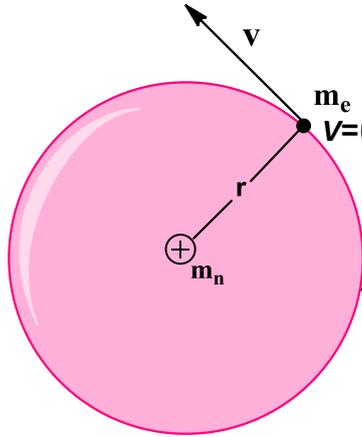


Bohr Theory of the Hydrogen atom □

نظرية بور حول ذرة الهيدروجين □

□ صور العالم نيلز بور الألكترون في ذرة الهيدروجين على انه يسلك مسار دائري حول البروتون



$v =$ (linear velocity of the electron) السرعة الخطية للألكترون

$m_e =$ mass of electron كتلة الألكترون

$r =$ the radius of the circular orbit نصف قطر المدار الدائري

$m_n =$ mass of nucleus كتلة النواة

□ ولكي يسير الألكترون بانتظام في هذا المسار الدائري يجب أن يتحقق هذين الشرطين:

القوة الطاردة المركزية المتولدة من حركة الألكترون **centrifugal force** يجب ان تساوي مجموع

قوى التجاذب بين النواة والألكترون **forces of attraction**

Centrifugal force $(f_c) = \frac{m_e v^2}{r}$
12

ولكي يبقى الألكترون في مداره ، هناك قوتي جذب هما جذب الألكترون من قبل البروتون **electric force** وقوة الثقل الكتلتي **gravitational force** ولأن قوة الجذب بين البروتون والألكترون أكبر بكثير لذى ممكن إهمال قوى الجذب الأخرى

Electric force of attraction $(f_{elec.}) = \frac{ze^2}{r^2} \quad (Z_H = 1) \quad \dots$
 13

وبما إن المعادلتين 11 و 12 هما شرط المدار المستقر فإن:

$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad \dots$
 14

طاقة الألكترون moving in one of Bohr orbits □
 المتحرك في أحد مدارات بور

إن الطاقة الكلية هي مجموع الطاقة الحركية (kinetic energy T) والطاقة الكامنة (potential energy V)

$E = T + V$ عندما T تعبر عن الطاقة الحركية 15

$$T = \frac{1}{2} m_e v^2 \quad \text{تعبّر عن الطاقة الكامنة} \quad \dots\dots\dots 16$$

$$V = \int_{\infty}^r \frac{e^2}{r^2} dr = -\frac{e^2}{r} \quad \dots\dots\dots 17$$

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{r} \quad \dots\dots\dots 18$$

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad \text{or} \quad m_e v^2 = \frac{e^2}{r} \quad \dots\dots\dots 19$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{r} \quad \dots\dots\dots 20$$

Note : negative charge refer to the fact that for excess energy the electron may transfer from orbit with less r value to another with more r value .

فرضية بور: Bohr made a novel assumption that

إن أهم ما عمله بور في هذه الحسابات هو افتراضه بأن الزخم الزاوي angular momentum والمساوي الى $m_e v r$ للمسار الدائري للألكترون يمكنه أن يستمر فقط إذا أخذ قيم ثابتة وصحيحة للمدار $(\frac{h}{2\pi})$ واحياداً تكتب \hbar حيث :

(ثابت بلانك $h = 6.625 \times 10^{-34}$ JS.) 6.625×10^{-27} erg.sec. \square والتعبير الرياضي لفرضية بور هو:

$$m_e v r = n \left(\frac{h}{2\pi} \right) \quad \dots\dots\dots 21$$

حيث يجب أن تكون جميع القيم لـ (n) صحيحة الى المالا نهاية (all integers $n = 1, 2, 3, \dots$ to ∞) وباستخراج قيمة السرعة من المعادلة 21 نحصل على:

$$v = n \left(\frac{h}{2\pi} \right) \frac{1}{m_e r} \quad \dots\dots\dots 22$$

وبتعويض قيم السرعة من معادلة 22 في شرط المدار المستقر (معادلة 19) نحصل:

$$\frac{m_e n^2 h^2}{4\pi^2 m_e^2 r^2} = \frac{e^2}{r} \quad \dots\dots\dots 23$$

