الايدروجينية غالبا اعتبارها بواسطة اخذ الدالة النصف قطرية على انفصال.  $R$  ، ودالة العزم ،  $TF$  . الدالة الزاوية قد تمثل بواسطة الرمز الوحيد  $(Y)$  ، ولهذا.

$$T_{l, m}(\theta) \cdot F_m(\varphi) = Y_{l, m}(\theta, \varphi)$$

و

$$\psi_{n, l, m}(r, \theta, \varphi) = R_{n, l}(r) \cdot Y(\theta, \varphi) \quad - 48$$

### The radial function

### دالة النصف قطرية

فمن الواجب ان نؤكد مرة اخرى ان الدوال النصف قطرية نفسها لا تاخذ اهمية فيزيائية. الكمية  $RR^2$  يمكن، على أى حال، استخدامها لحساب احتمالية وجود الالكترون في مكان محدد. في أى اتجاه، من النواه. بعد ذلك الدوال النصف قطرية لا تحتوى على اعداد معقدة مثل ما هو نفس في  $R^2$  ، والقيمة المهمة هي  $R^2 dV$  وهي التى تكون فيه الاحتمالية لوجود الالكترون في الحجم  $(dV)$  في أى اتجاه من النواه. لأنه من القول. هذه الاحتمالية هي لاجداد الالكترون داخل الغلاف الكروى للحجم  $(dV)$  مع النواه عند مركز الغلاف.

الحجم للغلاف الكروى له نصف قطر  $(r)$  وسمك  $(dr)$  هو  $4\pi r^2 dr$  ولهذا فلن لاحتمالية لاجداد الالكترون بين  $(r)$  و  $(r + dr)$  من النواه هو  $4\pi r^2 R^2 dr$  . وعادة هذه لاحتمالية تمثل وذلك برسم  $4\pi r^2 R^2$  مقابل  $(r)$  والتي تعطى رفعه الى التوزيعات المحتملة لنصف قطرية الشائعة.

### The angular function

### الدالة الزاوية

جزء الزاوية لدالة الموجة تعتبر مهمة لتكوين الرباط الكيميائى والتي تعتمد على التداخل المناسب للمدارات للذرات الإفرادية المكونة للرباط. ويدخل التداخل فى دالة الموجة تكليفاً. ولكن من غير المناسب حدوث التداخل سوف يعتمد على الشكل للمدارات والتي تعتبر محكومة بواسطة الدالة الزاوية، والتي فى بعض الأحيان معلومة مثل التوافقية

الكرية. فبالنسبة للمدارات (s) حيث  $l=0$  فالدالة الزاوية تكون  $Y_{0,0}$  وسوف تعطى بواسطة:-

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad - 49$$

هذه الدالة تعتبر دائرية متماثلة :-

وبالنسبة للمدارات  $l=1$ ،  $l=0$ ،  $l=1$ ،  $l=1$ ، إذا يوجد ثلاث دوال زاوية تقابل الثلاث

قيم للحد (m). وهى :-

$$Y_{1,0} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta \quad - 50$$

$$Y_{1,+1} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{(2\pi)}} \sin \theta \cdot e^{i\phi} \quad - 51$$

$$Y_{1,-1} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{(2\pi)}} \sin \theta \cdot e^{-i\phi} \quad - 52$$

فمثلا  $Y_{1,0}$  تكون دالة حقيقية فإنه يمكن رسمها وتمثيلها بواسطة المخطط ويمكن لهذه أن تتم في أكثر من طريقة. طريقة واحد كمثل، سوف نرسم دالة جيب التمام الزاوية (جنا) مع الإحداثيات المحاور السينية (x). الممثلة في  $Y_{1,0}$ ، والمحور السيني الممثل للحد ( $\theta$ ). هذه الطريقة ستكون ببساطة ستولد منحنى عادى لجيب التمام بين  $\theta=0$ ،  $\theta=2\pi$ . والسعة للمنحنى تصبح  $(\sqrt{3})/2(\sqrt{\pi})$ .

