# الفصل الخامس
# الذرة الأحادية الألكترون
# The One Electron Atom

## ① الجهد المتناظر كروياً Spherically Symmetrical Potential

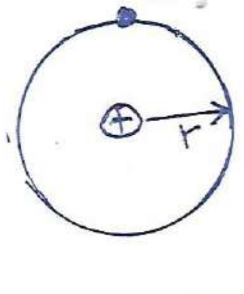
يسمى الجهد المتناظر كروياً بالجهد المركزي حيث تكون الطاقة الكامنة V دالة للمسافة فقط r ويعبّر عنها رياضياً بـ $V(r)$ .

**مثال على القوة المركزية :**

① الجسم المتحرك تحت تأثير قوة جذب كتلي (مثل الجذب الأرضي او الشمسي) والتي تؤدي دائماً الى حركة مدارية للجسيم حول مركز الجذب .

② قوة التجاذب الألكتروستاتيكي بين جسيمين ذريين حيث يكون اتجاه القوة منطبق على الخط الواصل بين مركزي الذرتين أو الجسيمين .

③ الكترون ذرة الهيدروجين ، حيث يعطى الجهد المركزي بالعلاقة :-



$$V(r) = -\frac{k}{r} \quad , k \text{ is constant.}$$

أي أن V دالة لـ r فقط .

وبما ان الجهد من نوع المتناظر كروياً ، لذلك سوف نستخدم نظام الاحداثيات الكروية $(r, \theta, \phi)$ بدلاً من $(X, Y, Z)$ .

ولدراسة أي نظام يتحرك تحت تأثير قوة مركزية أو جهد مركزي نبدأ من معادلة شرودنكر الغير معتمدة على الزمن :-

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 U + V(r)\,U = E\,U \quad \text{——} (1)$$

حيث ان $\nabla^2$ يمثل المؤثر اللابلاسي ويعرف بالاحداثيات الكروية بالعلاقة :-

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

نعوض صيغة $\nabla^2$ في العلاقة (1) ونحصل على :-

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right]U(r,\theta,\phi) + V(r)\,U(r,\theta,\phi) = E\,U(r,\theta,\phi) \quad \text{----} (2)$$

ولحل هذه المعادلة نستخدم اسلوب فصل المتغيرات :-

$$U(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi) \quad \text{-----} (3)$$

نعوض المعادلة (3) في المعادلة (2) ثم نقسم الطرفين على حاصل الضرب $R(r)\,Y(\theta,\phi)$ ، حيث ان :-

$$\frac{\partial U(r,\theta,\phi)}{\partial r} = Y(\theta,\phi)\frac{\partial R(r)}{\partial r}$$

$$\frac{\partial U(r,\theta,\phi)}{\partial \theta} = R(r)\frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial \theta}$$

$$\frac{\partial^2 U(r,\theta,\phi)}{\partial \phi^2} = R(r)\frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial \phi^2}$$

وبذلك نحصل على :-

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{R}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{1}{Y}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] + V(r) = E \quad \text{-----}(4)$$

وبضرب طرفي المعادلة (4) بـ $\frac{-2mr^2}{\hbar^2}$ نحصل على :-

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E - V\right] = -\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \quad \text{-----}(5)$$

الطرف الايسر من المعادلة (5) يعتمد على المتغير r فقط.
و الطرف الأيمن من المعادلة (5) يعتمد على المتغيرين $\theta$ و $\phi$.

$\Leftarrow$ تحقق فصل المتغيرات $\Leftarrow$ كل طرف من طرفي المعادلة يجب ان يساوي مقدار ثابت مثل $\lambda$ $\Leftarrow$ يمكن كتابة المعادلة (5) بالشكل التالي :-

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr}+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E-V(r)\right)=\lambda \quad \text{----}(a) * \frac{R}{r^2}$$

$$-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=\lambda \quad \text{----}(b) * -Y$$

وبعد ترتيب المعادلتين اعلاه نحصل على :-

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr}+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]-\frac{\lambda}{r^2}\right\}R=0 \quad \text{-----}(6)$$

H.W

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y=0 \quad \text{-----}(7)$$

ونتبع نفس الاسلوب لحل المعادلة (7) بطريقة فصل المتغيرات ،

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\phi) \quad \text{----}(8)$$