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e e^2} \quad \dots\dots\dots 24$$

من المعادلة رقم 24 يمكن حساب نصف القطر بدلالة المدار n. وما تقدم يمكن حساب الطاقة (energy) المتوافقة مع الكترون يسير مدار مسموح به وذلك بتعويض قيمة نصف القطر (r) من المعادلة 24 في المعادلة 20

$$E = - \frac{2\pi^2 m_e e^4}{n^2 h^2} \dots\dots\dots 25$$

- مثال (١-١٠) / أ- احسب نصف قطر مدار بور الأول.
 ب- احسب سرعة الكترون في مدار بور الأول لذرة الهيدروجين.
 ج- احسب طاقة الكترون في مدار بور الأول لذرة الهيدروجين
 الحل: أ- نصف القطر

A-The radius

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e e^2} \quad n=1$$

بالتعويض عن المدار ب

$$r = \frac{(1)^2 (6.625 \times 10^{-27} \text{ erg.sec.})^2}{4((3.1416)^2 (9.1072 \times 10^{-28} \text{ g})^2 (4.8022 \times 10^{-10} \text{ abs esu})^2)}$$

$$r = a_0 = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm} = 0.529 \text{ \AA}$$

- ب- السرعة

B-The velocity

$$v = n \left(\frac{h}{2\pi} \right) \frac{1}{m_e r} \text{ substituting } n=1 \text{ and } r = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$v = (1) \left(\frac{6.625 \times 10^{-27} \text{ erg.sec.}}{2(3.1416)} \right) \left(\frac{1}{(9.1072 \times 10^{-28} \text{ g})(0.529 \times 10^{-8} \text{ cm})} \right)$$

$$v = 2.188 \times 10^8 \text{ cm sec}^{-1}$$

C-The energy

ج- الطاقة

$$E = - \frac{2\pi^2 m_e e^4}{n^2 h^2}$$

$$= - \left(\frac{(3.1416)^2 (9.1072 \times 10^{-28} \text{ g})(4.8022 \times 10^{-10} \text{ abs esu})^4}{1^2 \times 6.625 \times 10^{-27} \text{ erg.sec}^2} \right)$$

$$E = 2.17 \times 10^{-11} \text{ erg}$$

جهد التأين لذرة الهيدروجين Ionization Potential for the hydrogen atom

□ الهيدروجين

ببساطة ، إن الطاقة اللازمة لإزالة الكترون من غلاف التكافؤ لذرة في حالتها المستقرة هو جهد التأين الأول ، في الهيدروجين تؤدي عملية إزالة الألكترون من غلافه الى تكوين ايون موجب (H^+) وحسب المعادلة:



$$\Delta E_H = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \left[\frac{1}{n_I^2} - \frac{1}{n_{II}^2} \right] \quad \text{where } n_I=1 ; n_{II}=\infty$$

.....26

$$\Delta E_H = I. E = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2}$$

$$\text{But } a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m_e e^2}$$

$$\frac{1}{a_0} = \frac{4\pi^2 m_e e^2}{h^2} \quad \text{ويضرب المعادلة } (1/2) \times$$

$$\frac{1}{2a_0} = \frac{2\pi^2 m_e e^2}{h^2}$$

$$\text{Thus } \Delta E_H = \frac{e^2}{2a_0} \quad \text{where } \Delta E_H = \text{Ionization potential}$$

$$\Delta E_H = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{(4.8022 \times 10^{-10} \text{ abs esu})^2}{2 \times 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}} = 2.179 \times 10^{-11} \text{ erg}$$

$$I. E_H = 2.179 \times 10^{-11} \text{ erg} \times 6.241 \times 10^{11} \text{ ev} = 13.605 \text{ ev}$$



