المطيافية

المحور الأول

تاريخ المطيافية

المحور الثاني

2-النموذج الكوكبي لذرة الهيدروجين

1-2الدراسة التجريبية لطيف الاصدار لذرة الهيدروجين

بمقارنة طيف الاشعاع الحراري المنبعث من الجسم الاسود وطيف الانبعاث (الإصدار) لذرة الهيدروجين نلاحظ ما يلي:

- طيف الاصدار الحراري مستمر يحتوي على كل الالوان
- طيف الإصدار لذرة الهيدروجين غير مستمر اي نميز فقط بعض الخطوط الملونة التي توافق اطوال امواج معينة يمكن قياسها باستعمال جهاز المطيافية ((Spectromètre

استنادا الى هذه النتائج التجريبية قام العالم بالمر (Balmer)في1885 بنشر علاقة تجريبية تسمح بحساب اطوال الموجة لطيف ذرة الهيدروجين

$$\lambda_m = (364{,}56) \quad \frac{m^2}{m^2-4} \quad , m = 3,4,5, \dots \qquad (2\text{-}1)$$

هذه العلاقة قام بتعميمها ريدبارغ Rydberg سنة 1890تحت اسم علاقة بالمر ريدبارغ (Balmer -Rydberg)

$$\frac{1}{\lambda_m} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad , n = 3,4,5, \dots \qquad (2\text{-}2)$$

حيث R_H ثابت ريدبارغ

$$R_H = 1{,}09677 \times 10^8 \quad (m^{-1}) \qquad (2\text{-}3)$$

2-2نموذج بور لذرة الهيدروجين

في هذا النموذج يفرض بور ان الالكترون يدور في مدارات دائرية حول البروتون

1-2-2مسلمات بور

في1913 نيلس بور اقترح نموذجه الذري الذي يعتمد على المبادئ الكلاسيكية (المبدأ الثاني لنيوتن) كذلك يعتمد على مبدا انتقال الطاقة عن طريق حزمات عير قابلة للتقسيم (الكوانتا)

هذا النموذج عوض نموذج رذارفورد هذا الاخير الذي لم يستطيع تفسير الطيف غير المستمر للهيدروجين كذلك لم يستطع تفسير بقاء الالكترون في مداره حول النواة (لان في النظرية الكلاسيكية عندما تكون شحنة في حركة تفقد الطاقة وبالتالي الالكترون سيسقط على النواة)

ولتفسير ما عجز عن تفسيره نموذج رذارفورد قام بور باقتراح نموذجه الدي يعتمد على المسلمات التالية

ا) المسلمة الاولى مسلمة المدارات postulat des orbites

الالكترون يدور حول النواة في مدارات مسموحة تتميز بما يلي:

- (شرط التكميم) العزم الحركي للإلكترون في هذه المدارات المسموحة مكمم حسب العلاقة التالية

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = m v_n r_n \vec{u} \qquad (2\text{-}4)$$

$$L = m v_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \qquad (2\text{-}5)$$

n هو العدد الكمي الرئيسي (n=1,2,3,...)

m كتلة الالكترون

r_n نصف قطر المدار حول النواة

v_n السرعة الخطية في المدار، h هو ثابت بلانك

ب) المسلمة الثانية مسلمة اصدار وامتصاص الطاقة postula d' émission et absorption

كل مدار مسموح يمثل مستو طاقوي محدد، كل انتقال للإلكترون من مدار مسموح الى مدار مسموح اخر يكون مصحوب بامتصاص او اصدار فوتون طاقوي حسب العلاقة

$$\left|E_f - E_i\right| = h\nu \quad (2\text{-}6)$$

E_i طاقة مدار الانطلاق

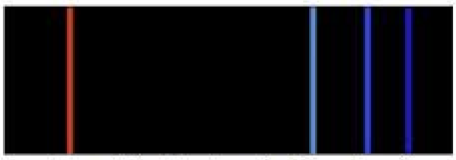
E_f طاقة مدار الوصول

ν تواتر الاشعاع الصادر او الممتص

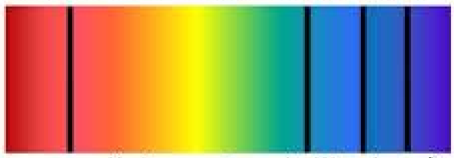
h ثابت بلانك

طيف الاصدار خطوط ملونة على خلفية سوداء

طيف الامتصاص خطوط سوداء على خلفية ملونة



Spectre d'émission de l'hydrogène

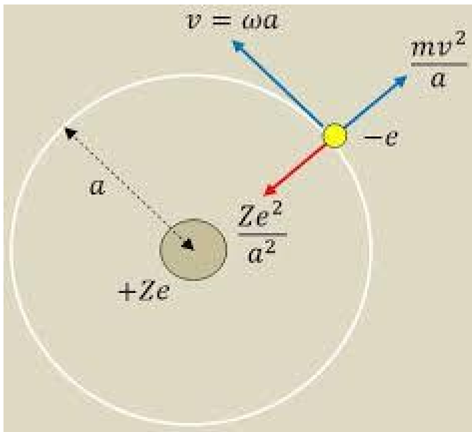


Spectre d'absorption de l'hydrogène

2-2-1دراسة المدارات

نعتبر ذرة الهيدروجين تتكون من الكترون شحنته $q_e = (-e)$ وكتلته m_e يدور بسرعة خطية حول بروتون شحنته $q_p = e$ وكتلته m_p

الالكترون تحت تأثير قوة جذب كهربائية قوة كولوم التي يوثر بها عليه البروتون



(2-7) $$F_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{|q_p q_e|}{r^2}$$

حسب المبدأ الثاني لنيوتن

(2-8) $$\sum \vec{F}_{ext} = m_e \vec{a}_n$$

(2-9) $$\vec{F}_c = m_e \vec{a}_n$$

بالإسقاط على المحور الناظم نجد

(2-10) $$F_c \vec{n} = m_e a_n \vec{n}$$

(2-11) $$F_c = m_e a_n \Longrightarrow \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r}$$

(2-12) $$r = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{m_e v^2}$$

حسب المسلمة الاولى لبور الالكترون يدور الا في مدارات مسموحة معرفة بالشرط

(2-13) $$m v_n r_n = n\frac{h}{2\pi}$$

ومنه

(2-14) $$v_n = n\frac{h}{2\pi m_e r_n}$$

وهي السرعة الخطية للإلكترون في مداره

$$r = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{m_e\left(n\frac{h}{2\pi m_e r_n}\right)^2}$$

$$r_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4e^2\pi^2 {m_e}^2 {r_n}^2}{m_e n^2 h^2}$$

وهو نصف قطر المدار المسموح

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} n^2 \qquad (2\text{-}15)$$

3-2-2الدراسة الطاقوية لذرة الهيدروجين

نعتبر النظام المكون لذرة الهيدروجين (بروتون والكترون)

ا) الطاقة الكامنة

الطاقة الكامنة للنظام المتعلقة بنصف القطر r هي $E_P(r)$

البروتون كشحنة يولد من حوله كمون كهربائي $V_P(r)$ حيث

$$V_P(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e}{r} \qquad (2\text{-}16)$$

الالكترون تحت تأثير هذا الكمون يمتلك طاقة كامنة كهربائية

$$E_P(r) = (-e)V_P(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (2\text{-}17)$$

ب) الطاقة الحركية

بما ان للبروتون كتلة كبيرة بالنسبة للإلكترون يمكن اعتبار ان البروتون ساكن والالكترون يدور من حوله بالطاقة الحركية E_c

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2$$

ولدينا مما سبق

$$r = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{m_e v^2} \Longrightarrow m_e v^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

$$E_c = -\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right) \qquad (2\text{-}18)$$

$$E_c = -\frac{1}{2} E_P \qquad (2\text{-}19)$$

ومنه الطاقة الكلية للنظام هي

$$E = E_c + E_P = -\frac{1}{2} E_P + E_P$$

$$E = \frac{1}{2} E_P = \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)$$

$$E = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (2\text{-}20)$$

بما ان نصف القطر مكمم $r = r_n = r_1 n^2$ فان الطاقة مكممة كذلك

$$E_n = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_n} \qquad (2\text{-}21)$$

نلاحظ ان طاقة ذرة الهيدروجين هي سالية وهو اختيار صحيح إذا اعتبرنا الطاقة الكامنة للإلكترون المحرر من الذرة هي معدومة حسب شرط التكميم الطاقة لا يمكن ان تأخذ اي قيمة وانما تأخذ قيم معينة التي تحقق شرط التكميم وكل مستوى يتعلق بطاقة معينة.

يجب اعطاء طاقة لذرة الهيدروجين تساوي على الاقل $w = |E_n|$ لتحرير الالكترون من المدار رقم n .

إذا كان $n = 1$ هذا العمل يسمى عمل الخروج لذرة الهيدروجين (المفعول الكهرو ضوئي)

4-2-2 مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين

تعطى عبارة الطاقة بدلالة نصف قطر المدار كما يلي

$$E_n = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_n}$$

ونصف القطر

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} n^2$$

بالتعويض نجد

$$E_n = -\frac{me^4}{8{\varepsilon_0}^2 h^2}\frac{1}{n^2} \qquad (2\text{-}22)$$

إذا كان $n = 1$ فان

$$E_1 = -\frac{me^4}{8{\varepsilon_0}^2 h^2} = -21{,}8 \times 10^{-19} \qquad (joul)$$

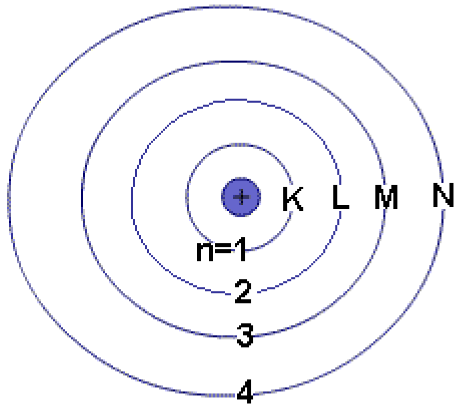
$$E_1 = -13{,}6 \quad (ev) \qquad (2\text{-}23)$$

وهي طاقة المدار الاساسي لذرة الهيدروجين (طاقة الحالة الاساسية) وهي طاقة الطبقة K

n يسمى العدد الكمي الرئيسي

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \text{ و } n = 1,2,3,\ldots \qquad (2\text{-}24)$$

$E_n(ev)$	$r_n(nm)$	الطبقة	N
-1,36	0,0529	K	1
-3,40	0,2116	L	2
-1,51	0,4761	M	3
-0,85	0,8467	N	4