ونعوض المعادلة (8) في المعادلة (7) ونقسم الطرفين على حاصل الضرب $\Theta\,\Phi$ ، حيث ان :-

$$\frac{\partial Y}{\partial \theta} = \Phi(\phi) \frac{\partial Y}{\partial \theta} \quad \text{and} \quad \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = \Theta(\theta) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

$$\frac{1}{\Theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} + \lambda \sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

------ (9)

H.W

الطرف الايسر من المعادلة (٩) يعتمد على $\theta$ فقط بينما الطرف الايمن يعتمد على $\phi$ فقط $\Leftarrow$ كل طرف يساوي $\mathcal{M}$ وبذلك نحصل على :-

$$\frac{1}{\Theta} \sin\theta \frac{d}{d\theta} \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} + \lambda \sin^2\theta = \mathcal{M} \qquad * \frac{\Theta}{\sin^2\theta}$$

H.W.

$$\text{and} \quad -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = \mathcal{M} \qquad * -\Phi$$

وبعد الترتيب نحصل على :-

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} + \left(\lambda - \frac{\mathcal{M}}{\sin^2\theta}\right) \Theta = 0 \quad --- (10)$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \mathcal{M}\Phi = 0 \quad ------ (11)$$

$\therefore$ يمكن كتابة المعادلة (3) كالآتي :-

$$U(r, \theta, \phi) = R(r)\, \Theta(\theta)\, \Phi(\phi) \quad ---- (12)$$

## ملاحظات :

* لدراسة حركة جسيم تحت تأثير جهد مركزي يجب حل المعادلات الثلاث : (6) التي تعتمد على $r$ فقط و المعادلة (10) التي تعتمد على $\theta$ فقط والمعادلة (11) التي تعتمد على $\phi$ فقط ،

* حل المعادلة (6) يعطي حل الجزء القُطري من المسألة ،

* حل المعادلتين (10) و (11) يعطي حل الجزء الزاوي .

* المعادلات الثلاث 6 , 10 , 11 معادلات خطية متجانسة ، حل أيٍّ منها اذا ضرب بعدد ثابت سيمثل حلاً لتلك المعادلة ايضاً .

* من المعادلة (6) يمكن كتابة مايلي :

$$\frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] - \lambda \right\} R = 0$$

$$\frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} + \left\{ \underbrace{\frac{2mr^2 E}{\hbar^2}}_{\text{بدون وحدات}} - \underbrace{\frac{2mr^2 V}{\hbar^2}}_{\text{بدون وحدات}} - \lambda \right\} R = 0$$

∴ يجب ان تكون $\lambda$ ايضاً بدون وحدات

* من المعادلة (10) :

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + \left(\underbrace{\lambda}_{\text{بدون وحدات}} - \frac{\mu}{\underbrace{\sin^2\theta}_{\text{بدون وحدات}}}\right)\Theta = 0$$

∴ يجب ان تكون $\mu$ بدون وحدات ايضاً

* ان الدوال $\Theta$ و $\Phi$ لها نفس الصيغة لأي مسألة جهد مركزي وذلك لأن صيغة الجهد $V(r)$ تدخل في معادلة الجزء القطري $R$ فقط $\Longrightarrow$ صيغة الدالة $R(r)$ تتغير صيغتها من مسألة الى اخرى بحسب شكل دالة الجهد $V(r)$.

## شرط المعايرة للدالة $u(r,\theta,\phi)$

يمكن كتابة شرط المعايرة كالآتي :-

$$\int_{\tau} u^*(r,\theta,\phi)\, u(r,\theta,\phi)\, d\tau = 1 \qquad \text{----}(13)$$

$d\tau$ عنصر الحجم التفاضلي ، وفي نظام الاحداثيات الكروية يكتب كما يلي :-

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

and

$r : 0 \longrightarrow \infty$ يمثل نصف القطر

$\theta : 0 \longrightarrow \pi$ زاوية الانحراف الشاقولي

$\phi : 0 \longrightarrow 2\pi$ زاوية الانحراف الافقي

$$\Rightarrow \int_r \int_\theta \int_\phi u^*(r,\theta,\phi)\, u(r,\theta,\phi)\, r^2 dr \sin^2\theta \, d\theta \, d\phi = 1$$

$$\because\ u(r,\theta,\phi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$$

$$\therefore \left(\int_0^\infty R^* R \, r^2 dr\right)\left(\int_0^\pi \Theta^* \Theta \sin^2\theta \, d\theta\right)\left(\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi \, d\phi\right) = 1 \qquad \text{----}(14)$$

