

كم 3

شرح دالة الموجة

Interpretation of Wavefunction

ان توضيح (ψ) يكون مستنداً على فرضية اقترحت من قبل العالم ماكس بورن **وتستند** على المشابهة للنظرية الموجية للضوء والتي فيها مربع السعة للموجة الكهرومغناطيسية يكون ممثلاً كالشدة ومن ثم بشروط الكم كوجود عدد من الفوتونات (تواجدت). فسيكون توضيح مقترح Born هو المربع لدالة الموجة ψ او ψ^* اذا ψ تكون مقداراً معقداً) سيتناسب أيضاً مع احتمالية إيجاد الجسيمة لكل نقطة في الفضاء خصوصاً بالنسبة لنظام باتجاه – واحد :

اذا كانت (السعة) دالة الموجة لجسيمة هي (ψ) عند نقطة معينة (x).

- فان الاحتمالية لتواجد تلك الجسيمة بين (x) و $(x+dx)$ تكون متناسبة مع الحد $(\psi^* \psi dx)$.
- وذلك يعني ان $\psi^* \psi$ سيمثل كثافة الاحتمالية (طالما إنها يجب أن تكون مضروبة بالطول المتناهي في الصغر للمنطقة (dx) لأجل الوصول إلى احتمالية (ψ) نفسها والتي تدعى **سعة الاحتمالية**.
- فبالنسبة لجسيمة لها القدرة لان تتحرك في ثلاث اتجاهات (مثلاً الكترون قرب نواة في الذرة) فان دالة الموجة تعتمد على النقطة r نسبةً للاحداثيات x,y,z

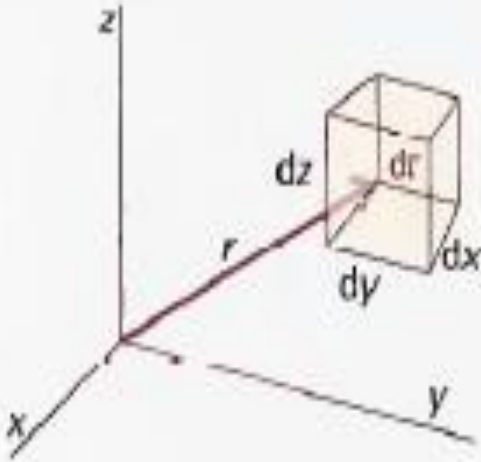


Fig. 8.20 The Born interpretation of the wavefunction in three-dimensional space implies that the probability of finding the particle in the volume element $d\tau = dx dy dz$ at some location r is proportional to the product of $d\tau$ and the value of $|\psi|^2$ at that location.

- للاحداثيات (x, y, z) وسيكون التوضيح
- لـ $(\psi(r))$ كما في الشكل المجاور والذي يوضح استيضاح Born لدالة الموجة في اتجاهات ثلاثة لايجاد الجسم في العنصر الحجمي $d\tau = dx dy dz$

عند موقع r يتناسب طرديا لمقدار حاصل الضرب لـ $d\tau$ و القيمة لـ $\psi^* \psi$ عند ذلك الموقع.

- من ثم يمكن القول:
- إذا كانت السعة ^(الضخامة) لدالة الموجة لجسيمة هي ψ عند نقطة (r) فإن احتمالية إيجاد تلك الجسيمة في الحجم المتناهي في الصغر $(d\tau = dx dy dz)$ عند النقطة r تتناسب مع $(\psi^* \psi d\tau)$.

• مثال 13.2

- إذا كانت دالة الموجة للإلكترون في أوطاً حالات الطاقة لذرة الهيدروجين هي : $\psi(r) \propto e^{-r/a_0}$ وفيها $a_0 = 52.9 \text{ pm}$ و r هي المسافة عن النواة.
- * لاحظ ان دالة الموجة تعتمد فقط على المسافة وليست على الموقع الزاوي.
- احسب الاحتماليتين النسبيتان لإيجاد الإلكترون في داخل حجم صغير وبقدر (1.0 pm^3) موجود:
 (أ) عند النواة، (ب) عند مسافة (a_0) عن النواة.