وأكثر الطرق المستخدمة الممثلة للدالة الزاوية هى بواسطة الرسم القطبى كما هو مبين في الشكل (5). فبالنسبة لقيمة محددة للحد ( $\theta$ ) فطول الخط  $(\sqrt{3})/2(\sqrt{\pi}) \cos \theta$  سترسم من الأصل، ولهذا ستعمل زاوية  $\theta$  مع المحور (z). مثلاً  $Y_{1,0}$  تكون مستقلة عن  $\psi$ . هذا الخط ربما يأخذ أى اتجاه مع الإحتفاظ للمحور السينى، وهى تتولد دائرة، مستوى الدائرة تصبح موازية للمستوى (xy). بتغيير ( $\theta$ ) من (0) إلى  $(2\pi)$  سوف تولد أسطح لكرتين مع مركز لهما يقع على المحور (z). كما هو مبين في الشكل (5) فمن المهم أن نحقق أن هذا الرسم لا يأخذ مفهوم فيزيائى. هذا فحسب طريقة تبين الدالة الموجية  $Y_{1,0}$  بالرسم التخطيطى.



على الرغم من هذه الرسومات للدوال الزاوية تعتبر كلها مصادفة شائعة يمكن كلها غير مفهومة، لو أنها غير مهم تصحيحها. وهذه الصعوبة ربما التغلب عليها بواسطة طريقة بسيطة أو غير مركبة من التمثيل.

فمن منظر تكوين الرابطة الكيميائي، فالإعتبار المهم هو مدى تداخل مدارين ذريين لذرتين والتي ترتبط معا.

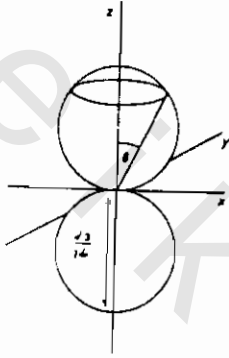


Fig. (5): Polar diagram of the  $Y_{1,0}$  function

فلو  $Y_{1,0}$  إتخذت، فالمعادلة 50، تبين أنها تأخذ قيمة عظمى عندما جتا  $\theta$  تكون عظمى، بمعنى، عندما  $\theta=0$ . بالرجوع إلى المعادلة (1) في الفصل السابع، التي تشرح العلاقة بين المحاور الكارتيزية والإحداثيات القطبية، وتبين أن الإتجاه المقابل للزاوية  $\theta=0$  تقع على طول المحور (z). الدالة  $Y_{1,0}$  فربما يمكن تمثيلها بواسطة سهم مرسوم على طول المحور (z)، مثلما هو في الشكل (6). ومن المهم أن نلاحظ أن القيم الكلية للدالة تكون موجبة فوق السطح (xy) وبقية سالبة أسفل السطح المذكور.

هذه العلاقة ناتجة من القيم لجتا الزاوية في هذه المناطق وهذه غير متناسقة تكون مهمة في إيجاد القيم للمدارات الحادثة أعلى في الرابطة الكيميائي.

الدول  $Y_{1,+1}$ ،  $Y_{1,-1}$  لا تستطيع تمثيلها بواسطة التخطيط، لأنهما معقدة بعض الشيء وتحتوي جزء تخيلي. والجزء التخيلي ناتج عن معادلة (F) والتي درست سابقاً في الفصل السابع والخاصة بالجسيم على الحلقة. ولقد لاحظنا سابقاً في نهاية هذا الفصل أنها تكون صفة لتلاشي دوال الموجه وأن أي تركيبة خطية للأطراف للمجموعة المتلاشية التي تعتبر أيضاً دالة إيجن (دالة ذاتية) لنفس الطاقة مثلما دالة الموجه الأصلية.

فمثلما تكون متلاشية، التركيبية الخطية لهما سوف يكونان دالة إيجن، وهذه التركيبية الخطية ستتكون تماماً مثلما كان في المعادلة (21)، (23) في الفصل السابع المتولدة في الفصل السابع إذاً.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{1,+1} + Y_{1,-1}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{(2\pi)}} \sin \theta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{(2\pi)}} \sin \theta \cos \varphi \end{aligned} \quad - 53$$

و

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_{1,+1} - Y_{1,-1}) &= \frac{1}{i\sqrt{2}} \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{(2\pi)}} \sin \theta (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cos \varphi \end{aligned} \quad - 54$$

والإتجاه للقيم العظمى للدوال في المعادلة (53)، المعادلة (54) والتي يمكن تمثيلها تخطيطياً بواسطة نفس الطريق مثلما قد طبقت للدالة  $(Y_{1,0})$ . إذا المعادلة (53) تأخذ قيمة عظمى عندما جا  $\theta$  جتا  $\varphi$  تكون عظمى، بمعنى أن عندما  $\theta = \Pi/2$ ،  $\varphi = 0$ . هذا الإتجاه يقع على طور المحور X. بالمثل، القيمة العظمى في المعادلة (54) تحدث عندما جا  $\theta$  جتا  $\varphi$  تعتبر عظمى، عندما  $\theta = \Pi/2$ ،  $\varphi = \Pi/2$ ، وهذا الإتجاه يقع على طول المحور (y).