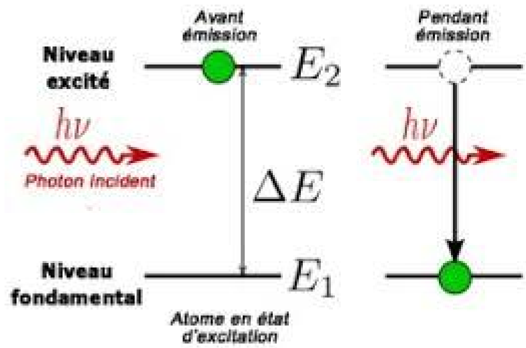
حسب المسلمة الثانية لبور الالكترون عندما ينتقل من مستوى طاقوي n_i الى مستوى طاقوي n_f يصدر او يمتص فوتون هذا الفوتون يحمل طاقة تساوي الفرق بين طاقتي المستويين

إذا كان n_i اكبر من n_f اصدار فوتون، الذرة تفقد طاقة ونتحصل على طيف اصدار متكون من خطوط ملونة على خلفية سوداء

إذا كان n_i اقل من n_f امتصاص فوتون، الذرة مثارة اي تكتسب طاقة ونتحصل على طيف امتصاص المتكون من خطوط سوداء على خلفية ملونة

طاقة الفوتون الصادر او الممتص هي

$$\Delta E_{i\to f} = \left|E_{n_f} - E_{n_i}\right| = |E_1|\left|\frac{1}{{n_f}^2} - \frac{1}{{n_i}^2}\right| = h\nu \qquad (2\text{-}25)$$



طول الموجة المتعلق بهذا الانتقال يحقق قانون ريدبارغ

$$\frac{1}{\lambda_{i\to f}} = R_H\left|\frac{1}{{n_f}^2} - \frac{1}{{n_i}^2}\right|$$

$$\frac{\nu_{i\to f}}{c} = R_H\left|\frac{1}{{n_f}^2} - \frac{1}{{n_i}^2}\right|$$

$$hc\frac{\nu_{i\to f}}{c} = R_H hc\left|\frac{1}{{n_f}^2} - \frac{1}{{n_i}^2}\right|$$

$$h\nu_{i\to f} = R_H hc\left|\frac{1}{{n_f}^2} - \frac{1}{{n_i}^2}\right|$$

بالتعويض بقانون الانتقال لبور نجد

$$|E_1| = R_H hc$$

$$-E_1 = R_H hc$$

$$R_H = \frac{-E_1}{hc} \quad (2\text{-}26)$$

بالتعويض بعبارة E_1 نجد

$$R_H = \frac{me^4}{8{\varepsilon_0}^2 h^3 c} \quad (2\text{-}27)$$

n يميز سلسلة اي مجموعة من الانتقالات نحو المستوى n $(n_i > n)$

$(m > n)$ يمثل خط في هذه السلسلة

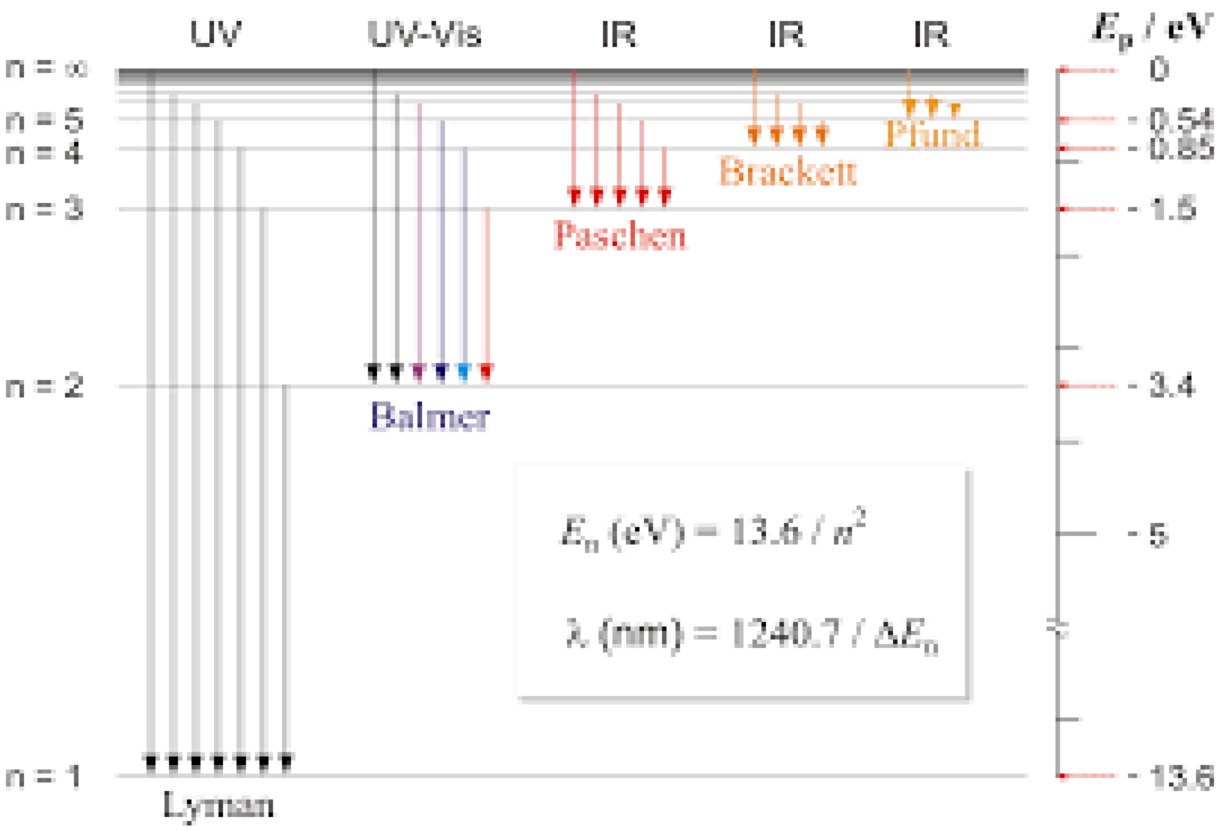
$n = 1$ سلسلة ليمان Lyman

$n = 2$ سلسلة بالمر Balmer

$n = 3$ سلسلة باشن Paschen

$n = 4$ سلسلة براكات Brackett

$n = 5$ سلسلة بافن Pfund



طاقة التأين هي اصغر طاقة يمكن تقديمها للذرة لانتزاع الكترون من المدار الاساسي

$$E_{ion} = \Delta E_{1\to\infty} = |E_\infty - E_1| = |0 - E_1| = |E_1| = 13{,}6 \quad ev \tag{2-28}$$

3-2 نموذج بور لشبيهات الهيدروجين

شبيه الهيدروجين هو شاردة تمتلك الكترون واحد فقط وZ أكبر من 1 من البروتونات رمزه الكيميائي هو $X^{(z-1)}$

نموذج بور يطبق على شبيهات الهيدروجين مع تعويض الشحنة (e)بالشحنة (Ze)

1-3-2 انصاف اقطار المدارات المسموحة: هي

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}\frac{n^2}{Z} \tag{2-29}$$

$$r_n = r_1^H \frac{n^2}{Z} = 0{,}53\frac{n^2}{Z}(A°) \tag{2-30}$$

حيث r_1^H هو نصف قطر بور وهو نصف قطر المدار الاساسي لذرة الهيدروجين

2-3-2 مستويات الطاقة: هي

$$E_n = -\frac{me^4}{8{\varepsilon_0}^2 h^2}\frac{Z^2}{n^2} \tag{2-31}$$

$$E_n = E_1^H \frac{Z^2}{n^2} = -13{,}6\frac{Z^2}{n^2}(ev) \tag{2-32}$$

حيث E_1^H هي الطاقة الاساسية لذرة الهيدروجين

3-3-2 قانون بالمر ريتز Balmer-Ritz

يبقى صحيح في حالة الايونات شبيهة الهيدروجين بشرط تعويض R_H بـ$R_H Z^2$

$$\frac{1}{\lambda_{i\to f}} = R_H\left|\frac{1}{{n_f}^2} - \frac{1}{{n_i}^2}\right| \tag{2-33}$$

4-2 عجز نموذج بور

نموذج بور هو نموذج بسيط لم يستطع تفسير بعض الملاحظات

- عجز عن تفسير مفعول زيمان Effet de Zeemanوهو التغير الذي يحصل لطيف الاصدار بوجود حقل مغناطيسي (تضاعف خطوط الطول)
- عجز نموذج بور عن تفسير طيف الاصدار للذرات متعددة الالكترونات

5-2 نموذج بور – سامرفيلد model de bohr-sommerfild

قام سامرفيلد بوضع فرضية انه في كل n مدار يوجد n مدار اهليجي تملك نفس الطاقة E_n

واظهر رقم كمي جديد l يسمى الرقم الكمي المداري

وبرهن ان هذه المدارات الاهليجية بوجود حقل مغناطيسي لا تتوجه في اي اتجاه وانما في اتجاهات معينة (ممكنة) عدد الاتجاهات الممكنة هو $(2l + 1)$

هذا ادى الى ظهور رقم كمي جديد هو m الرقم الكمي المغناطيسي ويأخذ قيم هو $-l \leq m \leq l$

نموذج سامرفيلذ استطاع تفسير تضاعه خطوط الطيف

في1924 اكتشف باولي رقم كمي جديد هو السبين يأخذ قيمتين بالنسبة للإلكترون $\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$لهما نفس الطاقة

حسب نموذج بور – سامرفيلد نرتب المداريات (orbitales) $\psi_{n,l,m}$ بالطبقة وتحت الطبقة كما هو موضح في الجدول

الطبقة n	تحت الطبقة L	الرقم الكمي المغناطيسي m	دالة الموجة ψ	المدارية (الخانة الكمية)
1	0	0	$\psi_{1,0,0}$	$1s$
2	0	0	$\psi_{2,0,0}$	$2s$
	1	-1	$\psi_{2,1,-1}$	$2p_x$
		0	$\psi_{2,1,0}$	$2p_y$
		1	$\psi_{2,1,1}$	$2p_z$
3	0	0	$\psi_{3,0,0}$	$3s$
	1	-1	$\psi_{3,1,-1}$	$3p_x$
		0	$\psi_{3,1,0}$	$3p_y$
		1	$\psi_{3,1,1}$	$3p_z$
	2	-2	$\psi_{3,2,-2}$	
		-1	$\psi_{3,2,-1}$	
		0	$\psi_{3,2,0}$	
		1	$\psi_{3,2,1}$	
		2	$\psi_{3,2,2}$	