• الحل :

• تتناسب الاحتمالية مع المقدار $(\psi^2 d\tau)$ الذي يُحسب عند الموقع المفترض وان الحجم يكون صغير جداً (حتى ولو بمقياس حجم الذرة) اذ يتيح ذلك لنا من إهمال الاختلافات في (ψ) المتوقعة، وعليه فإنه يمكن كتابة

• $(d\tau = \delta \tau = 1.0 \text{ Pm}^3)$

• (أ)- عند النواة ستكون قيمة $(r = 0)$ ومن ثم فأن:

$$\psi^2 \propto \ell \text{ and } \psi^2 \delta \tau \propto 1.0$$

• **ب-** عند مسافة $r = a(0)$ (لقيمة عشوائية) ولكن باتجاه محدد،

• فان: $\psi^2 \delta \tau \propto e^{-2} \times 1.0 = 0.14$

نسبة الاحتماليات ستكون :

$$\frac{1.0}{0.14} = 7.1$$

- تعليق :
- لاحظ انه يكون اكثر احتمالاً (وبنسبة 7) بأن نجد الالكترون عند النواة من ان يكون في ذلك العنصر الحجمي عند مسافة $(a(0))$ من النواة. فان احتمالية وجود الالكترون في نفس الحجم عند المسافة (1ملم) ستكون ببساطة ليست صفراً ولكن تكون من الصغر يمكن اهمالها.

- تمرين :
- اذا كانت دالة الموجة لأوطاً طاقة اوربيتال في ايون He^- هي $(\psi \propto e^{-2r/a_0})$ ، فاعد الحسابات لذلك الايون.
- (اي تعليق)

- فإذا كانت (ψ) هي الحل لمعادلة شرودنجر وكذلك (N) حيث ان (N) هو اي ثابت. ذلك يعني، دائماً يمكن إيجاد عامل كاحتمالية مثلاً في مفهوم بورن Born **فتصبح** العلاقة هي **علاقة تساوي** وهذا هو **أول تبسيط مهم** يمكن افتراضه، ومن ثم العامل (N) والذي دُعي فيما بعد بثابت التطبيع (Normalization Constant). فإذا ضمنا N مع دالة الموجة فان ايضاح بورن ينص على ان احتمالية وجود الجسيمة في المدى (dx) تكون مساوية الى $(N\psi^*)(N\psi)dx$

- وكذلك حاصل الجمع للفضاءات الحجمية لكل الاحتماليات كل على حده. يجب ان يكون وحدة واحدة (احتمالية الجسيمة في اي مكان في النظام تكون وحدة واحدة Unity) ويعبر عنها بالتكامل التالي :

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1 \text{ or } N^2 = 1 / \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \dots\dots\dots (5)$$

- ومن ثم بأخذ التكامل لجميع الاحتمالات يصبح بالامكان ايجاد ثابت التطبيع. وهذه الطريقة تدعى بتطبيع دالة الموجة.

- * ومن الآن ولاحقاً سنستخدم دالة الموجة المطبوعة أي انه من الآن ولاحقاً سنفترض إن (ψ) ستكون متضمنة عامل التطبيع فنكتبها :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1 \dots \dots \dots (6)$$

وفي حالة الاتجاهات الثلاثة فان دالة الموجة ستُطبع كما يلي:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx dy dz = 1 \quad \text{or as} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi d\tau = 1 \quad \text{----} (7)$$

• مثال 13.3

• دالة الموجة المستخدمة لذرة الهيدروجين في المثال 13.2 هي غير مطبوعة، طبعتها.

• طريقة الحل :

• قيم N من المعادلة (7) اعلاه. العنصر الحجمي في ثلاثة اتجاهات في الفضاء يكون $(d\tau = dx dy dz)$. ولكن في مسائل ذات تماثل كروي كما في هذه الحالة فانه سيكون من السهل أن نحل بتعبير الإحداثيات الكروية كما في الشكل السابق أي إن:

$$x = r \sin \theta \cos \phi ; y = r \sin \theta \sin \phi ; z = r \cos \theta$$

- ومن ثم فان العنصر الحجمي يكون:

$$d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

- ولنصف قطر r يقع ضمن مدى من صفر إلى ∞ فان θ (تمثل الارتفاع colatitudes) وتأخذ القيم من 0 الى π و العلو او السمتي (Azimuth) يأخذ القيم من 0 الى 2π

• الجواب :

• من المعادلة (7) وبها $\psi \propto N e^{-r/a_0}$ نجد ان

$$\int \psi^* \psi d\tau = N^2 \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\theta$$

$$= N^2 \left\{ \left(\frac{a_0^3}{4} \times 2 \times (2\pi) \right) \right\} = \pi a_0^3 N^2$$

• ومن ثم، لأجل جعلها تساوي وحدة واحدة اي ان

$$N = \left(1/\pi a_0^3 \right)^{1/2}$$

•

- فان دالة الموجة المطبوعة ستصبح:

$$\psi = \left(1/\pi a_0^3\right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

- تعليق :
- اذا اعيد المثال 13.2 فاننا يمكن الحصول على الاحتماليات الحقيقية لايجاد الالكترون في العنصر الحجمي لكل موقع وليست فقط قيمها النسبية فيكون لـ (أ) 2.2×10^{-6} و
- لـ (ب) 3.1×10^{-7} .