الانظمة المتماثلة كرويا

النظرية الكمية لذرة الهيدروجين

(1-1) معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين في بعدين

تكتب معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن لذرة الهيدروجين في بعدين بالصيغة التالية

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right]+V\ (x\ ,\ y\ )\psi=E\,\psi \text{.................(1-1-1)}$$

حيث أن الدالة ψ تابعاً لكل من $(x\ ,y\ )$.

$V\ (x\ ,\ y\ )$: تمثل الطاقة الكامنة الالكتروستاتيكية.

$$V\ (r\ )=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r} \text{................................(1-1-2)}$$

و حيث أن (V) دالة لــ (r) و ليس لــ $(x\ ,y\ )$ لا نستطيع أن نعوضها مباشرة فـــي المعادلة (1-1-1). و يوجد طريقتان لتوحيد المتغيرات:

1. إما أن نكتب V بدلالة الإحداثيات الديكارتية.
2. أو كتابة معادلة شرودنجر بدلالة الإحداثيات القطبية.

و نجد أن الطريقة الثانية أكثر ملائمة و ذلك للتناظر الكروي الموجود.

و باستخدام الإحداثيات القطبية تأخذ معادلة شرودنجر في بعدين الصيغة التالية :

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r,\theta)+V\ (r)\psi(r,\theta)=E\ \psi(r,\theta) \text{.................(1-1-3)}$$

حيث أن :

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \text{....................................(1-1-4)}$$

و تعتبر μ : الكتلة المختزلة (reduced mass)، ذلك أن كل من الإلكترون و النواة يدور حول مركز كتلتيهما :

$$\mu = \frac{m\,M}{m + M}$$

m : كتلة الإلكترون،

M : كتلة البروتون.

حيث أن الكتلة μ تكون أقل من كتلة الإلكترون (m) .

(1-2) فصل المتغيرات

إن كتابة معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين بدلالة الإحداثيات القطبية (r,θ) تساعدنا على فصل هذه المعادلة التفاضلية الجزئية إلى معادلتين، كل منها بمتغير واحد.

نكتب دالة الموجة لذرة الهيدروجين $\psi(r,\theta)$ على شكل حاصل ضرب دالتين، $R(r)$: تعتمد على (r) فقط، $\Theta(\theta)$: تعتمد على (θ) فقط (David. J.Griffiths, 1995) .

$$\psi(r,\theta) = R(r)\,\Theta(\theta)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1\text{-}2\text{-}1)$$

إن الدالة $R(r)$ توضح تغير دالة (ψ) للإلكترون بتغير الإحداثي النصف قطري مع بقاء (θ) ثابتة، و الدالة $\Theta(\theta)$ توضح تغير (ψ) مع زاوية (θ) مع بقاء (r) ثابتة.

$$\nabla^2\psi(r,\theta) = \nabla^2\left[R(r)\,\Theta(\theta)\right]$$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left[\Theta\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{\Theta}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{R}{r^2}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}\right] + V\ R\,\Theta = E\ R\,\Theta\ldots\ldots\ldots(1\text{-}2\text{-}2)$$

حيث أن

$$\nabla^2\psi = \Theta\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{\Theta}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{R}{r^2}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}$$

وبأستخدام العلاقات السابقة نستطيع الحصول على العلاقة الاتية :-

$$\frac{r^2}{R}\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{r}{R}\frac{dR}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}r^2\left(E - V\right) = -\frac{1}{\Theta}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1\text{-}2\text{-}3)$$

نلاحظ أن الطرف الأيسر من المعادلة (1-2-3) اقتران يعتمد فقط على (r) و الطرف الأيمن فيها يعتمد فقط على (θ) و بالتالي فإن المعادلة (1-2-3) يمكن أن تكون صحيحة فقط عندما يساوي طرفاها كمية ثابتة. و من المناسب أن نكتب الثابت المساوي لطرفي المعادلة بالصيغة (m^2).

و عليه تكون المعادلة التفاضلية لـــ (θ) هي :

$$-\frac{1}{\Theta}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = m^2\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1\text{-}2\text{-}4)$$

و المعادلة التفاضلية لـ (R) هي :

$$\frac{r^2}{R}\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{r}{R}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}r^2\left(E-V\right)=m^2 ....(1\text{-}2\text{-}5)$$

و من المناسب إعادة كتابة المعادلتين (1-2-4) و (1-2-5) بالصيغ التالية :

$$\frac{1}{\Theta}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+m^2=0 ....(1\text{-}2\text{-}6)$$

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}-\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}-E\right)+\frac{m^2}{r^2}\right]R=0 ....(1\text{-}2\text{-}7)$$

(1-3) حلول المعادلات التفاضلية

نلاحظ أن كلاً من المعادلتين السابقتين (1-2-6) و (1-2-7) هي معادلة تفاضلية اعتيادية في متغير واحد. و بذالك نكون استطعنا تبسيط معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين التي كانت معادلة تفاضلية جزئية لمتغيرات إلى معادلتين تفاضليتين كل منهما ذات متغير واحد.