المحور الثالث

3- الميكانيكا الموجية والنظرية الكمية

3-1 مبدا الشك لهايزمبارغ 1927

ينص مبدا الشك لهايزمبارغ انه بالنسبة لجسم له كتلة صغيرة لا يمكن تحديد وفي نفس الوقت تحديد موضعه وسرعته هذا النقص في الدقة لا يعود الى خطا في القياس وانما اضطراب يعود الى القياس نفسه بالنسبة للإلكترون لا يمكن تحديد مساره لذا لا نستعمل الخاصية الجسيمية للإلكترون انما نستعمل الخاصية الموجية ويعطى هذا المبدأ بالعلاقة التالية:

$$\Delta x.\Delta p \geq \frac{h}{2\pi} \quad (3\text{-}1)$$

$$\Delta E.\Delta t \geq \frac{h}{2\pi} \quad (3\text{-}2)$$

في غياب نظرية موحدة نعتبر الالكترون في بعض الاحيان جسم وفي بعض الاحيان موجة حسب الظاهرة المدروسة

3-2 دالة الموجة المصاحبة للإلكترون المتحرك

في المقاربة الموجية سلوك الكترون موجود في النقطة$M(x,y,z)$ في اللحظة الزمنية t يعبر عنه بدالة الموجة

$$\psi(x,y,z,t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \quad (3\text{-}3)$$

دالة الموجة $\psi(x,y,z,t)$هي مقدار رياضي تحتوي على كل المعلومات المتعلقة بالجسم المدروس وليس لها معنى فيزيائي

$\psi(x,y,z)$ هي دالة الموجة في لحظة ثابتة أي حالة مستقرة للجسم (طاقة ثابتة خلال الزمن)

امثلة

1- دالة الموجة لحسم حر $\psi = sin(x)$
2- دالة الموجة لجسم يهتز حول نقطة $\psi(x) = e^{-x^2}$

باشتقاق دالة الموجة بالنسبة للزمن والموضع نجد قانون التكميم الأول وهو:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi \quad (3\text{-}4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = \frac{p^2}{2m}\psi \quad (3\text{-}5)$$

3-3احتمال الوجود في اللحظة t

كل نقطة تعتبر موضع محتمل لإلكترون ذرة الهيدروجين في حالته الاساسية، احتمال وجوده في الحجم Vهو

$$p = \iiint_V |\psi|^2 dV \quad (3\text{-}6)$$

$$V = \iiint_V dV \quad (3\text{-}7)$$

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* \quad (3\text{-}8)$$

$$\frac{\partial p}{\partial V} = |\psi|^2 = \psi\psi^* \quad (3\text{-}9)$$

حيث ψ^*هو المرافق المركب للدالة ψ

3-4 شرط التقنين

هوانه احتمال وجود الالكترون في كل الفضاء يساوي واحد ويجب ان تحقق دالة الموجة هذا الشرط

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty |\psi|^2 dV = 1 \qquad (3\text{-}10)$$

3-5 شرط التعامد

يجب ان تحقق دوال الحالة شرط التعامد

$$\int_0^\infty \psi_n \psi_m dx = 0 \qquad n \neq m \qquad (3\text{-}11)$$

3-6 تيار احتمال الوجود

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{i2m}(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi \vec{\nabla}\psi^*) \qquad (3\text{-}12)$$

3-7 معادلة الاستقرار

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{J} = 0 \qquad (3\text{-}13)$$

3-8 معادلة شرودينغر

إذا اخذنا العلاقة التي تربط الطاقة وكمية الحركة لجسم حر $E_P = 0, E = E_c = \frac{p^2}{2m}$

بالتعويض في المعادلتين (3-4) و(3-5) نجد:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = \frac{p^2}{2m}\psi \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{p^2}{2m}\psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = \frac{p^2}{2m}\psi \end{cases} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (3\text{-}14)$$

إذا كان الجسم داخل كمون لا يتعلق بالزمن نتحصل على العلاقة التالية

$$E = E_c + V(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(r)\right)\psi = E\psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\psi = E\psi \qquad (3\text{-}15)$$

$$H\psi = E\psi \qquad (3\text{-}16)$$

وهي معادلة شرودينغر في شكلها العام حيث H هو الهاملتون ويكتب في شكله العام كما يلي:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \qquad (3\text{-}17)$$

و Δهو مؤثر لابلاس ويكتب في الإحداثيات الكارتيزية بالشكل:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (3\text{-}18)$$

معادلة شرودينغر هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية تقبل عدد غير منتهي من الحلول لكن يوجد عدد معين من هذه الحلول مقبول لأنه يجب ان تحقق الشروط عند النهايات (شرط التقنين وشرط التعامد)

كل حل من حلول معادلة شرودينغر يتعلق بطاقة معطاة وبما ان عدد الحلول محدود فان قيم الطاقة محدودة توجد فقط قيم مقبولة

طاقة نظام فيزيائي يحقق معادلة شرودينغر ويحقق الشروط عند النهايات هي طاقة مكممة

القيم المسموحة للطاقة تسمى القيم الذاتية لمعادلة شرودينغر

ودوال الموجة تسمى الدوال الذاتية لمعادلة شرودينغر

9-3 حلول معادلة شرودينغر لذرة الهيدروجين

الالكترون موجود في كمون كولومبي ناشئ من النواة

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{3-19}$$

وهو كمون مركزي يتعلق بشعاع الموضع $\vec{r}$ ومنه معادلة شرودينغر تكتب

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{3-20}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{3-21}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{3-22}$$

نختار الاحداثيات الكروية ومنه دالة الحالة تكتب $\psi(\vec{r}) = \psi(r,\theta,\varphi)$

اللابلاسيان (le Laplacien)في الاحداثيات الكروية يكتب

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tag{3-23}$$

ومن تصبح معادلة شرودينغر في الاحداثيات الكروية

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin(\theta)}\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 sin^2(\theta)}\frac{\partial^2\psi(\vec{r})}{\partial \varphi^2}\right] + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{3-24}$$

بكتابة دالة الحالة بالشكل $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)P(\theta)F(\varphi)$ نتحصل على ثلاث معادلات

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} = C_r \tag{3-25}$$

$$\frac{sin(\theta)}{P}\frac{d}{d\theta}\left(sin(\theta)\frac{\partial P}{\partial \theta}\right) + C_r sin^2(\theta) = -C_\varphi \tag{3-26}$$

$$\frac{1}{F}\frac{d^2F}{d\varphi^2} = C_\varphi \tag{3-27}$$

C_rوC_φعما ثابتان حقيقيان

حل المعادلات التفاضلية السابقة يظهر شروط على الثوابت C_r و C_φهي

$$C_\varphi = -m^2,\;\; C_r = l(l+1) \tag{3-28}$$

يمكن كذلك كتابة دالة الموجة على الشكل

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{3-29}$$

حيث $R_{n,l}(r)$ هو الدالة القطرية

$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$هي الموافقات الكروية

عند تعويض دالة الموجة في معادلة شرودينغر نتحصل على الطاقة والتي لا تتعلق الا بالرقم الكمي n

$$E_n = -\frac{me^4}{8{\varepsilon_0}^2 h^2}\frac{1}{n^2} = -13{,}6\frac{1}{n^2}\,(ev) \qquad (3\text{-}30)$$

نلاحظ ان الطاقة والارقام الكمية n, l, m هي نفسها التي هي في نموذج بور

حل معادلة شرودينغر يظهر الارقام الكمية ولكن لا يظهر السبين لان السبين ليس من خواص الذرة وانما هو خاصية ذاتية للجسم نثل الكتلة والشحنة

10-3 شكل المدارات

العبارة الرياضية للدوال الموجة هي

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+1)!}}\; e^{-\left(\frac{r}{na}\right)} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(r) \qquad (3\text{-}31)$$

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^3 \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; P_l^m(cos\theta) e^{im\varphi} \qquad (3\text{-}32)$$

a_0هو نصف قطر بور $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ و $L_{n-l-1}^{2l+1}(r)$ و $P_l^m(cos\theta)$ هما كثيري حدود من الدرجة$n-l-1$ و l على الترتيب

n يحدد الطاقة وحجم دالة الحالة

l يحدد شكل دالة الحالة

m يحدد اتجاه دالة الحالة

1-10-3 المدارية $1s$

وهي تمثل الحالة الاساسية وطاقتها هي $E_1 = -13.6\;(ev)$

$$1s \equiv \psi_{1,0,0}(n=1, l=0, m=0) \qquad (3\text{-}33)$$

دوال الحالة لهذه المدارية هي

$$R_{1,0}(r) = \left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\left(\frac{r}{a}\right)} \quad \text{و} \quad Y_{0,0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \qquad (3\text{-}34)$$

$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\left(\frac{r}{a}\right)} \qquad (3\text{-}35)$$

نلاحظ انها تتعلق فقط بـ r ولا تتعلق بـθ و φ ومنه لها تناظر كروي

2-10-3 المدارية $2p$

وهي تمثل الدالة

$$2p \equiv \psi_{2,1,m}(n=2, l=1, m=-1,0,1) \qquad (3\text{-}36)$$

اي لدينا ثلاث مدريات في نفس تحت الطبقة

نأخذ كمثال المدارية$\psi_{2,1,0}$ دوال الحالة لهذه المدارية هي

$$R_{2,1}(r)=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} re^{-\left(\frac{r}{a}\right)} \quad \text{و} \quad Y_{1,0}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}Cos\,\theta \tag{3-37}$$

$$\psi_{2,1,0}=\frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} re^{-\left(\frac{r}{a}\right)}Cos\,\theta \tag{3-38}$$

نلاحظ انها تتعلق فقط بـ r و θ ولا تتعلق بـφ ومنه لها تناظر بالنسبة للمحور z لهذا سميت بـp_z

<u>المحور الرابع</u>

4- الذرات متعددة الالكترونات

بسبب تأثير الالكترونات على بعضها البعض لا يمكن دراسة كل الكترون على حدى ومنه يجب ان نحل معادلة شرودينغر لكل الالكترونات في نفس الوقت، من اجل ذرة تحتوي علىk الكترون عبارة الهاملتون هي :

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{k}\nabla_i{}^2+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\sum_{i=1}^{k}\frac{-Z}{r_i}+\sum_{i=1}^{k}\sum_{i=1}^{k}\frac{1}{r_{ij}}\right) \tag{4-1}$$

حيث r_iهو المسافة بين النواة والالكترون رقمi و r_{ij} هو المسافة بين الالكترون رقم i والالكترون رقمj