□ نظرية بور للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين

Bohr theory for atoms similar to hydrogen atom

وللذرات مثل الهيليوم أحادي الشحنة He^{+1} والليثيوم ثنائي الشحنة Li^{+2} والتي تمتلك الكترون واحد في غلافها الأول وهي بذلك تشابه ذرة الهيدروجين. يمكن ان تكون قوة التجاذب بين شحنة النواة خاضعة للمعادلة التالية:

$$\frac{m_e v^2}{r} = Z \cdot \frac{e^2}{r^2} \quad \text{Thus} \quad r = \frac{m_e v^2}{e^2} \cdot \frac{1}{Z}$$

$$\text{but } v = \frac{n h}{2\pi m_e r} \quad v^2 = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e^2 r^2}$$

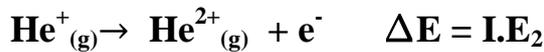
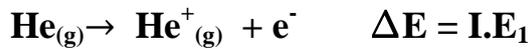
$$\text{Thus } r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e e^2} \cdot \frac{1}{Z}$$

$$E = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \times Z^2$$

$$\Delta E = Z^2 \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \left[\frac{1}{n_I^2} - \frac{1}{n_{II}^2} \right]$$

$$\Delta E = Z^2 \Delta E_H$$

مثال (١-١١) / احسب جهد التأين الثاني للهيليوم 2^{nd} I.E. For He (Z=2)



$$\text{I.E}_2 = Z^2 \Delta E_H = (2)^2 \times 13.6 \text{ eV} \quad \Longrightarrow \quad \text{I.E}_2 = 54.4 \text{ eV}$$

□ طيف ذرة الهيدروجين The Spectrum of Hydrogen Atom

ان الطاقة لألكترون منتقل خلال مستويات ذرة الهيدروجين هي بالتاكيد مساوية لفرق الطاقة بين المستويين اللذين حصل بينهما الانتقال.

$$E_H = E_{II} - E_I$$

$$E_H = - \frac{2\pi^2 m_e e^4}{n_{II}^2 h^2} - \left(- \frac{2\pi^2 m_e e^4}{n_I^2 h^2} \right)$$

$$E_H = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \left[\frac{1}{n_I^2} - \frac{1}{n_{II}^2} \right]$$

وبتعويض قيمة طاقة الهيدروجين بتردد الضوء من المعادلة الأخيرة نحصل:

$$\nu_H = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^3} \left[\frac{1}{n_I^2} - \frac{1}{n_{II}^2} \right] \dots\dots\dots 27$$

من المعادلة رقم 27 وعندما ($n_I = 1 ; n_{II} = \infty$) يمكن جمع الثوابت ولنرمز لها $R = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^3}$ ويتعوض قيمة الكتلة بوحدة الغرام وثابت بلانك بوحدة الإرك نحصل على ثابت رايدبرج (R) بدلالة التردد كما يلي:

$$R_H = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^3} = \frac{2(3.1416^2 \times 9.1085 \times 10^{-28} \times 4.8029 \times 10^{-10})^4}{(6.6252 \times 10^{-27})^3}$$

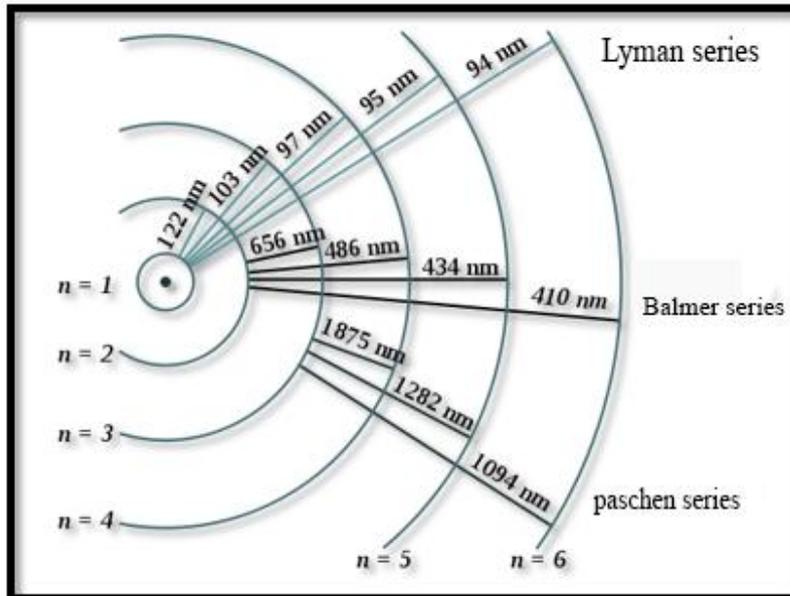
$$R = 3.2889 \times 10^{15} \text{ Cycle / sec}$$