(1-3-1) المعادلة التفاضلية المعتمدة على (θ)

تكتب المعادلة التفاضلية المعتمدة على (θ) من خلال العلاقة (1-2-6) ، و هذه معادلة تفاضلية من الرتبة الثانية، وحلها يكون على الصيغة :-

$$\Theta(\theta)=c\,e^{i\,m\,\theta} ....(1\text{-}3\text{-}1)$$

حيث أن :

$$m=0,\pm 1,\pm 2,\ldots.$$

أي أن m : يجب أن تكون صفراً أو عدداً صحيحاً ، ذلك لأن : Θ و $\frac{d\Theta}{d\theta}$ يجب أن تكون مستمرة ، ويجب ان تكون احادية القيمة (Single - Valued) وذلك لأن الاحتمالية لها قيمة واحدة عند كل زمان ومكان معينين (David. J. Griffiths, 1995).

(1-3-2) المعادلة التفاضلية المعتمدة على (r) .

تكتب المعادلة التفاضلية المعتمدة على (r) من خلال العلاقة (1-2-7) ، وبفرض أن :-

$$\beta = \frac{-2\mu k e^2}{\hbar^2} \quad ; \quad \alpha^2 = \frac{-2\mu E}{\hbar^2}$$

نجد أن المعادلة (1-2-7) تأخذ الشكل :-

$$\Rightarrow \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} - \left[\frac{\beta}{r} + \alpha^2 + \frac{m^2}{r^2}\right]R = 0 .... (1\text{-}3\text{-}2)$$

حتى يكون للمعادلة (1-3-2) حلول صحيحة، نفحص سلوك الدالة $R(r)$ عندما :

1) $r \to \infty$.

و نلاحظ انه عندما $(r \to \infty)$ فإن المعادلة (1-3-2) تأخذ الشكل :

$$\frac{d^2R}{dr^2} - \alpha^2 R = 0 .... (1\text{-}3\text{-}3)$$

و هذه معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية ونستطيع أن نكتب حلها كمايلي :-

$$R(r) = c_1 e^{\alpha r} + c_2 e^{-\alpha r} .... (1\text{-}3\text{-}4)$$

الآن نفحص الحل و ذلك عندما $(r \to \infty)$:

1) $e^{-\alpha r} \to zero \quad \Rightarrow$ الحل مقبول

2) $e^{\alpha r} \to \infty \quad \Rightarrow \quad c_1 \to zero$.

$$\Rightarrow R(r) = F(r) e^{-\alpha r} .... (1\text{-}3\text{-}5)$$

الحل الذي تقبله المعادلة (1-3-3) عندما $(r \to \infty)$. حيث أن $F(r)$: اقتران يعتمد على r.

الأن لا بد من إيجاد $\frac{dR}{dr}$ و $\frac{d^2R}{dr^2}$ بدلالة الاقتران $F(r)$ و نعوض الناتج في المعادلة (1-3-2).

$$1)\ \frac{dR}{dr} = \frac{d}{dr}\left[e^{-\alpha r} F(r)\right]$$

$$\Rightarrow \frac{dR}{dr} = e^{-\alpha r}\frac{dF}{dr} - \alpha e^{-\alpha r} F(r)$$

$$2)\ \frac{d^2R}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left[\frac{dR}{dr}\right] = \frac{d}{dr}\left[e^{-\alpha r}\frac{dF}{dr} - \alpha e^{-\alpha r}F(r)\right]$$

$$\Rightarrow \frac{d^2R}{dr^2} = e^{-\alpha r}\frac{d^2F}{dr^2} - 2\alpha e^{-\alpha r}\frac{dF}{dr} + \alpha^2 e^{-\alpha r}F(r)$$

و بتعويض R و $\frac{dR}{dr}$ و $\frac{d^2R}{dr^2}$ في المعادلة (1-3-2) فنحصل على :

$$e^{-\alpha r}\frac{d^2F}{dr^2} - 2\alpha e^{-\alpha r}\frac{dF}{dr} + \alpha^2 e^{-\alpha r}F(r) + \frac{1}{r}e^{-\alpha r}\frac{dF}{dr}$$

$$-\frac{\alpha}{r}e^{-\alpha r}F(r) - e^{-\alpha r}\left[\frac{\beta}{r} + \alpha^2 + \frac{m^2}{r^2}\right]F(r) = 0$$

نقسم المعادلة على $e^{-\alpha r}$ فنحصل على :

$$\frac{d^2F}{dr^2} - 2\alpha\frac{dF}{dr} + \alpha^2 F(r) + \frac{1}{r}\frac{dF}{dr} - \frac{\alpha}{r}F(r) - \left[\frac{\beta}{r} + \alpha^2 + \frac{m^2}{r^2}\right]F(r) = 0$$

.... (1-3-6)

$$\Rightarrow \frac{d^2F}{dr^2} + \left[-2\alpha + \frac{1}{r}\right]\frac{dF}{dr} + \left[\frac{-\alpha}{r} - \frac{\beta}{r} - \frac{m^2}{r^2}\right]F(r) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d^2F}{dr^2} + \left[-2\alpha + \frac{1}{r}\right]\frac{dF}{dr} + \left[-\alpha - \beta - \frac{m^2}{r}\right]\frac{F(r)}{r} = 0 \text{........(1-3-7)}$$