فاذا كانت $U(r,\theta,\phi)$ دالة عيارية فان الدوال $R(r)$, $\Theta(\theta)$, $\Phi(\phi)$

هي دوال عيارية ايضاً ⟸

$$\left.\begin{aligned}&\int_0^{\infty} R^* R\, r^2 dr = 1\\&\int_0^{\pi} \Theta^* \Theta \sin^2\theta\, d\theta = 1\\&\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi\, d\phi = 1\end{aligned}\right\} \text{-----} (15)$$

---

حل المعادلات التفاضلية (11) ، (10) ، (6) :

حل المعادلة (11) :

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\mu\Phi$$

يمكن كتابة الحل التجريبي كما يلي :

$$\Phi(\phi) = K e^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} \quad \text{-----} (16)$$

المعادلة (16) تحقق المعادلة (11) ، ويجب ان تحقق الشروط التالية :

١- احادية القيمة ، اي ان لكل قيمة $\phi$ توجد قيمة لـ $\Phi$ .

٢- دالة مستمرة ومعرفة ضمن مدى قيم $\phi$ $(0 \to 2\pi)$ .

٣- مشتقتها الاولى مستمرة .

٤- قابلة للتكامل ، اي ان :

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi\, d\phi = \text{مقدار محدد}$$

$$\therefore \Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi n) \quad \text{-------} (17)$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

نعوض معادلة (17) في معادلة (16) :-

$$k e^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} = k e^{\pm i\sqrt{\mu}\,(\phi + 2\pi n)}$$

$$= k e^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} \cdot e^{\pm i\sqrt{\mu}\, 2\pi n}$$

$$\therefore\ e^{\pm i 2\pi n\sqrt{\mu}} = 1$$

$$\cos\left(2\pi n\sqrt{\mu}\right) + i\sin\left(2\pi n\sqrt{\mu}\right) = 1 + 0i$$

$$\Rightarrow\ \cos 2\pi n\sqrt{\mu} = 1$$

$$\sin 2\pi n\sqrt{\mu} = 0$$

هذه العلاقات تصح فقط عند يكون

$n\sqrt{\mu}$ عدداً صحيحاً ، لان $n$ عدد صحيح فأن $\sqrt{\mu}$ ايضاً عدد صحيح

ونرمز له بالرمز $m$ ⟸

$$\sqrt{\mu} = m$$

حيث $m$ عدد صحيح ويأخذ القيم

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \text{----}$$

∴ معادلة (16) يمكن كتابتها كالآتي :-

$$\Phi(\phi) = k e^{im\phi} \quad \text{-----} (18)$$

ويمكن ايجاد ثابت المعايرة $k$ للمعادلة (18) كما يلي :-

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi \, d\phi = 1$$

$$k^* k \int_0^{2\pi} e^{-im\phi}\, e^{+im\phi}\, d\phi = 1$$

$$\Rightarrow k^2 \left[\phi\right]_0^{2\pi} = 1$$

$$\therefore 2\pi k^2 = 1 \quad \Rightarrow k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}} \quad \text{-------} (19)$$

$m$ هو العدد الكمي المغناطيسي .

## حل المعادلة (10) :

لتبسيط حل المعادلة (10) نستبدل المتغير $\theta$ بالمتغير $X$

ومن خلال التعريف الآتي :-

$$\left.\begin{aligned} & X = \cos\theta \quad \text{and} \quad \Theta(\theta) = P(X) \\ & \therefore 0 \leq \theta \leq \pi \quad \Rightarrow -1 \leq X \leq 1 \\ & \text{and} \quad \frac{dx}{d\theta} = -\sin\theta \\ & \Rightarrow \frac{d}{dx} = \frac{d\theta}{dX}\frac{d}{d\theta} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta} \end{aligned}\right\} \text{----} (*)$$

∴ المعادلة (10) ستصبح وبعد تعويض العلاقة ت(*) اعلاه كالآتي :

$$\frac{d}{dx}\left[(1-X^2)\frac{dP(X)}{dx}\right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-X^2}\right)P(X) = 0 \quad \text{-------} (20)$$

H.W

حيث عوضنا عن $u$ بـ $m^2$ . و $P(x)$ هي دالة تحقق نفس الشروط السابقة الذكر لكي تكون دالة مقبولة فيزيائياً .