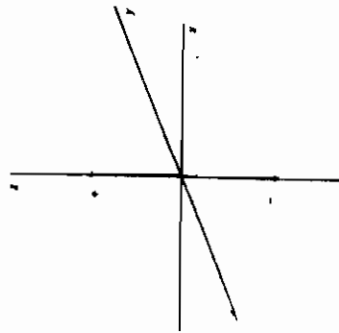


Fig. (6): Directional properties of the  $Y_{1,0}$  function

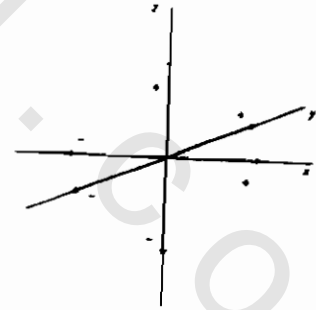


Fig. (7): Directional properties of the p-orbital.

الدوال المعقدة  $Y_{1,+1}$  ،  $Y_{1,-1}$  ، يمكن يرتبطا لينتجا دالتين حقيقيتين فى كثير لنفس الطريق مثلما الإزاحة التخيلية المتحولة إلى الإزاحة الحقيقية فى دراسة فى الفصل الثانى عن الحركة التوافقية البسيطة.

القيم العظمى للدوال المبينة بالمعادلات 50, 53, 54 ممكن تمثيلها على أحد الرسم البيانى كما هو مبين فى الشكل (7). فمن هذا ربما نرى أن الإتجاهات للقيم العظمى للدوال الزاوية تكون متجهة بالتبادل زوايا حادة.

الحقيقة أن القيم العظمى للدوال الزاوية تقع فى الإتجاهات  $(x, y, z)$  ناتجه من الحقيقة أن الزاوية تعتمد للدوال المعطاه فى المعادلات 50, 53, 54 وتكون بنفس الزاوية المعتمدة للمحاور  $x, y, z$  على التوالى. هذه يمكن أن نراها من العلاقة بين المحاور الكارتيزية والمحاور القطبية الدائرية والتي تعطى فى الفصل السابع بواسطة

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad - 55$$

المدارات (P) للمعادلات (50)، (53) ، (54) تعطى الزاوية التبعية، والتي المنقبة بالرموز  $(P_x, P_y \text{ and } P_z)$  على التوالى. متذكرون أن مجموع الدالة الموجبة تحتوى الدالة النصف قطرية، والثلاث مدارات لـ P يمكن التعبير عنها كما يلى :-

$$P_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{1,+1} + Y_{1,-1}) R_{2,1} \quad - 56$$

$$P_y = \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_{1,+1} - Y_{1,-1}) R_{2,1} \quad - 57$$

$$P_z = Y_{1,0} \text{ ، } R_{2,1} \quad - 58$$

بالنظر إلى، نجد أنه بينما  $m=0$  بالنسبة للمدار  $P_z$ ، فالمدارات  $P_x, P_y$  كل منها هينة  $m=-1$  ،  $m=+1$ .

علاوة لهذه النقطة من الممكن إعتبار الدوال الإحتمالية الزاوية للمدار P هذه الدالة بالنسبة لدالة الموجه  $Y_{1,0}$  تعطى بواسطة  $Y_{1,0} \cdot Y_{1,0}^\circ$  مثل  $Y_{1,0}$  الدالة الحقيقية،  $Y_{1,0}^\circ$  تغير هى الدالة  $Y_{1,0}$ ، الدالة الزاوية المحتملة يكون الحصول عليها من المعادلة (50) مثل:

$$Y_{1,0}^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta \quad - 59$$

فالدوال  $Y_{1,-1}$ ،  $Y_{1,+1}$  عبارة عن دالات معقدة لأنها تحتوى على جزء تخيلى. والدالات المحتملة حقيقية، على أى حال وسوف نحصل عليها من المعادلة (51, 52) كما يلي:-

$$(Y_{1,+1} \cdot Y_{1,+1}^*) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{(2\pi)}} \sin \theta \cdot e^{i\varphi} \left( \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{(2\pi)}} \sin \theta \cdot e^{-i\varphi} \right)$$

$$\text{أو} \quad = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \quad - 60$$