في الحسابات المعتادة يستخدم ثابت رايدبرج بدلالة العدد الموجي **(ν) wave number**

بدلاً من التردد ولما كانت العلاقة بين اعداد الموجي والتردد هي: $\nu_H = c \cdot \nu_H$ فان ثابت رايدبرج يمكن حسابه كما يلي:

$$R_H = \frac{3.2898 \times 10^{15} \text{ cycles/sec}}{2.9979 \times 10^{10} \text{ cm/sec}} = 109,737 \text{ cm}^{-1}$$

(experimental value R_H is $109,677.518 \text{ cm}^{-1}$)



شكل (١-١٣) الخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين

مثال (١٢-١) / احسب العدد الموجي ($\bar{\nu}_H$) عند الإنتقال من ($n=1$) الى (2, 3, 4)
الحل:

$$\bar{\nu}_H = 109678 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = 82259 \text{ cm}^{-1}$$

$$\bar{\nu}_H = 109678 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 97492 \text{ cm}^{-1}$$

$$\bar{\nu}_H = 109678 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 102823 \text{ cm}^{-1}$$

مثال (١٣-١) / ماهو الطول الموجي لضوء منبعث عندتغير الطاقة من $n = 4$ الى $n = 2$ ؟

الحل: ان فرق الطاقة هنا لايعني بالضرورة انتقال الألكترون ولكن فقط كمية الطاقة بين غلافين والأسهل في الحساب اعتبار الغلاف الثاني

$$n_2 = 4 \text{ والغلاف الرابع } n_1 = 2$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

$$\frac{1}{\lambda} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right] \square \longrightarrow \frac{1}{\lambda} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$\left[\frac{1}{4} - \frac{1}{16} \right] \square \square$$

$$\frac{1}{\lambda} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} [0.250 - 0.0625] \longrightarrow \frac{1}{\lambda} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$[0.1875]$$

$$\frac{1}{\lambda} = 2.057 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \square \longrightarrow \lambda = 4.862 \times 10^{-7} \text{ m} \square$$

The dual nature of the electron الطبيعة المزدوجة للإلكترون

السؤال المطروح هنا لماذا يدور الألكترون حول النواة بمدارات ذات أبعاد ثابتة ؟ لا يوجد توضيح لهذه

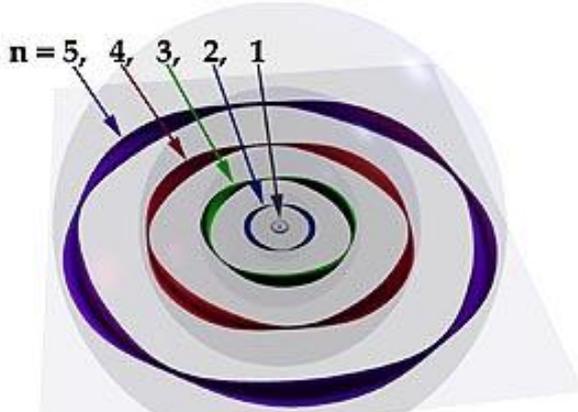
الحقيقة حتى من العالم بور نفسه. في عام 1924 العالم لويس دي بروني Louis de Broglie

وضع تفسيراً لتلك الظاهرة وذلك بايضاح ان الموجة الضوئية تسلك كسيل من الدقائق (الفوتونات) ،

إذن هذه الألكترونات تسلك سلوك الموجة في حركتها أو مايسمى بالموجة الواقفة.

إن الموجة وفق هذا التفسير تنتقل على طول خيط string بعض النقاط على طول هذا الخيط تسلك

كعقد **nodes** أي لاتمتلك تواجد الكتروني أي ان سعة الموجة في هذا المكان صفر .



