3- النموذج الكمي لذرة الهيدروجين

عرضنا في المحاضرات السابقة كيف نظر نموذج بور للاليكترون كجسيم يدور حول النواة في مستويات طاقة مكممة غير مشعة. قادت هذه المعالجة الى تحليل يجمع المفهومين الكلاسيكي والكمي . وبينما حقق النموذج نجاحات ممتازة في التوافق مع بعض النتائج المعملية ولكنه كما ذكرنا لم يتمكن توضيح " انفلاق" خطوط الطيف كما اشرناها في الفقرة السابقة. تم ازالة هذه الصعوبات عندما استعمل النموذج الكمي التام الذي يظم معادلة شرويدنجر في وصف ذرة الهيدروجين.

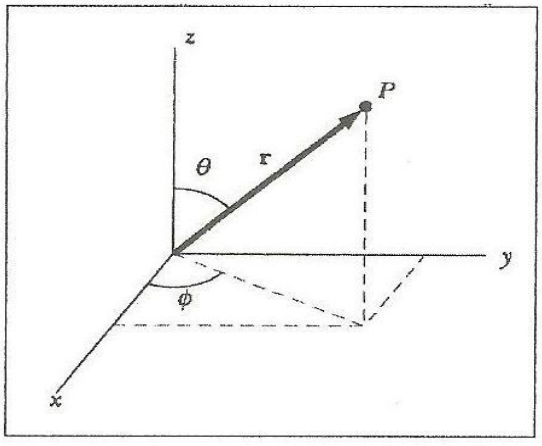
ان دالة الطاقة الكامنة لذرة الهيدروجين هي:

$$U(r) = -k_e \frac{e^2}{r}$$

تكون الخطوات المتبعة لحل مشكلة ذرة الهيدروجين في تعويض $U(r)$ في معادلة شرويدنجر وايجاد الحلول المناسبة للمعادلة.ولأعتماد U على الاحداثي القطري r. اذا تم توسعة معادلة شرويدنجر المعتمدة على الزمن الى احداثيات الابعاد الثلاثة فالنتيجة تكون

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+U\psi = E\psi$$

يكون من السهل حل هذه المعادلة لذرة الهيدروجين اذا تم تحويل الاحداثيات المستطيلة الى الاحداثيات الكروية القطبية . في الاحداثيات الكروية القطبية تمثل نقطة في الفضاء بوساطة ثلاث متغيرات هي r و θ و ϕ ، اذ ان r هي المسافة القطرية من نقطة الاصل $\left(r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}\right)$. ومع تمثيل النقطة على نهاية متجه الموضع $\vec{r}$ كما موضح في الشكل فان الاحداثي الزاوي θ يحدد موضعه الزاوي بالنسبة الى الاحداثي z . ولمجرد ان يسقط متجه الموضع على المستوي xy فان الاحداثي الزاوي ϕ سيحدد مسقط (وبذلك النقطة) الموضع الزاوي بالنسبة الى الاحداثي x .



يكون تحويل معادلة شرويدنجر ثلاثية الابعاد المعتمدة على الزمن بالنسبة الى $\psi(x,y,z)$ الى الصيغة المكافئة بالنسبة الى $\psi(r,\theta,\phi)$ مباشراً ولكنه مرهق ونحن سنتجاوز التفاصيل. و فصلنا اعتماد الزمن عن اعتماد المكان في حلول معادلة شرويدنجر للبعد الواحد ففي هذه الحالة يمكننا فصل متغيرات المكان الثلاثة بوساطة كتابة $\psi(r,\theta,\phi)$ كحاصل ضرب دوال لكل متغير لوحده:

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)f(\theta)g(\phi)$$

في هذه الطريقة يمكن نقل المعادلة التفاضلية الجزئية ثلاثية الابعاد الى ثلاث معادلات تفاضلية طبيعية منفصلة : واحدة تخص $R(r)$ وواحدة تحص $f(\theta)$ وواحدة تخص $g(\phi)$. ان كل من هذه الدوال يكون عرضة لشروط الحد فعلى سبيل المثال ، يجب ان يبقى $R(r)$ محددا عندما يقترب $r \to 0$ و $r \to \infty$ وان $g(\phi)$ يجب ان تمتلك القيمة نفسها كما تمتلكها $g(\phi + 2\pi)$.

عند استخدام كامل مجموعة شروط الحد على جميع الدوال الثلاث سنصل الى ثلاث اعداد كمية مختلفة لكل حالة مسموحة لذرة الهيدروجين . وان هذه الاعداد الكمية حصرية لقيم صحيحة وتعود الى ثلاث درجات مستقلة من درجات الحرية (ثلاث ابعاد فضائية).

يسمى العدد الكمي الاول المصاحب للدالة القطرية $R(r)$ لدالة الموجة الكاملة **العدد الكمي الاساسي** *Principal quantum number* ويخصص له الرمز (n). ستؤدي معادلة الموجة القطرية الى دوال تعطي احتمالية ايجاد الاليكترون عند مسافة قطرية معينة من النواة لقد وجد ان طاقات الحالات المسموحة للهيدروجين هي:

$$E_n = -\left(\frac{k_e e^2}{2a}\right)\frac{1}{n^2} = -\frac{13.606}{n^2} eV \quad , n = 1, 2, 3, \ldots$$

وهذه النتيجة على اتفاق تام مع تلك التي تم الحصول عليها في نظرية بور .

يصاحب **العدد الكمي المداري** *orbital quantum number* والذي يخصص له الرمز (ℓ) كمية حركة الاليكترون الزاوية المدارية ، كما يخصص بالنسبة **للعدد الكمي المغناطيسي المداري** *magnetic quantum number* الرمز (m_ℓ). ان كلا من (ℓ) و (m_ℓ) هي اعداد صحيحة ان كل مجموعة قيم مناسبة لهذه الاعداد الكمية الاربعة تعود الى حالة مسموحة ما للذرة.

يؤدي تطبيق شروط الحد على الاجزاء الثلاثة لدوال الموجة الكاملة الى علاقات هامة بين الاعداد الكمية الثلاثة وكذلك بعض القيود التي تخص قيمها:

يمكن لقيم n أن تمتد من 1 الى ∞

يمكن لقيم ℓ أن تمتد من 0 الى $n-1$

يمكن لقيم m_ℓ أن تمتد من $-\ell$ الى ℓ

على سبيل المثال ، اذا كان $n=1$ فان القيم المسموحة الى ℓ و m_ℓ هي $\ell=0$ و $m_\ell=0$ فقط. واذا كانت $n=2$ ، فان ℓ يمكن أن تكون 0 أو 1 ، فإذا كانت $\ell=0$ فان $m_\ell=0$ ولكن اذا كانت $\ell=1$ فان m_ℓ ربما تكون 1 أو 0 أو -1 .

العدد الكمي	إسمه	القيم المسموحة	عدد الحالات المسموحة
n	العدد الكمي الاساسي	$1, 2, 3, \ldots$	أي عدد
ℓ	العدد الكمي المداري	$0,1,2,\ldots n-1$	n
m_ℓ	العدد الكمي المغناطيسي المداري	$-\ell, -\ell+1, \ldots, 0, \ldots, \ell-1, \ell$	$2\ell+1$