أسس كيمياء الكم

(الجزء الأول)

تأليـــف

د. عادل بن عباس الأزهري

أستاذ الكيمياء غير العضوية المشارك

د. عبد الله بن علي القحطاني

أستاذ الكيمياء الفيزيائية المساعد

كلية العلوم – قسم الكيمياء

جامعة الملك سعود

النشر العلمي والمطابع - جامعة الملك سعود

ص.ب ٦٨٩٥٣ - الرياض ١١٥٣٧ - المملكة العربية السعودية

ح جامعة الملك سعود، ١٤٢٦هـ(٢٠٠٥م)

فهرسة مكتبة الملك فهد الوطنية أثناء النشر

الأزهري، عادل عباس

أسس كيمياء الكم - عادل عباس الأزهري؛ عبد الله علي القحطاني - الرياض، ١٤٢٥.

٢٧٠ص؛ ١٧سم × ٢٤ سم

ردمك: ٠-٧٨٣-٣٧-٩٩٦٠ (مجموعة)

٦-٧٩٤-٣٧-٩٩٦٠(ج١)

١- كيمياء الكم أ- القحطاني، عبد الله علي (مؤلف مشارك)

ب- العنوان

ديوي ٥٤١,٢٨ ١٤٢٥/٧٤٣٢

رقم الإيداع: ١٤٢٥/٧٤٣٢

ردمك: ٠-٧٨٣-٣٧-٩٩٦٠ (مجموعة)

٦-٧٩٤-٣٧-٩٩٦٠(ج١)

حكمت هذا الكتاب لجنة متخصصة، شكلها المجلس العلمي بالجامعة، وقد وافق المجلس العلمي على نشره - بعد الاطلاع على تقارير المحكمين - في اجتماعه السادس عشر للعام الدراسي ١٤٢٤/١٤٢٥هـ المعقود بتاريخ ١٤٢٥/٢/٢١هـ الموافق ٢٠٠٤/٤/١١م.

النشر العلمي والمطابع ١٤٢٦هـ

المقدمة

الحمد لله نحمده ونستعينه ونستهديه ونستغفره ونعوذ به من شرور أنفسنا ومن سيئات أعمالنا من يهده الله فهو المهتدي ومن يضلل فلن تجد له ولياً مرشداً. والصلاة والسلام على خير عباده من خلقه سيدنا محمد صلى الله عليه وعلى آله وصحبه وسلم. وبعد.

فقد حثنا الإسلام على تعلم العلوم وتعليمها، حيث قال الله سبحانه وتعالى في كتابه العزيز ﴿ ٱقْرَأْ بِٱسْمِ رَبِّكَ ٱلَّذِى خَلَقَ ۝١ خَلَقَ ٱلْإِنسَـٰنَ مِنْ عَلَقٍ ۝٢ ٱقْرَأْ وَرَبُّكَ ٱلْأَكْرَمُ ۝٣ ٱلَّذِى عَلَّمَ بِٱلْقَلَمِ ۝٤ عَلَّمَ ٱلْإِنسَـٰنَ مَا لَمْ يَعْلَمْ ۝٥ ﴾ وفي الحديث قال الرسول صلى الله عليه وسلم: ((طلب العلم فريضة على كل مسلم)).

لقد بدا للعيان مؤخرا الاهتمام الجاد لدى العديد من علماء الأمة في سائر المجالات في تفعيل اللغة العربية كلغة علمية إيمانا منهم بمدى أهمية دور اللغة الأم في النهوض بمستوى التحصيل المعرفي. وقد كان للعلماء الكيميائيين دورهم وأصبحت المكتبة العربية وبحمد الله تحوي العديد من الكتب المؤلفة والمترجمة في سائر فروع الكيمياء. ولكن كيمياء الكم لم تحظى حتى الآن إلا بالعدد القليل جدا من هذه الجهود. وبلا شك فإن مادة كيمياء الكم من المناهج التي تحتاج إلى اهتمام خاص لما قد يراه الدارس من بعض الصعوبة في فهمها. وقد رأينا حاجة المكتبة العربية إلى عرض هذه المادة بطريقة سهلة ومبسطة ووضعنا خبرتنا الدراسية والتدريسية في هذا الكتاب مما سيكون له الفائدة الكبيرة بإذن الله تعالى في مساعدة الطلاب لفهم هذا المنهج.

تعتبر كيمياء الكم- لدى الكثيرين- من المناهج التي تحتاج إلى مجهود في دراستها ويعود ذلك إلى ما تحتاجه كيمياء الكم من إلمام بمادة الرياضيات وكذلك لما تحتويه من بعض الأسس والمفاهيم التي قد تبدو غريبة أو جديدة للكثير من الطلاب. وقد راعينا عند كتابة هذا الكتاب استخدام أسهل الطرق في إثبات الكثير من المعادلات للوصول إلى النتائج المنشودة، وكذلك استخدمنا أسهل وأوضح الطرق لتوضيح الكثير من مفاهيم هذا العلم.