ودالة الحالة حل معادلة شرودينغر هي دالة حالة متعددة الالكترونات ولحلها يجب وضع بعض التقريبات من بينها كتابة دالة الحالة على شكل جداء دوال الحالة لكل الكترون

$$\psi(r_1,r_2,\dots r_k)=\psi(r_1)\psi(r_2)\dots\psi(r_k) \tag{4-2}$$

ومنه يصبح لدينا نظام من k معادلة تفاضلية

$$H_i\psi(r_i)=E_i\psi(r_i) \tag{4-3}$$

$$E=\sum_{i=1}^{k}E_i \tag{4-4}$$

الاشكال في حل هذا النظام هو يجب اجاد عبارة الهاملتون H_iلكل الكترون اي اجاد الطاقة الكامنة لكل الكترون ولحل هذا الاشكال اقترح جون **سلاتر** ***John Slater*** سنة ***1930*** نموذجه الذي يعتبر كل الكترون تحت تأثير كمون مركزي ناشئ من النواة ،هذا الكمون توثر عليه الالكترونات الواقعة تحت الالكترون المدروس اي الواقعة بين الالكترون والنواة حيث تصنع حاجب بين النواة والالكترون و كأن هذا الالكترون يتأثر بشحنة نواة قيمتهاZ_i^*e وليس Zeواقترح قواعد مستخلصة من التجربة تسمى **(قواعد سلاتر)**

1-4 قواعد سلاتر

1- كل الكترون له طقة كامنة من الشكل

$$V_i(\vec{r})=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z_i^*e^2}{r} \tag{4-5}$$

2- $Z_i^*=Z-\sigma_i$ حيثσ_i يسمى ثابت الحاجب

3- ثابت الحاجب يحسب من اجل الالكترونات التي رقمها الكمي n_i حيث $n_j \le n_i$ ويدخل فيه مساهمة الالكترونات التي رقمها الكمي n_j حسب العلاقة

$$\sigma_i = \sum_{j \neq i} \sigma_{ij} \qquad (4\text{-}6)$$

لحسابه يجب اولا ترتيب مجموعة المداريات

$$[1s][2s,2p][3s,3p][3d][4s,4p][4d][4f][5s,5p][5d]\ \ldots \qquad (4\text{-}7)$$

يأخذ قيمته حسب الحالات التالية:

ا- 0 إذا كان الإلكترون (j) من مجموعة في الترتيب اكبرمن ترتيب مجموعة الالكترون (i)

ب- 0,35 إذا كانا من نفس المجموعة باستثناء $n = 1$ ياخذ القيمة 0,30

ج- إذا كان الإلكترون (j) من مجموعة في الترتيب اقل من ترتيب مجموعة الالكترون (i)

من اجل $l_i = 0{,}1$ $\quad \sigma_{ij} = 0{,}85$ إذا $n_j = n_i - 1$ و $\sigma_{ij} = 1$ إذا $n_j < n_i - 1$

من اجل $l_i = 2{,}3$ $\quad \sigma_{ij} = 1$

قيم σ_{ij} حسب هذه القواعد ملخصة في هذا الجدول

Ji /ij	1s	2s/2p	3s/3p	3d	4s/ 4p	4d
1s	0,3	0	0	0	0	0
2s/2p	0,85	0,35	0	0	0	0
3s/3p	1	0,85	0,35	0	0	0
3p	1	1	1	0,35	0	0
4s/ 4p	1	1	0,85	0,85	0, 35	0
3d	1	1	1	1	1	0,35

4- طاقة الالكترون تعطى حسب العلاقة التالية

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2}\frac{(Z_i^*)^2}{n_i^{*2}} = -13{,}6\ \frac{(Z_i^*)^2}{n_i^{*2}}\,(ev) \qquad (4\text{-}8)$$

n^* هو الرقم الاساسي الفعلي بأخذ القيم حسب الجدول

6	5	4	3	2	1	n
4,2	4	3,7	3	2	1	n^*

2-4 توزيع الالكترونات على الطبقات

توزع الالكترونات للذرات متعددة الالكترونات حسب القواعد التالية

1-2-4 قاعدة الاستقرار Règle de stabilité

الالكترون في حالته الاساسية يشغل المدار الذي لديه أدنى طاقة حسب الاماكن المتوفرة

مثال

$$H: 1s^1; He: 1s^2$$

2-2-4 قاعدة كلشكوفسكي KLECHKOWSKI

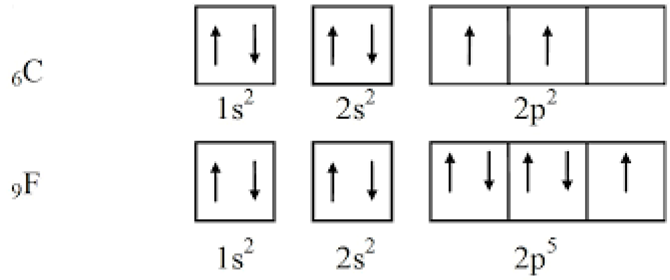
الترتيب التصاعدي لتحت الطبقات هو حسب تزايد الرقم (n + l)

اذا كان اثنان من تحت الطبقات لهما نفس الرقم (n + l)تحت الطبقة الذي لديه اصغر n هو من يمتلك اصغر طاقة

3-2-4 قاعدة هاندRègle de Hund

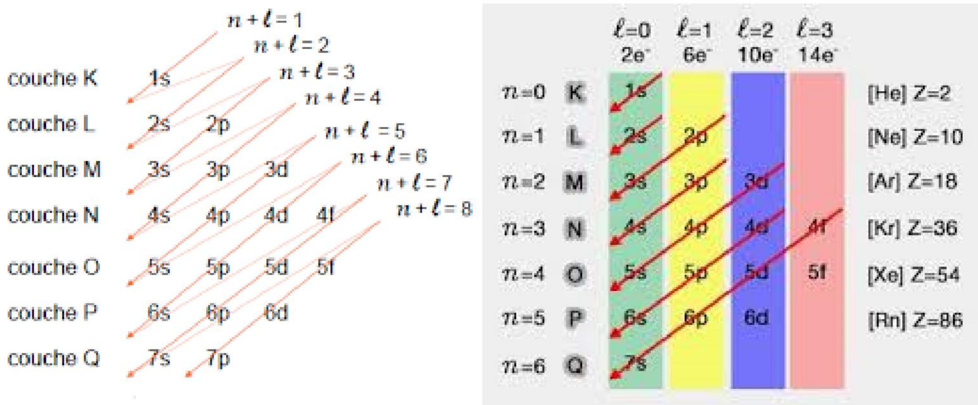
يجب ان تملا تحت الطبقة في كل مدارياتها قبل اتمام ملا المدارية بالإلكترون ذو السبين المعاكس

مثال



4-2-4 قاعدة الاستبعاد لباوليRègle de Pauli

لا يمكن في نفس الذرة لإلكترونين ان يمتلكا نفس الارقام الكمية الاربعة يجب ان يختلفا ولو في رقم واحد ،ومنه حسب هذه القواعد توزع الالكترونات حسب هذا الترتيب



المحور الخامس

5- الليزر

1-5 نبذة تاريخية

الاصدار المحرض تم اكتشافه نظريا من طرف أينشتاين في سنة *1917*عند مناقشته لإشعاع الجسم الاسود لكن هذا الاكتشاف لم يجرب فعليا الا في سنة *1854*من طرف J.P. Gordon, H.J. Zeiger et Ch.H. Townes في اول مايزر maser وهو جهاز يشبه جهاز الليزر حتى سنة 1960 قام الفيزيائي الامريكي Théodore Maiman باختراع او جهاز ليزر وهذا الاسم يتكون من الحروف الاولى لكلمات الجملة الانجليزية

Light amplification by stimulated emission of radiationوالتي تعني تضخيم الضوء بالإصدار المحَّرض للإشعاع

2-5 الامتصاص

الذرة وهي في حاله الاستقرار الكتروناتها تمتلك طاقة اساسية عند قذفها بضوء طيف مستمر اي يحوي فوتونات بجميع التوترات في هذه الحالة الالكترون يمتص الفوتون الذي طاقته تساوي الفرق في الطاقة بين طاقتي المدار الذي يوجد فيه الالكترون والمدار الذي سينتقل اليه حسب القانون

$$\left|E_f - E_i\right| = h\nu \tag{5-1}$$

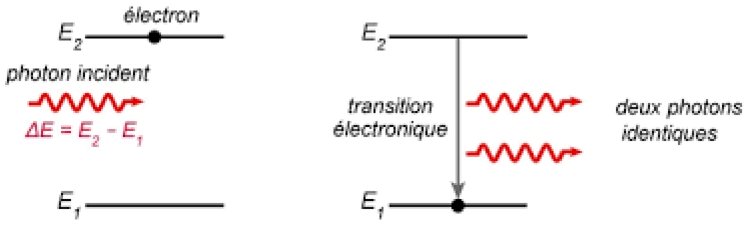
وفي هذه الحالة نقول ان الذرة مثارة والالكترون مثار

3-5 الاصدار التلقائي

وهو رجوع ذرة مثارة الى حالتها الاساسية حيث يعود الالكترون المثار الى مداره الاساسي، لان مدة مكوث الالكترون في مداره المثار صغيرة جدا من رتبة 10^{-8} ثانية الا ان في بعض الحالات يكون متوسط عمر الحالة المثارة من رتبة10^{-3} ثانية وتسمى هذه الحالة بالحالة شبه المستقرة وهي تلعب دورا في انتاج الليزر، وينتج عن الإصدار التلقائي فوتون طاقته تساوي الفرق بين طاقتي مدار الحالة المثارة الذي يوجد فيه الالكترون المثار والمدار الاساسي

4-5 الاصدار المحرض(induite) émission stimulée

في هذه الحالة مثل الحالة السابقة تكون الذرة في حالة مثارة لكن لا تعود الى حالتها الاساسية تلقائيا انما بتعريضها لضوء ذو طيف مستمر فيقوم فوتون له طاقة تساوي الفرق في الطاقة بين طاقة المدار المحرض والمدار الاساسي بتحريض الالكترون للرجوع الى حالته الاساسية فينتج عن هذا الرجوع فوتون اخر وبالتالي نتحصل على فوتونين لهما نفس الطاقة والاستقطاب والطور والاتجاه ويمكن لهذين الفوتونين تحريض ذرات اخرى وبالتالي نتحصل على سلسلة من الإصدارات المحرضة التي ينتج عنها فوتونات مترابطة وهكذا تحدث عملية الإصدار الليزري