بالمثل

$$(Y_{1,-1} \cdot Y_{1,-1}^0) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \quad - 61$$

ومن الواجب أن نلاحظ أن الدوال المحتملة المعطاه بواسطة المعادلات 59, 60, 61 كلها مستقلة للزاوية  $(\varphi)$  وكلها متماثلة حول المحور  $(z)$ . علاوة على ذلك الدوال المقابلة للمحور  $m=-1$ ،  $m=+1$  تعتبر متماثلة. المطابق السابق لحركة عكس عقرب الساعة للإلكترون حول المحور  $(z)$ . والمطابق لحركة عقرب الساعة. مثل:

$$P_z = Y_{1,0} \cdot R_{2,1}$$

والدوال المحتملة الزاوية بالنسبة  $(P_z)$  أو  $(Y_{1,0})$  تكون ماثلة. وفي حالة  $P_y$ ،  $P_x$  عبارة عن مخلوط لكل من  $Y_{1,-1}$ ،  $Y_{1,+1}$ ، على أى حال، الوضع يعتبر على الأصح مختلف، وربما عند أول وهلة معروضة صعبة، معنا الدوال المحتملة الزاوية للمحور  $P_x$ ،  $P_y$  مثل  $Y_x^2$ ،  $Y_y^2$  على التوالى. المعادلات 53, 54 تعطى: وأن تلك الدوال المحتملة بوضوح تختلف عن:

$$Y_x^2 = \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \quad -62$$

وا

$$Y_y^2 = \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \quad -63$$

تلك المعادلات 60, 61. فعندما نتذكر أن  $P_x$ ،  $P_y$  عبارة عن مخلوط لكل من  $Y_{1,-1}$ ،  $Y_{1,+1}$ ، على أى حال، من الواضح أكثر عقلانية لمقارنة الدوال المحتملة الزاوية.

$$(Y_x^2 + Y_y^2) \text{ and } (Y_{1,+1} \cdot Y_{1,-1}^0 + Y_{1,-1} \cdot Y_{1,+1}^0)$$

هذه المجموعات ربما تشتق من المعادلات 62، 63 ومن المعادلات 60، 61 على

التوالى:-

$$\begin{aligned}(Y_x^2 + Y_y^2) &= \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \\ &= \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi)\end{aligned}$$

أو  $(Y_x^2 + Y_y^2) = \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta$  - 64

وأيضا  $(Y_{1,+1} \cdot Y'_{1,+1} + Y_{1,-1} \cdot Y'_{1,-1}) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta + \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$   
 $= \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta$  - 65

ومن الممكن أن نرى أن الدوال المحتملة الزاوية المشتقة من  $(Y_{1,+1})$  مع  $(Y_{1,-1})$  ومن  $P_x$  ،  $P_y$  هي نفسها. بالإضافة إلى ذلك وأنها كلها متماثلة حول المحور (z).

فى هذا الإحتفاظ من المهم أن نلاحظ أن المركبات حيث الرباط  $\pi$  متكون، فعلمية توزيع الإلكترونات فى المدارات تعتبر إسطوانية متماثلة حول محور الرباط. ففى النتروجين كمثال. حيث الرباط ( $\sigma$ ) المتكون بواسطة تداخل محورى للمدار ( $P_z$ ) من كل ذرة من  $P_x$  ،  $P_y$  عند زاوية قائمة لكل منهما وأيضاً زاوية قائمة للرباط ( $\sigma$ ). هم كذلك من الرباط ( $\pi$ ) وتوزيع الإلكترون فى جزىء الإلكترون عبارة عن تماثل إسطوانى حول المحور النتروجين - النتروجين.