وفي الختام نود أن ننوه إلى أن هذا الكتاب هو الجزء الأول لمجموعة من ثلاثة كتب. ونخصصه لشرح المبادئ الأولية في منهج كيمياء الكم. أما الكتاب الثاني فسيخصص بإذن الله تعالى للذرات العديدة الإلكترونات. أما الثالث فسيخصص لشرح التطورات الحديثة في كيمياء الكم.

نسأل الله العزيز القدير أن ينفعنا بما علمنا ويتقبل منا صالح أعمالنا والحمد لله رب العالمين.

المـــــؤلفان

المحتويات

الموضوع	الصفحة
المقدمة	هـ
قائمة الجداول	م
قائمة الأشكال	س
الفصل الأول: مقدمة تاريخية	١
(١,١) الطيف الذري للهيدروجين	٣
(١,٢) الإشعاع المنبعث من جسم تام السواد	٥
(١,٣) التأثير الكهروضوئي	٨
(١,٤) نظرية بوهر	١٢
(١,٥) طيف ذرة الهيدروجين ومعادلة ريدبرج	١٨
(١,٦) فرضية دي بروجيليه	٢١
(١,٧) مبدأ الشك لهيزنبرج	٢٤
(١,٨) تمارين	٢٥
الفصل الثاني: مراجعة لبعض المبادئ الرياضية	٣١
(٢,١) التفاضل	٣٢

(٢,٢) التكامل ٣٣
(٢,٣) نظم الاحداثيات ٣٥
(٢,٤) الأعداد المركبة ٤١
(٢,٥) المصفوفات ٤٦
(٢,٦) المحددات..... ٥١
(٢,٧) المتجهات..... ٥٣
(٢,٨) المؤثرات (أو العوامل) ٥٩
(٢,٩) الدوال المميزة ٦٢
(٢,١٠) الدوال الفردية والزوجية ٦٤
(٢,١١) المعادلات التفاضلية ٦٧
(٢,١٢) تمارين ٦٩

الفصل الثالث: جسيم في صندوق وفروض ميكانيكا الكم ٧٥
(٣,١) اشتقاق معادلة شرودينجر ٧٥
(٣,٢) تفسير دالة الموجة ψ..... ٧٩
(٣,٣) جسيم في صندوق ذي بعد واحد..... ٨٠
(٣,٤) معايرة دالة الموجة ٨٥
(٣,٥) التعامد (أو التضاد)..... ٨٧
(٣,٦) الطاقة ودالة الموجة لجسيم في صندوق ٨٨
(٣,٧) مبدأ التطابق ٩٣
(٣,٨) فروض نظرية الكم ٩٤
(٣,٩) تطبيقات على فروض نظرية الكم ١٠٠

(٣,١٠) جسيم في صندوق ثلاثي الأبعاد ١٠٤
(٣,١١) التناظر ١١٠
(٣,١٢) جسيم في حلقة ١١١
(٣,١٣) تمارين ١١٩

الفصل الرابع: الحركة التوافقية البسيطة ١٢٥
(٤,١) الحركة التوافقية البسيطة من واقع الميكانيكا الكلاسيكية ١٢٦
(٤,٢) الحركة التوافقية البسيطة من واقع ميكانيكا الكم ١٣٠
(٤,٣) بعض العلاقات الرياضية الخاصة بدالة الموجة ψ_0 للحركة التوافقية البسيطة ١٣٨
(٤,٤) الطاقة الاهتزازية ١٤٢
(٤,٥) المهتز الغير توافقي ١٤٦
(٤,٦) تمارين ١٤٩

الفصل الخامس: الدوار الصلد ١٥٣
(٥,١) حل معادلة شرودينجر للدوار الصلد ١٥٤
(٥,٢) مستويات الطاقة للدوار الصلد ١٦٢
(٥,٣) طاقة الانتقال الدورانية ١٦٣
(٥,٤) الدوار غير الصلد ١٦٥

الفصل السادس: ذرة الهيدروجين ١٦٩
(٦,١) حل معادلة شرودينجر للذرات الشبيهة بذرة الهيدوجين ١٧٠

(٦,٢) دوال الموجة للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين ١٧٩
(٦,٣) الدوال الحقيقية للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين ١٩١
(٦,٤) مستويات الطاقة ١٩٥
(٦,٥) تمارين ١٩٧

الفصل السابع: العزم الزاوي ٢٠١
(٧,١) نظرة الفيزياء الكلاسيكية للعزم الزاوي..... ٢٠٢
(٧,٢) التبادل وقياس عدة خواص في نفس الوقت ٢٠٥
(٧,٣) التبادل والعزم الزاوي ٢٠٩
(٧,٤) الدوال المميزة والقيم المميزة للعزم الزاوي ٢١٢
(٧,٥) تمثيل العزم الزاوي المداري ٢١٥
(٧,٦) العوامل السلمية ٢١٧
(٧,٧) تمارين ٢٢٣