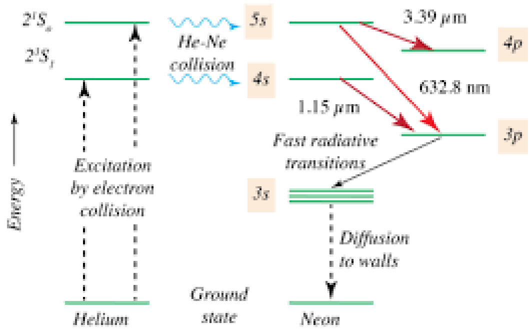


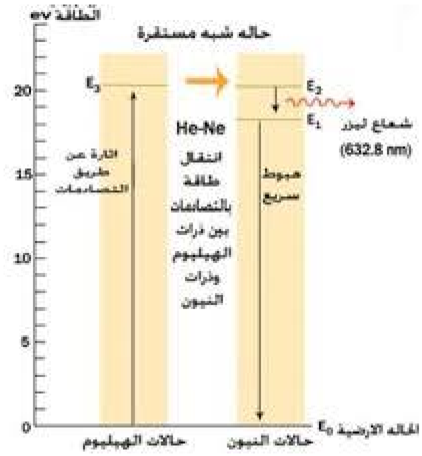
Emission stimulée

عرفنا كيف تحدث الفوتونات اصدارا وامتصاص محرضين مما يودي بانتقال الذرات من مستوى طاقوي الى مستوى اخر اقل او اعلى، وعندما تسقط أشعة ضوئية على مجموعة من الذرات يحدث امتصاص أكثر مما يحدث اصدار للفوتونات، نظرا لوجود عدد من الذرات في الحالة المستقرة أكبر بكثير من الحلات المحرضة. فلو أمكننا ان نعكس الوضع بحيث تصبح عدد الذرات المحرضة أكبر من عدد الذرات المستقرة سنحصل على اصدار للفوتونات أكثر من الامتصاص كما في الشكل الموالي ويسمى هذا الوضع بالانعكاس السكاني inversion populationوهو الشرط اللازم تحقيقه للحصول على اشعة الليزر

5-5 احداث الانعكاس السكاني بطريقة الضخ الضوئي

نعرض ذرات النظام الليزري وهي في حالة مستقرة E_1 الى ضوء مستمر يحوي جميع الاطوال الموجية و بذلك يتم اثارة عدد كبير من الذرات الى المستوى الطاقوي E_3 ثم تفقد بعض الذرات طاقتها لتنزل الى المستوى E_2 وهذا المستوى يجب ان يكون شبه مستقر متوسط عمره كبير بالمقارنة مع متوسط عمر المستوى E_3 وبهذا يجتمع عدد كبير من الالكترونات في المستوى E_2 اكبر من عددها في المستوى الاساسي E_1، فاذا مر فوتون طاقته $|E_2 - E_1| = h\nu$ فانه يحدث سيلا من الفوتونات عن طريق الاصدار المحرض ونحصل على اشعاع الليزر





6-5 انواع الليزر

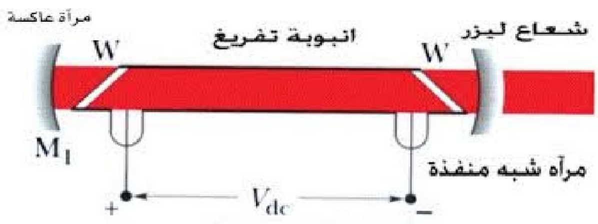
1-6-5 الليزر الغازي

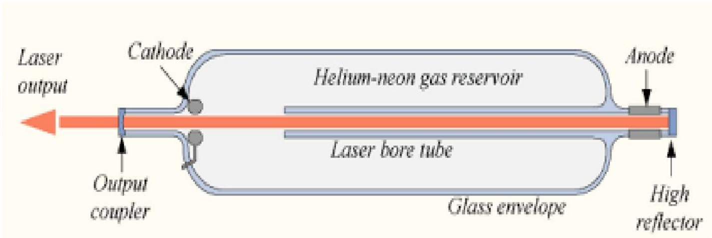
من بين انابيب الليزر الشائعة انبوب يتكون من خليط من الهليوم 20%والنيون 80% ويوجد فيه اربع مستويات للطاقة E_3, E_2, E_1, E_0 كما هو موضح في الشكل ويحدث الضخ الضوئي عن طريق التفريغ الكهربائي وينتج عن ذلك عدد كبير من الايونات والالكترونات تصطدم بذرات الهليوم ويجعل هذا ذرات الهليوم (مثارة) محرضة الى المستوى الطاقوي E_3 وهو مستوى شبه مستقر وهذا المستوى يساوي طاقة المستوى لذرة النيون $E_2 = 20{,}6ev$ وعندما تصتدم ذرة الهليون المحرضة بذرة النيون المستقرة تتحرض ذرة النيون وتثار الى المستوى E_2 و في هذه الحالة يكون عدد ذرات النيون المثارة اكبر من عدد ذرات النيون المستقرة وبهذا يتحقق الانعكاس السكاني وعند عودة ذرة النيون المثارة الى حالة الاستقرار تصدر اشعا ع ليزري طاقته $|E_2 - E_1| = h\nu$ وطول موجته يساوي 632,8nm ويستمر هذا العمل لسببين

1- تضمن الحالة شبه المستقرة للهليوم E_3 استمرارحالة الانعكاس السكاني للمستوى E_2 لذرة النيون
2- تنتقل ذرة النيون من الحالة E_0 الى الحالة المستقرة E_1 تلقائيا وبسرعة لتعود ذرة الهليون وتصدمها حيث تعود ذرة النيون الى حالة الانعكاس السكاني E_2 من جديد

وللحصول على اشعاع ليزري قوي نجعل الفوتونات المنبعثة من النيون تحريضيا تنعكس عدة مرات (عملية التضخيم) بين مرآتان M_1 و M_2 كما هو موضح في الشكل، المرآتان مقعرتان وينطبق محرقاهما تقريبا على منتصف الانبوب وتكون المرآة M_1 تامة الانعكاس اما

المرآة M_2 تكون مطلية بمادة تسمح لجزء من الاشعة بالنفاذ ليستخدم في الاغراض المطلوبة ويمثل الليزر النافذ سيلا من الفوتونات المترابطة والمتحدة في الطور والمتساوية في التواتر والمتوازية وهي تختلف عن الفوتونات في الضوء العادي كما يوضحه الشكل





2-6-5 ليزر الحالة الصلبة

ليزر الحالة الصلبة يستعمل فيه بلورات من السراميك او من الزجاج المطعم بمختلف الذرات كمضخم للإشعاع وأول ليزر استعمل فيه روبي rubis ويعتر اقوى ليزر ويعطي اشعاع من المجال المرئي الى المجال فوق البنفسجي

والليزر الأكثر استعمال الان هو Nd:YAG الذي يستعمل فيه النيوديم néodyme و اليتريوم l'yttrium(Y3Al5O12)

والضخ الضوئي يتم عبر مصباح عادي او مصباح ديود

3-6-5 ليزر الحالة الغازية

المحور السادس

6- الجزيئات الثنائية A-B

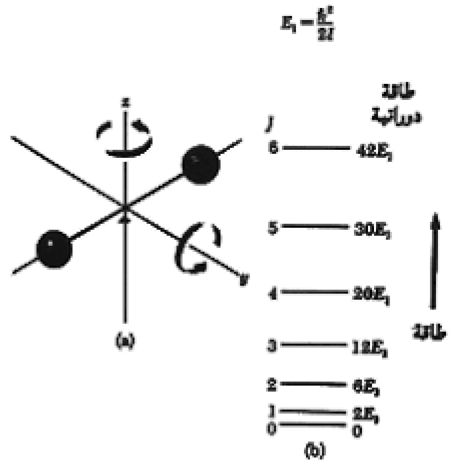
الجزيئات مثل الذرات يمكن دراسة تركيبها عن طريق الاشعة التي تمتصها او تصدرها ولهذا يجب اولا معرفة طاقة الجزيئات ونقتصر في دراستنا على الجزيئات ثنائية الذرة

1- الطاقة الالكترونية E_{el} وهي الطاقة التي تئوثر بها النواة على الالكترونات
2- طاقة نتيجة الحركة الانتقالية E_{tr} لمركز ثقل الجزيء داخل الوسط المحيط به
3- طاقة نتيجة الحركة الدورانية E_{ro} حول مركز الثقل
4- طاقة نتيجة لاهتزاز E_{vi} بين الذرات المكونة للجزيئ

الا ان الطاقة الالكترونية والطاقة الانتقالية لا علاقة لهما في التركيب الداخلي للجزيء ولا اهمية لهما في تفسير الاطياف الجزيئية ولهذا سندرس الطاقة الدورانية والاهتزازية للجزيء فقط

6-1- طاقة الحركة الدورانية للجزيء

كما قلنا سابقا ندرس فقط الجزيئات ثنائية الذرة هذه الاخيرة في دورانها حول مركز الثقل لها درجتا حرية الدوران حول المحورين العموديين على المحور الرابط بيم الذرتين، إذا سمينا المحور الرابط بيم الذرتين x فنتناول الدوران حول المحورين y و z كما هو موضح في الشكل



إذا كان ω هي سرعة الدوران على أحد المحاور فان الطاقة الحركية الدورانية للجزيء تكتب كما يلي

$$E_{ro} = \frac{1}{2} I\omega^2 \qquad (6\text{-}1)$$

حيث I هو عزم العطالة للجزيء يعطى بالعبارة التالية

$$I = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\right) r^2 = \mu r^2 \qquad (6\text{-}2)$$

حيث μ هو الكتلة المختزلة (المختصرة) للجزيء و m_1 و m_2 هما كتلتي الذرتين و r هو المسافة بين الذرتين، في الميكانيكا الكلاسيكية لا توجد قيود على مقدار السرعة الزاوية وكمية الحركة الدورانية اما في الميكانيكا الكمية فان كمية الحركة الدورانية مكممة وتعطى بالعلاقة التالية

$$I\omega = \sqrt{J(J+1)}\,\hbar \qquad ,J = 1,2,3,\ldots \qquad (6\text{-}3)$$

ومنه بتعويض المعادلة (*6-3*) في المعادلة (*6-1*) نجد الطاقة الدورانية

$$E_{ro} = \frac{1}{2I}(I\omega)^2 = \frac{1}{2I} J(J+1)\hbar^2 \qquad (6\text{-}4)$$

نلاحظ ان الطاقة الدورانية للجزيء مكممة ومنه لدينا مستويات للطاقة، والانتقالات المسموحة تخضع لقاعدة الانتقاء $\Delta J = \pm 1$ وتعطى بالعبارة

$$\Delta E_{ro} = E_J - E_{J-1} = \frac{\hbar^2}{2I}[J(J+1) - (J-1)J] = \frac{\hbar^2}{I}J = \frac{h^2}{4\pi^2 I}J \qquad (6\text{-}5)$$

حيث... $J = 1,2,3,$ و $\frac{h^2}{4\pi^2 I}J = \nu$ هو تواتر الفوتون الصادر

ومنه

$$\Delta E_{ro} = h\nu \qquad (6\text{-}6)$$

التوترات التي تجعل الجزيء ينتقل من الحالة الاساسية $J = 0$ الى الحالى المثارة الاولى $J = 1$ هي $\frac{h^2}{4\pi^2 I} = \nu$