Niels Bohr - Louis de Broglie atom, 1924

For a hydrogen atom:

Electron wave resonance

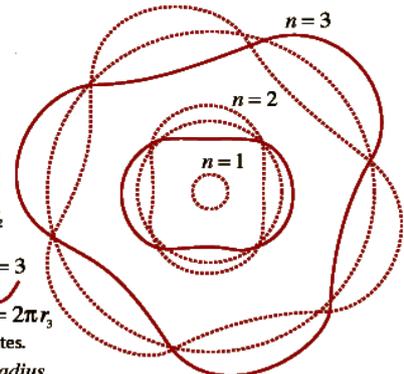
$$n = 1 \quad \lambda_1 = 2\pi r_1 = 6.28a_0$$

$$n = 2 \quad 2\lambda_2 = 2\pi r_2 \quad \lambda_2 = 12.57a_0$$

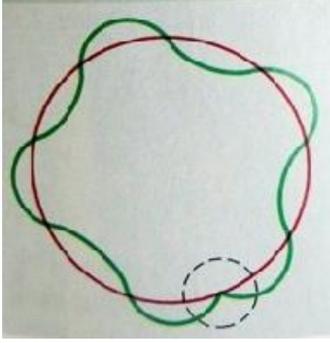
$$n = 3 \quad 3\lambda_3 = 2\pi r_3 \quad \lambda_3 = 18.85a_0$$

Wavelengths for hydrogen states.

$$a_0 = 0.0529 \text{ nm} = \text{Bohr radius}$$



Allowed orbit



Allowed orbit

إذا لم يكن مسار الإلكترون بشكل موجة متكاملة فإنه وبمرور الوقت يحدث تداخل بالموجات وهذا التداخل هدام لذا تتلاشى. إذن الإلكترون يجب أن يسير بموجة منتظمة أو ما يطلق عليها بالموجة الواقفة .

Not allowed orbit

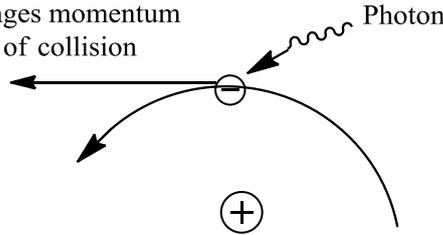
شكل (١-١٤) الموجة الواقفة

مبدأ اللادقة The uncertainty principle

اقترح دي برولي De Broglie بأن للإلكترون صفات موجية مثل الطول الموجي والتردد وتداخلات الطور.

بينما أوضح ثومسون إن للإلكترون صفات الدقائق مثل الكتلة والطاقة والعزم.

بور بدوره وضع مبدأ أن كلا الصفتين يكمل احدهما الآخر *principle of complementarity*. وفي هذا المبدأ لا يمكن تواجد كلا الصفتين الموجية والدقائقية في آن واحد. *electron changes momentum at the instant of collision* Photon



إن بالإمكان تحديد موقع الإلكترون في لحظة معينة بواسطة مجهر فائق الدقة ذو ضوء ذات أطوال موجية قصيرة جداً أي طاقات عالية جداً (أشعة أكس أو أشعة كاما) لذا فالفوتونات ذات الأطوال الموجية القصيرة تمتلك طاقة عالية جداً. إذا اصطدم أحد هذه الفوتونات بالإلكترونات ستحدث استطارة لأشعة كاما وكنتيجة لذلك سيكتسب هذا الإلكترون جزءاً من طاقة الفوتون فتتغير سرعة الإلكترون وبذلك يحدث تغير بالزخم .

وقد عرف هايزنبرغ **Werner Heisenberg** هذا المبدأ بمبدأ اللادقة *uncertainty principle* وكما يلي:

" It is impossible to specify at any given moment both the position and the momentum of an electron "

إن الحد الأدنى للادقة هو ثابت بلانك مقسوماً على 4π

$$(\Delta p_x)(\Delta x) \geq \frac{h}{4\pi}$$

Δp_x = uncertainty in momentum

Δx = uncertainty in position

$$[(\Delta p_x)(\Delta x) \geq \frac{h}{2}]$$

مقدار اللادقة في الزخم

مقدار اللادقة في الموقع

عند تطبيق مبدأ اللادقة لهايزنبرغ على ذرة الهيدروجين نجد ان حركة الألكترون الدائرية حول النواة بمدارات دائرية محددة كما اعتقد بور حقيقة واذا لم يكن كذلك فبالامكان تحديد موقعه (من تحديد نصف القطر) وزخمه (من خلال طاقة الالكترون الحركية) في آن واحد.