والنقطة والتي نحن الآن بصدها فى المناقشة السابقة فى علاقة الرباط (P) يمكن تطبيقها أيضاً على المدارات (d) وكذلك (2d)، مثال لذلك الدالة الزاوية بالنسبة  $m=0$  سوف تكون حقيقية.

$$Y_{2,0} = N (3 \cos^2 \theta - 1) \quad - 66$$

حيث ( $\bar{N}$ ) ثابت التعادل، مثلما  $\cos^2 \theta$  عبارة عن مربع للزاوية المعتمدة لمحاور (2) (المعادلة 55) هذه المدارات نرسم  $dz^2$ . إذاً

$$dz^2 = Y_{2,0}$$

المدارات بالنسبة  $m = \pm 1, \pm 2$  تعطى بواسطة

$$Y_{2,1} \pm 1 = N \sin 2 \theta. e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2l} \pm 2 = N \sin^2 \theta. e^{\pm 2i\phi} \quad - 67$$

حيث (N) أيضاً ثابت التعادل. هذه المدارات المعقدة سوف تحول إلى بوال حقيقية وذلك بأخذ الإرتباط الخطى (الإتحاد الخطى) والدليل الكارتيزيان والمشتق من نفس الإعتبارات مثلما طبق على المدارات P. وهى :-

$$d_{xz} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{2l+1} + Y_{2l-1})$$

$$d_{yz} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_{2l+1} - Y_{2l-1})$$

- 68

$$d_{x^2-y^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{2l+1} + Y_{2l-1})$$

$$d_{yz} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_{2l+2} - Y_{2l-2})$$

ومن الواجب أن نلاحظ أنه بالنسبة للمدارات المتلاشبية، أى إرتباط خطى يعتبر دالة مقبولة. ومن الضروري، على أى حال، أن الأطراف لأى مجموعة متلاشبية للمدارات تكون متعامدة كل على الآخر. إذا  $Y_{2,0}$ ،  $Y_{2,1}$ ،  $Y_{2,2}$  أيضاً تكون عمودية واحد على الآخر، (متعامدة). وتكون مقبولة لمجموعة من المدارات. وكذلك أيضاً المدارات المعطاه بالمعادلات (68) أيضاً كلها متعامدة وتعطى كذلك مجموعة لمدارات مقبولة. هذه إذا، على أى حال، ليست مقبولة لخلط مجموعة الأطراف من كل مجموعة، ومن ثم  $d_{xz}$ ،  $Y_{2,1}$  كمثال ليستا متعامدة.

### Electron spin

### الإلكترون المغزلى :

فى الفصل الأول، لقد أشرنا سابقاً أن عدد الكم الرابع يعتبر مطلوباً لتعيين حالة الإلكترون فى الذرة وهذا مطلوب نشأته من الملاحظات من أن عديد للخطوط الأسيكتروسكوبية والتي تعتبر مزدوجة، مكونة خطين أكثر إتصافاً معاً. جودسميت، ألين Goudsmit & Uhlenbeck إقترحا أن الإلكترون له عزم زاوى فعلى وحقيقى حيث تسهم فى مجموع العزم الزاوى. هذا العزم الواضح غالباً ما يعرف بالمغزلى بالممثل مع الوضع التقليدى، حيث الجسم له حجم محدد يلف حول محوره وسوف يأخذ عزم زاوى محدد.

وعزل الإلكترون سوف يعامل بنفس ما يشبه للمدار العزم الزاوى. عدد الكم (s) يعتبر مصاحب مع العزم الزاوى الكلى المغزلى، وعدد الكم  $m_s$  يكون مصاحباً مع مكون (z) للمغزلى ( $s_z$ ). وعدد الكم (s)، عبارة عن مغزلى مشابه لكل من (m)، إذا بالنسبة لمدار العزم الزاوى هناك توجد علاقات

$$L = \sqrt{[\ell(\ell+1)]} \frac{h}{2\pi}$$

$$L_s = m \frac{h}{2\pi}$$

وأيضاً بالمثل بالنسبة للعزم الزاوى المغزلى

$$S = \sqrt{[S(S+1)]} \frac{h}{2\pi} \quad - 69$$

$$S_z = m_s \frac{h}{2\pi} \quad - 70$$

لحساب بالنسبة للملاحظات المعملية، فعدد الكم (s) سوف يحدد بقيمة وحيدة ( $1/2$ ) وعدد الكم  $m_s$  يمكن أن يأخذ القيم ( $-1/2$ )، ( $+1/2$ ). كما ذكر سابقاً فى الفصل الأول سينشأ طبيعياً، ويستخدم لتعيين التماثلية والغير متماثلة لدالة الموجة. ديراك Dirac's قرب وذلك باستخدام اعتماد الزمن التام لمعادلة شرودنجر واعتبر الحركة للإلكترون من نقطة لشكل النسبية.