والتواتر الموافق للانتقال من $J = 1$ الى $J = 2$ هو $\nu 2$

2-6- طاقة الحركة الاهتزازية للجزيء

عندما يحرض الجزيء تتغير حركته الاهتزازية لان الجزيء نظام مرن والرابطة بين ذراته تشبه النابض المرن، فاذا ما حدث له تحريض اكتسب طاقة اهتزازية وعندما يتعرض الجزيء لإشعاع له تواتر مناسب فان حركته وطاقته الاهتزازية تتغيران

ليكن لدينا جزيء ثنائي الذرة ونعتبر الرابطة بين ذراته كنابض ثابت مرونته k، الطاقة الكامنة للجزيء تتغير بتغبر المسافة بين الذرتين وليكن r_0 هو مسافة التوازن بين الذرتين

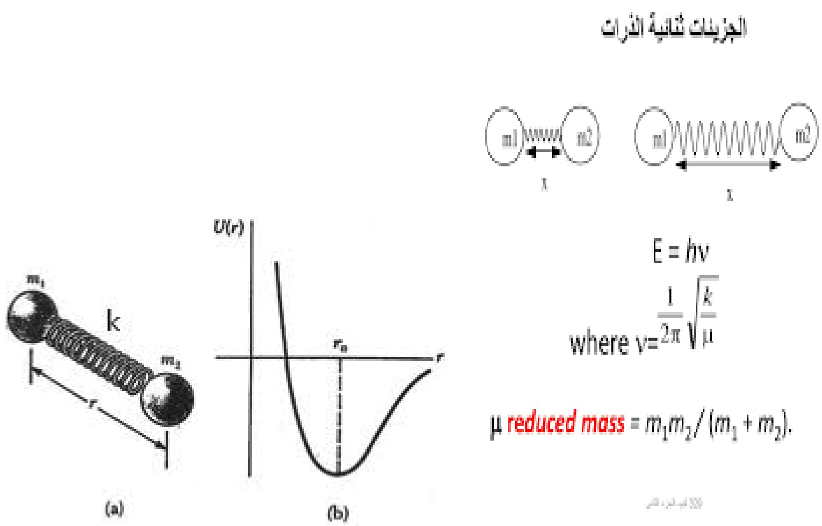
يعطى توات اهتزاز هذا النظام اعتمادا على قوانين الميكانيكا الكلاسيكية بالعلاقة التالية

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \qquad (6\text{-}7)$$

وطاقته الكامنة المرونية (الاهتزازية) تعطى بالعلاقة التالية

$$E_{vi} = h\nu_0 = \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \qquad (6\text{-}8)$$

حيث $\mu = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\right)$ هي الكتلة المختزلة (المختصرة) لذرتي الجزيء



وفي ميكانيك الكم الطاقة مكممة وتعطى بالعلاقة التالية

$$E_{vi} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)h\nu_0, \nu = 1,2,3, \ldots \qquad (6\text{-}9)$$

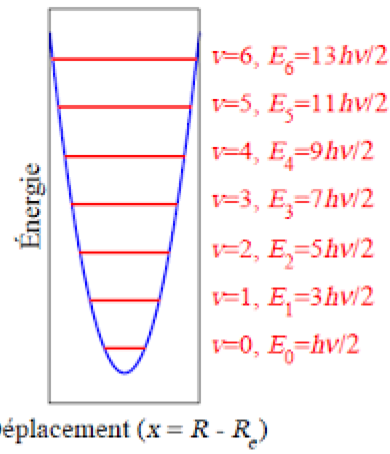
من المعادلتين (6-8) و(6-9) نحصل على علاقة الطاقة الاهتزازية للجزيء

$$E_{vi} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}}, \nu = 1,2,3, \dots \tag{6-10}$$

والانتقال بين الحلات المسموحة يتبع قاعدة الانتقاء $\Delta\nu = \pm 1$ أي الانتقال من E_ν الى $E_{\nu-1}$ او العكس

$$\Delta E = h\nu = E_\nu - E_{\nu-1} = \left[\left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} - \left(\nu - \frac{1}{2}\right)\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}}\right] = \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \tag{6-11}$$

ومنه مستويات الطاقة للحركة الاهتزازية حسب العلاقة (6-10) ممثلة في الشكل الموالي



وتوافق الطاقة الحركية الاهتزازية عند درجة حرارة الغرفة عند كل الجزيئات الحالة التي عددها الكمي الاهتزازي هو $\nu = 0$ لان الفرق بين كل حالتين من حالات الطاقة الاهتزازية هو كبير بالنسبة لـ kT حيث k هو ثابت بولتزمان و T هي درجة الحرارة بالكالفن ويوافق هذا الفرق اشعاع في المنطقة تحت الحمراء ويعطي الجدول التالي بعض التوترات الموافقة للانتقال من الحالة $\nu = 0$ الى الحالة $\nu = 1$ لبعض الجزيئات وثابت القوة الذي يبين مدى قوة الرابطة الجزيئية

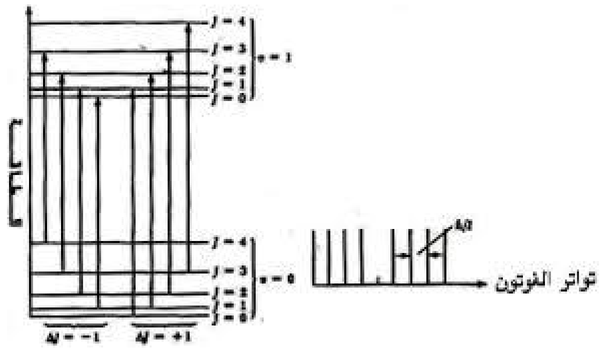
الجزيء	التواتر *(Hz)*	ثابت القوة *(n /m)*
HF	*8.72*$\times 10^{13}$	*970*
HCl	*8.66*$\times 10^{13}$	*480*
HBr	*7.68*$\times 10^{13}$	*410*
HI	*6.69*$\times 10^{13}$	*320*
CO	*6.42*$\times 10^{13}$	*1860*
NO	*5.63*$\times 10^{13}$	*1530*

6-3-اطياف الجزيئات

تبين ان الجزيء المحرض يمكنه ان يقوم بحركة دورانية وحركة اهتزازية في ان واحد وهاته الحركتان منفصلتان والطاقة الكلية للجزيء تساوي مجموع الطاقة الدورانية والطاقة الاهتزازية المعطاتان بالعلاقتين *(6-4)* و*(6-10)* ومنه

$$E = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)\left(\nu + \frac{1}{2}\right)h\nu_0, \nu = 1,2,3, \dots, J = 1,2,3, \dots \tag{6-12}$$

حيث لكل قيمة مسموحة للعدد الكمي ν يوجد مجموعة كاملة من حالات الطاقة الدورانية الموافقة لقيم J التالية $J = 1,2,3, \dots$ كما يبينه الشكل التالي



ومن الملاحظ ان فرق الطاقة بين أي مستويين اهتزازين متتاليين أكبر بكثير من فرق الطاقة بين أي مستويين دورانيين متتاليين والحالات المسموح بها للانتقال بين حالتين من حالات الطاقة تخضع لقاعدة الانتقاء التالية

$$\Delta J = \pm 1 \qquad , \Delta \nu = \pm 1 \tag{6-13}$$

وهما شرطان متلازمان، أي انه اذا حدث تغير لـ ν مقداره $\Delta \nu = \pm 1$ فلابد ان يحدث تغير لـ J مقداره $\Delta J = \pm 1$ من الممكن ان يكون $\Delta \nu = +1$ و $\Delta J = +1$ او $\Delta J = -1$ ، ولهذا نلاحظ ان طيف الجزيئات يتكون من مجموعتين من الخطوط فعندما يمتص الجزيء فوتون فان ν يزداد بواحد اما J فيزداد بواحد او ينقص بواحد

الاعمال الموجهة

سلسلة الاعمال الموجهة رقم 1

التمرين الأول:

كثافة الطاقة المشعة من طرف الجسم الأسود عند التوازن الحراري تعطى بعلاقة بلانك كما يلي

$$U(\upsilon,T)=\frac{8\pi h\upsilon^3}{c^3}\frac{1}{exp\left(\frac{h\upsilon}{kT}\right)-1}$$

1)- كيف يصبح هذا القانون في الميدان تحت الأحمر

2)- كيف يصبح هذا القانون من اجل الاهتزازات المرتفعة

3)- احسب الطاقة الكلية $U(T)$الصادرة من الجسم الأسود من اجل درجة الحرارة T

4)- اذا وضعنا $x=\frac{h\upsilon}{KT}$

A)- بين ان من اجل Tمعطاة كثافة الطاقة $U(\upsilon,T)$تكون اعظمية من اجل x=2.821

b)- كيف يتغيرU_{max} و υ_{max} بدلالة درجة الحرارة مثل هندسيا هذه النتائج

c)- نريد استنتاج قانون وأين المتعلق يتغير هذه القيمة الاعظمية

يعطى $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}dx=\frac{\pi^4}{15}$

التمرين الثاني:

عمل الخروج لبعض المعادن التي تشكل المهبط الضوئي لخلية كهروضوئية يعطى بـ

$W_s(eV)$	المهبط الضوئي
1.8	السيزيوم
2.2	البوتاسيوم
3.0	الالمنيوم
4.1	النحاس
5.0	النيكل

1)- عين طول الموجة العتبة الذي يسمح بملاحظة المفعول الكهروضوئي في كل حالة

$$c=3.10^8(\frac{m}{s}),\qquad h=6{,}62.10^{-34}joul.s,e=1{,}6.10^{-19}coulomb$$

2)- نضئ مهبط ضوئي بإشعاع ضوئي طول موجته $\lambda=3500\ A°$استنتج كمون التوقفV_0 الذي يظهر المفعول الكهروضوئي في كل حالة

التمرين الثالث:

بروتون (كتلته في حاله السكون هي$m_p = 1.673\ 10^{-27}kg$ شحنته $q = 1.602\ 10^{-19}c$) يسرع بواسطة كمون $10KV$

1)- كم هو طول موجة ديبروغلي الموافق لهذا البروتون؟

2)- بالمقارنة بالطاقة الحركية للبروتون، الطاقة الحركية للإلكترون يسرع تحت نفس الكمون هي اقل، مساوية او أكبر؟

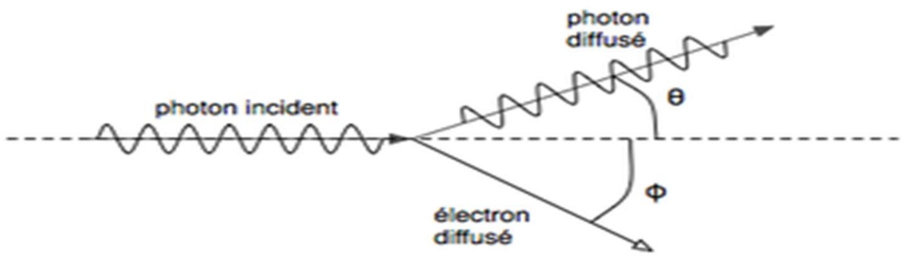
3)- بالمقارنة بطول الموجة الموافق للبروتون، طول الموجة الموافق للإلكترون يسرع تحت نفس الكمون هي اقل، مساوية او أكبر؟

4)- ما هو الكمون اللازم لتسريع الكترون له طول موجة مقداره $0.06\ nm$ ؟

5)- إذا استعملنا بروتونات فما هو الكمون المستعمل للحصول على نفس طول الموجة $0.06\ nm$ ؟

تمرين الرابع:

عندما يتصادم فوتون له تواتر ν مع الكترون في حاله سكون ينتج فوتون اخر له تواترν' اما الالكترون يخرج بزاوية φ مع كمية حركة $\vec{P}_e$ كما هو موضح في الرسم



Diffusion Compton: Collision d'un photon avec un électron au repos

1)- اذكر كيف يمكن كتابة كمية الحركة للفوتون بدلالة التواتر ν ؟

نضع m_0 كتلة الالكترون عند السكون

2)- باستعمال قوانين الميكانيكا الكلاسيكية (انحفاظ الطاقة وكمية الحركة) اكتب ثلاثة معادلات تربط كل من θ ، ν ، ν' ، φ (نعتبر سرعة الالكترون مهملة امام سرعة الضوء)

3)- برهن ان عند النهاية حيث الفارق في التواتر$\nu \gg \delta\nu$ ، المعادلات السابقة تسمح بالتعبير على التواتر الفوتون المنتشرν' بدلالة تواتر الفوتون القادم ν وزاوية الانتشار θ بالعلاقة التالية

$$\lambda - \lambda' \approx \nu^2 \frac{h}{m_0 c^2}(1 - cos\theta) \qquad \nu' - \nu \approx \nu^2 \frac{h}{m_0 c^2}(1 - cos\theta)$$

4)- نضيء عاز من الالكترونات بواسطة الاشعة X لها طول موجة $0.1\ nm$ ماهي السرعة القصوى التي يمكن ان يمتلكها الالكترون بمفعول كومبتن؟

سلسلة الاعمال الموجهة رقم 2

التمرين الثاني:

في نموذج بور ذرة الهيدروجين تتكون من الكترون يدور حول النواة التي تعتبر ساكنة بحركة دائرية منتظمة

1)- اعط عبارة الطاقة الكلية للإلكترون بدلالة نصف القطر r

2)- باعتبار مسلمات بور

ا- اعط عبارة نصف قطر المدار المسموح والطاقة المتعلقة به

ب- احسب بالنسبة لذرة الهيدروجين نصف قطر أصغر مدار وطاقة الحالة الأساسية

3)- احسب طول موجة الاشعاع اللازم لانتقال ذرة الهيدروجين من الحالة الأساسية الى الحالة المثارة الأولى

التمرين الثاني:

طيف الهيدروجين يتكون من عدة سلاسل ندرس فقط خمس سلاسل الأولى وهي سلسلة ليمان (Lyman)، بالمر(Balmer)،باشن (Paschent)، براكات(Braket) ،بافن(Pfund)

1)- باي ظاهرة تتعلق هذه السلاسل والخطوط في كل سلسلة

2)- ماهي العبارة العامة التي تعطي طول الموجة لكل

3)- الخطوط في كل سلسلة محصورة بين خطين حديين هما λ_{lim} بالنسبة للنهاية الصغرى و λ_1 بالنسبة للنهاية الكبرى بماذا تتعلق هاتين النهايتين

4)- استنتج عبارة عامة تسمح بحساب النهايتين، احسب λ_{lim} و λ_1 من اجل السلاسل الأربعة الأولى

التمرين الثالث:

في ذرة الهيدروجين الالكترون في حالته الأساسية له طاقة تساوي 13,6 ev -

1)- ماهي بالإلكترون فولط أصغر طاقة يمكن ان يمتصها الالكترون :

لينتقل الى الحالة المثارة الأولى

لينتقل الى من الحالة المثارة الأولى الى حالة التأين

2)- ماهي اطوال الموجة لخطوط طيف الاصدار المتعلق بالرجوع :

من حالة التأين الى الحالة المثارة الأولى

من الحالة المثارة الأولى الى الحالة الأساسية

3)- الالكترون مثار الى المستوى الرابع n=4 كم عدد الخطوط المختلفة للإصدار حتى يرجع الالكترون الى الحالة الأساسية ،رتب الانتقالات المتعلقة بهذه الخطوط حسب تناقص طول الموجة للفوتون الصادر

تمرين الرابع:

1- عرف الايون شبيه الهيدروجين

2- نذكر ان طاقة الايون شبيه الهيدروجين تعطى بالعلاقة $E_n = E_1 \frac{Z}{n^2}, E_1 = -13.6ev$

نقوم تجريبيا بصناعة ايون شبيه الهيدروجين انطلاقا من غاز الليثيوم Li

ا- ما هو الايون شبيه الهيدروجين المتحصل عليه

ب- احسب طاقة التأين لهذا الايون شبيه الهيدروجين

ج- ندرس سلسلة الخطوط المتعلقة بنزول الالكترون من المستوى m الى المستوى n=5 ، اعط عبارة طول الموجة λ_{m-5} لخطوط هذه السلسلة

3- حدد من اجل هذه السلسلة الخطوط λ_{max} و λ_{min} ، يحدد المستوى المرئي بـ $700nm > \lambda > 400\text{nm}$

4- اعط الانتقالات لهذه السلسلة المتعلقة بالخطوط في المستوى المرئي

حل سلسلة الاعمال الموجهة رقم 2

1) هذه السلاسل والخطوط تتعلق بظاهرة الإصدار (اصدار اشعاع ضوئي

2) العبارة العامة التي تعطي طول الموجة الموافق لكل خط هي علاقة Ritz

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

3) الخطوط في كل سلسلة محصورة بين خطين حديين يتعلقان بالانتقال من المستوى $(n+1)$ الى المستوى (n) و الانتقال من المستوى (∞) الى المستوى (n)

$$\lambda_{lim} = \lambda_{\infty\to n} \qquad , \qquad \lambda_1 = \lambda_{n+1\to n}$$

4) استنتاج عبارة عامة لـ λ_1 و λ_{lim}

لدينا من عبارة

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

$$\lambda_{n_f\to n_i} = \frac{({n_f}^2)({n_i}^2)}{R_H({n_i}^2 - {n_f}^2)}$$

ومنه

$$\lambda_1 = \lambda_{n+1\to n} = \frac{(n+1)^2(n)^2}{R_H((n+1)^2 - (n)^2)}$$

$$\lambda_1 = \frac{(n+1)^2(n)^2}{R_H(2n+1)}$$

اما

$$\frac{1}{\lambda_{lim}} = \frac{1}{\lambda_{\infty\to n}} = R_H\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\infty^2}\right)$$

$$\frac{1}{\lambda_{lim}} = R_H\left(\frac{1}{n^2} - 0\right)$$

$$\lambda_{lim} = \lambda_{\infty\to n} = \frac{n^2}{R_H}$$

حساب λ_1 و λ_{lim} من اجل السلاسل الأربعة الأولى

من اجل سلسلة ليمان $n = 1$

$$\lambda_1 = \frac{(1+1)^2(1)^2}{R_H\big((2\times 1)+1\big)} = \frac{4}{3}\frac{1}{R_H} = \frac{4}{3}\frac{1}{1{,}096\times 10^7} = \frac{4}{3}\times 911(A^\circ) = 1214{,}66(A^\circ)$$

$$\lambda_{lim} = \frac{1^2}{R_H} = 911(A^\circ)$$

من اجل سلسلة بالمر $n = 2$

$$\lambda_1 = \frac{(2+1)^2(2)^2}{R_H\big((2\times 2)+1\big)} = \frac{36}{5}\frac{1}{R_H} = \frac{36}{5}\times 911(A^\circ) = 6559{,}2(A^\circ)$$

$$\lambda_{lim} = \frac{2^2}{R_H} = 4\times 911 = 3644(A^\circ)$$

من اجل سلسلة باشن $n = 3$

$$\lambda_1 = \frac{(3+1)^2(3)^2}{R_H\big((2\times 3)+1\big)} = \frac{144}{7}\frac{1}{R_H} = \frac{144}{7}\times 911(A^\circ) = 18740{,}57(A^\circ)$$

$$\lambda_{lim} = \frac{3^2}{R_H} = 9\times 911 = 8199(A^\circ)$$

من اجل سلسلة براكات $n = 4$

$$\lambda_1 = \frac{(4+1)^2(4)^2}{R_H\big((2\times 4)+1\big)} = \frac{400}{9}\frac{1}{R_H} = \frac{400}{9}\times 911(A^\circ) = 40488{,}88(A^\circ)$$

$$\lambda_{lim} = \frac{4^2}{R_H} = 16\times 911 = 14576(A^\circ)$$

حل التمرين الثالث

1) أصغر طاقة يمتصها الالكترون لينتقل الى الحالة المثارة الأولى هي:

$$\Delta E_{1\to 2} = |E_2 - E_1| = |E_1|\left|\frac{1}{2^2} - 1\right| = 13.6\times\frac{3}{4} = 10.2(ev)$$

أصغر طاقة يمتصها الالكترون لينتقل من الحالة المثارة الأولى الى حالة التأين هي:

$$\Delta E_{2\to\infty} = |E_\infty - E_2| = |E_2| = |E_1|\frac{1}{2^2} = 13.6\times\frac{1}{4} = 3{,}4(ev)$$

2) حساب اطوال الموجة لخطوط طيف الإصدار المتعلقة بـ

الرجوع من حالة التأين الى الحالة المثارة الأولى

$$h\nu = \Delta E_{\infty\to2} \Rightarrow h\frac{c}{\lambda_{\infty\to2}} = \Delta E_{\infty\to2}$$

$$\lambda_{\infty\to2} = \frac{hc}{\Delta E_{\infty\to2}} = \frac{(6{,}62\times10^{-34})\times(3\times10^{8})}{3{,}4\times1{,}6\times10^{-19}} = 3{,}65\times10^{-7} = 3650(A^{\circ})$$