مثال (١-١٤) / جد مقدار اللادقة في موقع كرة مضرب كتلتها 220 g تتحرك بسرعة 3×10^3 cm/sec ؟ افترض ان اللادقة في الزخم واحد الى ترليوم . $(1/10^{12})$.
الحل /

$$\rho = mc = 220 \times 3 \times 10^3$$

$$= 6.6 \times 10^5 \text{ g cm sec}^{-1}$$

$$\Delta \rho = 6.6 \times 10^5 \times (1/10^{12}) = 6.6 \times 10^{-7}$$

And the uncertainty in its position

$$6.6 \times 10^{-7} (\Delta x) \geq \frac{6.63 \times 10^{-27}}{4\pi}$$

$$\Delta x = 10^{-21} \text{ cm.}$$

ماذا عن الكترون بكتلة 10^{-27} g ويسير بنفس السرعة التي كانت تسير به كرة المضرب؟

$$\rho = mc = 10^{-27} \times 3 \times 10^3 = 3 \times 10^{-24} \text{ g cm sec}^{-1}$$

$$\Delta \rho = 3 \times 10^{-24} \times (1/10^{12}) = 3 \times 10^{-36}$$

$$(\Delta x) = \frac{6.63 \times 10^{-27}}{4\pi \times 3 \times 10^{-36}} = 10^9 \text{ cm (very high uncertainty)}$$

مثال (١-١٥) / كرة مضرب كتلتها 0.142kg تتحرك بسرعة $100.0 \pm 1\%$ mile/h ($44.7 \pm$ سرعة 1% m/s) ؟ كيف هي دقة جهاز umpire (مقدر الموقع) في معرفة الموقع لتلك الكرة .
الحل /

$$\rho = mc$$

$$\rho = 44.7 \text{ m/s} \times 10^2 \text{ cm/m} \times 0.142 \text{ kg} \times 1000 \text{ g/kg} = 634740 \text{ gcm/sec}$$

$$\Delta \rho = 634740 \times 0.01 = 6347.4$$

And the uncertainty in its position

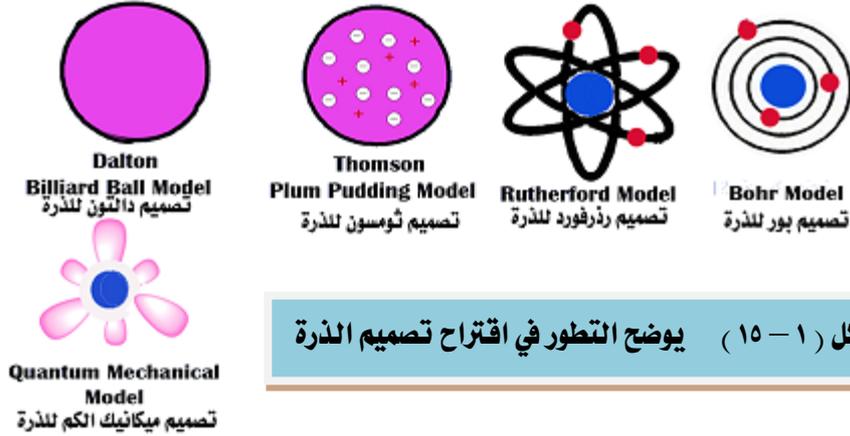
$$(\Delta x) \geq \frac{6.63 \times 10^{-27}}{4\pi \Delta \rho} = \frac{6.63 \times 10^{-27}}{4 \times 3.14 \times 6347.4}$$