* المعادلة (20) تحتوي على نقاط شاذة عند $x=\pm 1$ ولا تكون حل المعادلة (20) حلاً "مقبولاً" فيزيائياً الا اذا وفقط اذا يكون :

$$\lambda = l(l+1) \quad , l = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\text{and } |m| \leq l \qquad \text{i.e.} \quad \boxed{-l \leq m \leq l}$$

* الحل الخاص للمعادلة (20) :

الحل الخاص للمعادلة (20) هو عندما تكون $m=0$ ، ⇐ معادلة (20) :

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP(x)}{dx}\right] + l(l+1)P(x) = 0 \quad \text{---(21)}$$

من العلاقة اعلاه ⇐ لكل قيمة من قيم $l$ ستكون هناك دالة $P(x)$ ، $\therefore$ $P_l(x)$ هي متعددة حدود وتسمى متعددة حدود ليجندر من الرتبة $l$ ، وهي تعرف بالعلاقة :

$$\boxed{P_l(x) = \frac{1}{2^l\, l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l} \quad \text{----- (22)}$$

حيث ان قيمة $l$ تحدد تماثل الدالة $P_l(x)$ ، فاذا كان $l$ قيمة زوجية فان الدالة $P_l(x)$ لها تماثلية زوجية ، وهكذا .

* اما اذا كانت $m \neq 0$ في المعادلة (20) ⟸ الحل العام سيكون بالشكل التالي :-

$$\boxed{P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)} \qquad \text{------}(23)$$

$P_l(x)$ = متعددة حدود ليجندر عندما $m=0$ ،

$P_l^m(x)$ = متعددة حدود ليجندر عندما $m \neq 0$ ،

*

| $l$ | $-l \leq m \leq l$ | عدد قيم $m = (2l+1)$ |
|---|---|---|
| 0 | 0 | 1 |
| 1 | $-1, 0, 1$ | 3 |
| 2 | $-2, -1, 0, 1, 2$ | 5 |
| 3 | $-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ | 7 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ |

* حل معادلة (11) هو المعادلة (19). وحل المعادلة (10) هو المعادلة (23) مع كتابة $P_l^m(x) = P_l^m(\cos\theta)$ ⟸ يمكن كتابة حل المعادلة (8) كما يلي :-

$$\boxed{Y_l^m(\theta, \phi) = N_l^m \, P_l^m(\cos\theta) \, e^{im\phi}} \qquad \text{----}(24)$$

التوافقيات الكروية

ثابت المعايرة

الدالة الموجية المعتمدة على $\theta$

الدالة الموجية المعتمدة على $\phi$

وثابت المعايرة يعطى بالعلاقة التالية :

$$\boxed{N_l^m = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2}} \quad \text{-----} (25)$$

* تذكير لما سبق :

١) $\lambda$ ثابت فصل ، ليس له وحدات .

٢) $\mu$ ثابت فصل ، فصل $\theta$ عن $\phi$ ، ليس له وحدات ،

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ، $m = \sqrt{\mu}$

٣) $\lambda = l(l+1)$ ، $l = 0, 1, 2, \dots$

٤) لقيمة محددة من $l$ لدينا $-l \leq m \leq +l$ بحيث تكون عدد القيم الممكنة لـ $m$ : $(2l+1)$

٥) يطلق على العدد $m$ اسم العدد الكمي المغناطيسي magnetic quantum number

٦) يطلق على العدد $l$ اسم العدد الكمي المداري

orbital quantum number .

$$P_0(x) = 1,$$

$$P_1(x) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 3x^2 + 3)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$

A few of the associated Legendre Functions ($eq(22)$) are listed below:

$$P_1^{\pm 1}(x) = (1 - x^2)^{1/2}$$

$$P_2^{\pm 1}(x) = (1 - x^2)^{1/2} 3x$$

$$P_3^{\pm 1}(x) = (1 - x^2)^{1/2} \frac{3}{5}(5x^2 - 1)$$

$$P_2^{\pm 2}(x) = (1 - x^2)3$$

$$P_3^{\pm 2}(x) = (1 - x^2)15x$$

$$P_3^{\pm 2}(x) = (1 - x^2)^{3/2} 15$$