المراجع ٢٢٧
الملاحق ٢٢٩
ملحق رقم (١): الثوابت الفيزيائية ^{a} ٢٣١
ملحق رقم (٢): عوام تحويل الطاقة ٢٣٣
ملحق رقم (٣): الحروف اللاتينية ٢٣٥
ملحق رقم (٤): بعض رموز بادئات الأرقام ٢٣٧
ملحق رقم (٥): بعض التكاملات الهامة ٢٣٩
ملحق رقم (٦): بعض العلاقات الرياضية الهامة ٢٤٣

الكشاف وثبت المصطلحات ٢٤٥

(عربي- إنجليزي)..... ٢٤٥

(إنجليزي- عربي)..... ٢٥٨

قائمة الجداول

الموضوع الصفحة

جدول (٤,١): متعددة حدود هيرمايت عند قيم مختلفة من عدد الكم v ١٣٩
جدول (٥,١): قيمة الدالة $T_{J,m}(\theta)$ عند قيم مختلفة من J و m ١٦١
جدول (٦,١): الدوال القطرية من دوال الموجة للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين ... ١٧٩
جدول (٦,٢): دوال الموجة التخيلية للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين..... ١٨٠
جدول (٦,٣): الدوال الزاوية للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين..... ١٨٦
جدول (٦,٤): دوال الموجة للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين..... ١٩٤

قائمة الأشكال

الموضوع **الصفحة**

شكل (١,١): طيف الانبعاث لذرة الهيدروجين في منطقة الضوء المرئي ٥

شكل (١,٢): العلاقة بين التردد وكثافة الضوء المنبعث من جسم تام السواد ٦

شكل (١,٣): رسم تخطيطي للدائرة الكهربائية المستخدمة لتمثيل ظاهرة التأثير الكهروضوئي ٩

شكل (١,٤): العلاقة بين تردد الضوء الساقط والطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة (أو جهد الإيقاف) في تجربة التأثير الكهروضوئي ١٠

شكل (١,٥): مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين وبعض المتسلسلات الناتجة عن الانبعاث الضوئي ٢٠

شكل (١,٦): حركة الإلكترون كموجة في مدار ٢٣

شكل (٢,١): نظام الإحداثيات الكارتيزية ٣٥

شكل (٢,٢): نظام الإحداثيات الكروية القطبية ٣٦

شكل (٢,٣): نظام الإحداثيات الأسطوانية ٣٧

شكل (٢,٤): نظام الإحداثيات البيضاوية ٣٨

شكل (٢,٥): تمثيل الأعداد المركبة بيانياً ٤٢

شكل (٢,٦): تمثيل الأعداد المركبة ٥٣
شكل (٢,٧): جميع المتجهات..... ٥٤
شكل (٢,٨): $\vec{C} = \vec{A} \times \vec{B}$ له القيمة $AB \sin \theta$ ويأخذ اتجـــاه يعطى بقاعدة اليـــد اليمنى..... ٥٦
شكل (٢,٩): الدالة الفردية والدالة الزوجية ٦٦
شكل (٣,١): تمثيل دالة الموجة ٧٦
شكل (٣,٢): جسيم في صندوق من بعد واحد..... ٨١
شكل (٣,٣): تمثيل دالة الموجة والطاقة لجسيم في صندوق ٨٩
شكل (٣,٤): تمثيل تعامد دوال الموجة بيانياً ٩٠
شكل (٤,١): تمثيل الحركة التوافقية البسيطة ١٢٦
شكل (٤,٢): دالة الموجة لتمثيل الحركة التوافقية البسيطة ١٢٧
شكل (٤,٣): شكل معادلة القطع المكافئ ١٣٢
شكل (٤,٤): دالة الموجة ومستويات الطاقة للحركة التوافقية البسيطة ١٤١
شكل (٤,٥): الطاقة الاهتزازية وطاقة الانتقالات الاهتزازية للمهتز التوافقي ١٤٤
شكل (٤,٦): منحنى طاقة الجهد لمورس للحركة غير التوافقية(...) وللحركة التوافقية البسيطة (...) ١٤٦
شكل (٤,٧): التقارب بين مستويات الطاقة الاهتزازية نتيجة للحركة غير توافقية ...١٤٨
شكل (٥,١): طاقة الانتقال بين المدارات الدورانية ١٦٣
شكل (٥,٢): طاقة المدارات وطاقة الانتقال بين المدارات الدورانية في حالة الدوار غير الصلد ١٦٦
شكل (٦,١): الدوال القطرية للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين ١٨٣
شكل (٦,٢): دوال التوزيع القطرية للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين ١٨٤

شكل (٦,٣): الدوال الزاوية للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين ١٨٨
شكل (٦,٤): دالة الاحتمال الزاوي لبعض الدوال ١٩١
شكل (٦,٥): أشكال بعض المدارات الحقيقية للذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين ١٩٢
شكل (٧,١): العزم الزاوي المداري ٢٠٢
شكل (٧,٢): استخدام قاعدة اليد اليمنى لتحديد اتجاه العزم الزاوي المداري ٢٠٣
شكل (٧,٣): تمثيل العزم الزاوي المداري عند $l = 1$ ٢١٦
شكل (٧,٤): تمثيل العزم الزاوي المداري عند $l = 2$ ٢١٦