$$\Delta x = 8.3 \times 10^{-32} \text{ cm.}$$

الحاجة الى تطوير نظرية بور The need to modify the Bohr theory

عرفنا سابقاً ان لكل ذرة خطوط طيف إنبعاث خاصة بها وتكاد ان تكون بمثابة بصمة تميز العنصر عن الآخر. لكن تم ملاحظة ان هذا الطيف يصبح معقد جداً عند وضع تلك الذرة في مجال مغناطيسي magnetic field. هذه الظاهرة phenomenon اطلق عليها تأثير زيمان **Zeeman effect** وهي غير متطابقة مع نظرية بور. ولكن العالم الفيزيائي الألماني سومرفيلد **Sommerfeld** استطاع ان ينقذ النظرية بإقتراح المدار الأهليجي elliptical بالإضافة الى المدار الدائري الذي يتحرك به الألكترون. دمج نظرية بور وسومرفيلد بما يسمى بـ **Bohr-Sommerfeld theory** أدى الى وضع تفسير مقنع لظاهرة زيمان. من الجدير بالذكر ان العلماء قبل زيمان ان طيف الإنبعاث في لذرة الهيدروجين تظهر فيه خطوط إضافية ، وان زيمان أكد ان الطيف يصبح معقد جداً عندما توضع الذرة في مواجهة مسار مجال مغناطيسي واقترح المدار الأهليجي للألكترون بالإضافة الى الدائري وبهذا تكون الزوايا سوف تتغير ويغير معها نصف قطر الأوربتال .

الفيزيائي سومرفيلد اقترح عدد كمي جديد اسماه الزيمائي **Zimathal** ورمز له بـ **(K)** وقال ان لكل عدد كمي رئيسي **(n)** هناك عدد من الأعداد الكمية الثانوية **(K)** مثل **(K₁, K₂, K₃, ..., n)**. وهنا يجب ملاحظة ان العدد الكمي الثانوي لا يمكن ان يأخذ القيمة صفر لأن القيمة صفر تعني ان الألكترون في مدار خطي ويمر بالنواة. وكذا عندما **K = n** فالمدار دائري وعندما **n = 3** فإن **(K = 1, K = 2, K = 3)** ولأن الأوربتال الثانوي **(K_n)** يكون قريب احدهما من الآخر فإن طاقة هذه الأوربتالات تكون متقاربة ولذا فإن خطوط طيف الأنبعاث تكون قريبة من بعضها البعض.



◆ الأكثر أهمية في هذا الموضوع هو عدم قدرة حتى نظرية بور- سومرفيلد لتوضيح واعطاء تفاصيل الخطوط للذرات متعددة الألكترونات.

◆ نظرية بور- سومرفيلد غير قادرة على إعطاء إيضاحات عن شدة الخطوط.

◆ بور أوضح بأن الزخم الزاوي مساوي الى $(n \frac{h}{2\pi})$ بين وجد في الحقيقة ان الزخم الزاوي $\frac{h}{2\pi}$

ووفقاً لنظرية بور عندما $n=1$ يكون الزخم الزاوي $(1 \times \frac{h}{2\pi})$.

ووفقاً للنظرية الحديثة عندما $n=1$ يكون الزخم الزاوي $\sqrt{l(l+1)}$ عندما $(l=0)$ وعندما $(n=2)$ فإن $(l=0, 1)$

إن الزخم الزاوي هي كمية ذات اتجاه وطول هذا المتجه يساوي $(K \frac{h}{2\pi})$ أي أن هناك اتجاهات محددة لأوربتال معين .

فعندما $K = 1$ يكون للمجال المغناطيسي المسلط على الذرة اتجاهين $(M = +1, -1)$ $K=1$ بالإضافة إلى الأوربتال الدائري للأوربتال (0).

فعندما $K = 1$ يكون للمجال المغناطيسي المسلط على الذرة اتجاهين $(M = +2, +1, -1, K=2)$ بالإضافة إلى الأوربتال الدائري للأوربتال (0).