الرجوع من الحالة المثارة الأولى الى الحالة الأساسية

$$\lambda_{1\to2} = \frac{hc}{\Delta E_{1\to2}} = \frac{(6{,}62\times10^{-34})\times(3\times10^{8})}{10{,}2\times1{,}6\times10^{-19}} = 1{,}216\times10^{-7} = 1216(A^{\circ})$$

3) الالكترون مثار الى المستوى $n=4$ عدد الخطوط المختلفة للإصدار حتى يعود الى الحالة الأساسية هو 6 خطوط متعلقة بالانتقالات التالية

من $n=4$ الى $n=3$

من $n=4$ الى $n=2$

من $n=4$ الى $n=1$

من $n=3$ الى $n=2$

من $n=3$ الى $n=2$

من $n=2$ الى $n=1$

ترتيب هذه الخطوط حسب تناقص طول الموجة

$$\lambda_{n\to m} = \frac{hc}{\Delta E_{n\to m}}$$

نلاحظ ان طول الموجة يتناسب عكسا مع فرق الطاقة $\Delta E_{n\to m}$ ومنه

$$\Delta E_{4\to3} = |E_3 - E_4| = 1{,}5 - 0{,}85 = 0{,}65\ (ev)$$

$$\Delta E_{4\to2} = |E_2 - E_4| = 3{,}4 - 0{,}85 = 2{,}55\ (ev)$$

$$\Delta E_{4\to1} = |E_1 - E_4| = 13{,}6 - 0{,}85 = 13{,}75\ (ev)$$

$$\Delta E_{3\to2} = |E_2 - E_3| = 3{,}4 - 1{,}5 = 1{,}9\ (ev)$$

$$\Delta E_{3\to1} = |E_1 - E_3| = 13{,}6 - 1{,}5 = 12{,}1\ (ev)$$

$$\Delta E_{2\to1} = |E_1 - E_2| = 13{,}6 - 3{,}4 = 10{,}2\ (ev)$$

ومنه الترتيب هو

$$\lambda_{4\to3} > \lambda_{2\to3} > \lambda_{4\to2} > \lambda_{2\to1} > \lambda_{3\to1} > \lambda_{4\to1}$$

<u>حل التمرين الرابع</u>

1) ايون شبيه الهيدروجين هو شاردة موجبة تحتوي على الكترون واحد وعلى z بروتون $z > 1$
2) الايون سبيه الهيدروجين المتحصل عليه من الليثيوم هو $^{+2}L_i \equiv {}^{3-2}L_i$

3) طاقة التأين لهذا شبيه الهيدروجين هي:

$$\Delta E_{1\to\infty} = |E_\infty - E_1| = |0 - E_1| = |(E_1)_H|\frac{z^2}{1^2} = 13.6 \times 9 = 122{,}4(ev)$$

إعطاء عبارة طول الموجة $\lambda_{m\to 5}$

$$\lambda_{m\to 5} = \frac{hc}{\Delta E_{m\to 5}} = \frac{hc}{|E_m - E_5|} = \frac{hc}{|(E_1)_H|\left|\frac{3^2}{m^2} - \frac{3^2}{5^2}\right|} = \frac{25m^2hc}{9(m^2-25)|(E_1)_H|}$$

4) تحديد من اجل هذه السلسة الخطوط λ_{min} و λ_{max}

$$\lambda_{min} = \lambda_{\infty\to 5} = \frac{hc}{\Delta E_{\infty\to 5}} = \frac{hc}{|0 - E_5|} = \frac{hc}{|(E_1)_H|\left|0 - \frac{3^2}{5^2}\right|} = \frac{25hc}{9|(E_1)_H|} = \frac{25 \times 6{,}62 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{9 \times 13{,}6 \times 1{,}6 \times 10^{-19}}$$

$$\lambda_{min} =$$

$$\lambda_{max} = \lambda_{6\to 5} = \frac{hc}{\Delta E_{6\to 5}} = \frac{hc}{|E_6 - E_5|} = \frac{hc}{|(E_1)_H|\left|\frac{3^2}{6^2} - \frac{3^2}{5^2}\right|} = \frac{25 \times 36 \times hc}{9(36-25)|(E_1)_H|}$$

$$\lambda_{max} = \frac{25 \times 36 \times 6{,}62 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{9(36-25) \times 13{,}6 \times 1{,}6 \times 10^{-19}} =$$

5) الانتقالات التي تتعلق بالمستوى المرئي هي محددة بالمتراجحة التالية

$$7 \times 10^{-7} > \lambda_{m\to 5} > 400 \times 10^{-7}$$

الطرف الأول

$$\lambda_{m\to 5} > 400 \times 10^{-7} \Rightarrow \frac{25m^2hc}{9(m^2-25)|(E_1)_H|} > 400 \times 10^{-7}$$

$$\Rightarrow m^2 < \frac{9|(E_1)_H|10^{-5}}{(36 \times 10^{-7}) - 25hc} \Rightarrow m^2 < 68{,}461 \Rightarrow m < 8{,}27$$

الطرف الثاني

$$\lambda_{m\to 5} < 700 \times 10^{-7} \Rightarrow \frac{25m^2hc}{9(m^2-25)|(E_1)_H|} < 700 \times 10^{-7}$$

$$\Rightarrow m^2 > \frac{1575 \times 10^{-7}|(E_1)_H|}{(63 \times 10^{-7}) - 25hc} \Rightarrow m^2 > 39{,}25 \Rightarrow m > 6{,}26$$

سلسلة الاعمال الموجهة رقم 3

<u>التمرين الاول:</u>

طبق مبدا هايزنبورغ على النظامين التاليين

1)- الكترون يتحرك حركة مستقيمة منتظمة ($\Delta x = 1A°$)احسب Δv

2)- كرية كتلتها تتحرك في خط مستقيم ($\Delta x = 1\mu m$)احسب Δv

التمرين الثاني:

1)- نستعمل العلاقة بين الأرقام الكمية الثلاثة (n,l,m) حدد عدد المداريات (orbitals) في مستويات الطاقة الأولى للهيدروجين

3)- بين العدد الأعظمي للإلكترونات التي يمكن ان تحتويه الطبقة رقم nهو $2n^2$

4)- اعط التمثيل الاعتيادي للمداريات التالية $\psi_{3,0,0}, \psi_{3,1,-1}, \psi_{3,2,0},$

التمرين الثالث:

المدارية $1s$ لذرة الهيدروجين معرفة بالعبارة التالية $\psi = N_{1s} e^{\frac{-r}{a_0}}$

1)- عبر عن احتمال وجود الالكترون داخل حجم محصور بين الكرة التي قطرها r وكرة أخرى قطرها r+dr

2)- عرف كثافة احتمال الوجود القطرية

3)- ما هو نصف قطر الكرة حيث كثافة احتمال الوجود اعظمية

4)- احسب احتمال وجود الالكترون داخل كرة نصف قطرها وكذلك خارج هذه الكرة

يعطى $\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{2^{n+1}} / n \geq 0, \alpha \geq 0$

تمرين الرابع:

1- اذكر القواعد والمبادئ التي تسمح بإيجاد البنية الالكترونية للذرة
2- اذكر خصائص نوع المدار الذري من اجل كل مجموعة من الأرقام الكمية واعط تمثيل فضائي للمدارين s و p
3- علل الترتيب الطاقوي المعكوس للمدارين 3d و 4s

سلسلة الاعمال الموجهة رقم 4

تمرين الاول:

نعتبر ذرة الهيدروجين تتكون من الكترون كتلته m_e يدور حول نواة شحنتها 1+ نعتبرها ثابتة

1)- اكتب معادلة شرودينغر لإلكترون ذرة الهيدروجين في الاحداثيات الكروية مع اظهار المؤثر

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tg\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

2)- تحقق من ان دالة الموجة$\psi_{1,0,0}(r,\theta,\varphi)$ هي حل لهذه المعادلة، وماهي الطاقة المتعلقة بها

$$\psi_{1,0,0}(r,\theta,\varphi) = R_{1,0}(r) Y_0^0(\theta,\varphi)$$

حيث من اجل كل عدد طبيعي

$$L^2\ Y_m^l(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\ Y_m^l(\theta,\varphi) \qquad m = -l, -l+1, \dots, l+1, l$$

3)- ارسم مستويات الطاقة الأربعة الأولى لهذه الذرة مع ذكر درجة الانحلال (لا نأخذ بعين الاعتبار الانحلال الناتج عن السبين)

4)- بين ان المدريات n_s اي $\psi_{1,0,0}(r,\theta,\varphi)$ لها تناظر كروي

يعطى $\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tg\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

$$R_{1,0}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

التمرين الثاني:

1)- اكتب معادلة شرودينغر لإلكترون كتلته m_e وشحنته $(-e)$ داخل حقل كهربائي لبروتون شحنته (e) وكتلته m_p مع كتابة داله الموجة والأرقام الكمية

2)- ماهي طاقة الحالة المميزة بالأرقام الكمية l,n

3)- ماهي درجة الانحلال المستوى n (لاناخذ السبين بعين الاعتبار)

4)- احسب المسافة المتوسطة $<r>_{1s}$ والطاقة الكامنة والحركية المتوسطتين $<T>_{1s} <V>_{1s}$,

5)- الامن نهتم بالحلات ذات الأرقام الكمية $l = n-1, n$

احسب القيم المتوسطة $<r>$ و $<r^2>$ ثم البعد الرباعي $\Delta r = \sqrt{<r^2> - <r>^2}$ ، بين ان النسبة $\frac{\Delta r}{r}$ تؤول الى 0لما n يؤول الى ∞

استنتج انه توجد علاقة بين الحالات ذات الأرقام الكمية $(n, l = n-1)$ ومدارات بور الدائرية

نذكر ان عبارة الجزء القطري لدالة الحالة هو

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{\sqrt{2n!}}\left(\frac{2}{n}\right)^{\frac{2n+1}{2}} r^{n-1}e^{(-\frac{r}{n})}$$

يعطى: $\int_0^\infty x^n \quad e^{(-kx)} = \frac{n!}{k^{n+1}}$

سلسلة الاعمال الموجهة رقم 5

التمرين الأول

إذا علمت ان الانتقال الدوراني بين المستويين $J = 1$ و $J = 2$ في جزيء CO يحدث عند التواتر $\nu = 1.15 \times 10^{11} Hz$ احسب

1- عزم العطالة الذاتي للجزيء
2- احسب طول الرابطة بيم ذرتي الكاربون والاكسجين في جزيء CO

التمرين الثاني

إذا كان التواتر الأساسي لجزيء CO هو $6.42 \times 10^{13} Hz$ فاحسب

1- ثابت القوة لهذا الجزيء
2- احسب سعة الاهتزاز لهذا الجزيء عند مستوى الطاقة $\nu = 0$ ثم عند المستوى $\nu = 1$