فعندما $K = 1$ يكون للمجال المغناطيسي المسلط على الذرة اتجاهين $(M = +3, +2, +1, K=3)$ بالإضافة إلى الأوربتال الدائري للأوربتال (0). وفي النظريات الحديثة استخدم الرمز (L)

لتعبير عن العدد الكمي الثانوي Secondary quantum number بدلاً من K . بدون تسليط مجال مغناطيسي ، أكتشف أن للألكترون برم ذو اتجاهين. الأول بإجاه عقرب الساعة 1^{st} one clock wise(+1/2)

بينما يكون الثاني عكس عقرب الساعة. $2^{nd} \text{ one anti clock wise}(-1/2)$ حيث يكون لهذين الاتجاهين نفس الطاقة ، وعلى العكس من ذلك في وجود المجال المغناطيسي حيث يصبح الطيف أكثر تعقيداً ويكون لكل برم طاقة تختلف عن الآخر.

◆ أخيراً فإن نظرية لم تستطع وضع أي تفسيرات حول التآصر الكيميائي.

الطبيعة الموجية للألكترون The wave nature of the electron

في عام 1926 وضع العالم النمساوي شرودنكر *Erwin Schrodinger* وباستخدام تقنيات رياضية معقدة ، صيغ ومعادلات تصف سلوك وطاقات الجزيئات الدقيقة جداً عموماً .

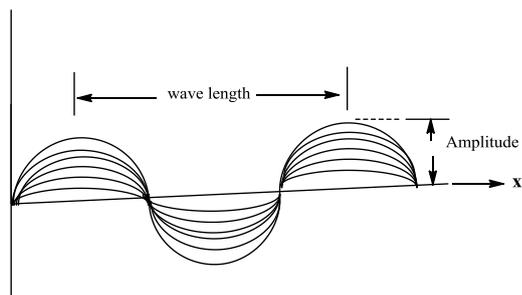
أن المعادلة المستندة على قانون نيوتن لحركة الدقائق المايكروية Newton's laws of motion. تتضمن المعادلة كلا الصفتن للسلوك الألكتروني فهي تشمل جزء يتضمن

الكتلة (m) mass وسلوك الموجة Ψ wave function .

الدالة الموجية نفسها لا تمتلك معناً فيزيائياً والأكثر من ذلك تعطي هذه المعادلة احتمالية

probability لتواجد الألكترون تتناسب مع مربع الدالة الموجية Ψ^2 .

$$\text{Probability}_{(x,y,z)} \propto |\Psi_{(x,y,z)}|^2$$



شكل (١ - ١٦) تجربة الخيط الممدود لتوضيح مبدء الإحتمالية لتواجد الألكترون

في لحظة ما ، يمكن تمثيل الانتقال الالكتروني كاهتزاز جيل (مثبت من جهتيه) عند سحبه من الوسط ثم تركه. وهكذا فان احتمال تواجد الالكترون يعبر عنه بمعادلة تفاضليه من الدرجة الثانية. □

التفسير الرياضي للحركة Mathematical view for wave movement

الموجية

دعنا نقترح ان هذه الحركة كانت باتجاه واحد وليكن (X direction) وهكذا :

$$A=2a \sin \frac{2\pi x}{\lambda} \cos 2\pi \nu t \text{ where } A= \text{amplitude} \quad ; a= \text{constant} \quad ;$$

λ =wave length ; ν = frequency ; t= time

$$f(x)= 2a \sin \frac{2\pi x}{\lambda}$$

$$A= f(x) \cos 2\pi \nu t$$

وبأخذ تفاضل الدرجة الثانية مرة نسبةً الى X ومرة نسبةً الى t نحصل على الحل التالي :

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = - \frac{4\pi^2 \nu^2}{c^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} f(x)$$

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} f(x) = 0 \quad \square$$

$$\lambda = \frac{h}{mV} \text{ وبالتعويض عن قيمة } \lambda \text{ من معادلة دي برولي}$$

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} f(x) = 0 \quad \square$$

$$\mathcal{H}\psi = E\psi [\text{eigen functions}]$$

$$\mathcal{H} = \frac{h^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\nabla^2 = \text{laplacian operator} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})$$

Where \mathcal{H} is operator called the **Hamiltonian operator**

(وهي تعمل على الطاقة وهي كعملية + التي تعني الجمع و- تعني الطرح وهكذا العملية التي (تجرى على الطاقة)

(represent the general form of the kinetic and potential energies of the system E is the numerical value of the energy for any particular

ψ .

$$\nabla^2 \psi_{x,y,z} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi_{x,y,z} = 0$$

معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن