Chapter Five

The One Electron Atom الذرة الاحادية الالكترون

يتضمن هذا الفصل المسائل التي يكون فيها الجهد او (الطاقة الكامنة) متناظرة كرويا الذي يطلق عليه من الناحية الكلاسيكية بالجهد المركزي (Central Potential) والمقصود به هو ان الطاقة تعتمد فقط على المسافة القطرية بين الجسم ونقطة الاصل وتعرف رياضيا بـ $V(\vec{r}) = V(r)$

Central potential: is the potential that depend only on the radial distance i.e.

$$V(\vec{r}) = V(r)$$

وفي هذا الفصل سنقوم بدراسة الذرة الاحادية الالكترون التي تتكون من نواة ذات شحنة (ze) وإلكترون يدور حولها وسندرس بشكل مركز على النظرية الكمية لذرة الهيدروجين Quantum Theory of Hydrogen Atom

أن الطاقة الكامنة الناتجة من تجاذب الالكترون والنواة هو $V(r) = -\frac{k}{r}$ ، حيث ان k مقدار ثابت ويساوي $ze^2/4\pi\varepsilon_\circ$ (حيث ان $z=1$ لذرة الهيدروجين)

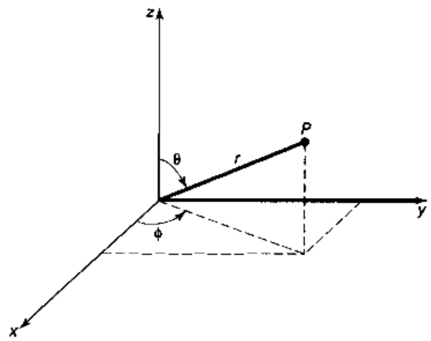
$$\therefore \; V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_\circ r}$$

من المعادلة الاخيرة نلاحظ ان الطاقة الكامنة تعتمد على الاحداثي القطري فقط .

في الأبعاد الثلاثة ترتبط المسافة r بين الجسم ونقطة الاصل بالاحداثيات الكارتيزية كما يلي

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$$

اي ان دالة الطاقة لجهد مركزي $V(r)$ هي دالة للمتغيرات الثلاثة x, y, z أو $V = V(x, y, z)$ في المحاور الكارتيزية لهذا السبب يفضل استخدام الاحداثيات القطبية الكروية (r, θ, ϕ) لكي تبقى الطاقة الكامنة معتمدة على متغير واحد هو r



أن الإحداثيات القطبية الكروية ترتبط مع الاحداثيات الكارتيزية بالعلاقات التالية:

$$\left.\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\phi \\ y &= r \sin\theta \sin\phi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned}\right\} \qquad \text{(a)}$$

اما معكوس هذه التحولات فهي كالاتي

$$\left.\begin{aligned} r^2 &= x^2 + y^2 + z^2 \\ \tan\phi &= \frac{y}{x} \\ \cos\theta &= \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}\right\} \qquad \text{(b)}$$

$\theta =$ الزاوية المحصورة بين المتجه الشعاعي $(\vec{r})$ والاتجاه الموجب للمحور z وتدعى بزاوية السمت (Zenith angle)

$\phi =$ الزاوية المحصورة بين مسقط المتجه الشعاعي $(\vec{r})$ على المستوي xy والاتجاه الموجب للمحور (x) وتدعى بزاوية الزوال (Azimuth angle)

The domain of r is $0 \to \infty$

The domain of θ is $0 \to \pi$

The domain of ϕ is $0 \to 2\pi$

The element volume $d\tau = dv = dx\ dy\ dz$ in Cartesian coordinate become in spherical coordinate $d\tau = r^2 \sin\theta\, dr\ d\theta\ d\phi$

$d\tau = r^2 \sin\theta dr\ d\theta\ d\phi$ (عنصر الحجم التفاضلي في المحاور القطبية الكروية)

The form of del operator $\vec{\nabla}$ is

$$\vec{\nabla} = i\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y} + k\frac{\partial}{\partial z}$$ (مؤثر ديل في الاحداثيات الكارتيزية)

ولغرض تحويل المركبات اعلاه الى المحاور الكروية فاننا نحتاج الى تفاضلات المحاور z, y, x بدلالة المحاور الكروية. ويتم ذلك باستخدام قاعدة التفاضل المتسلسل كالاتي

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

لاحظ اننا لكي نجد $\frac{\partial}{\partial x}$ ، $\frac{\partial}{\partial y}$ ، $\frac{\partial}{\partial z}$ فإننا يجب أن نجد التفاضلات $\frac{\partial r}{\partial x}$ ، $\frac{\partial r}{\partial y}$ ، $\frac{\partial r}{\partial z}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial x}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial y}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial z}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial x}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial y}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial z}$

ويتم ذلك عن طريق المعادلات (b) فيكون لدينا

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$2r\frac{\partial r}{\partial x} = 2x + 0 + 0$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\ \cos\phi$$

وبنفس الأسلوب

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\ \sin\phi$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta$$

ولإيجاد $\frac{\partial \theta}{\partial x}$ نجري الخطوات التالية

$$\cos\theta = \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$-\sin\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{z}{2}(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{3}{2}}(2x)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{z\,x}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}}\sin\theta}$$

$$= \frac{z\,x}{r^3 \sin\theta}$$

$$= \frac{r^2 \cos\theta \;\sin\theta\, \cos\phi}{r^3 \sin\theta}$$

$$\therefore \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\; \cos\phi}{r}$$

وبالاسلوب نفسه

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\; \sin\phi}{r}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$$

بقي لدينا تغيير ϕ بالنسبة لكل من z, y, x كل على انفراد

$$\tan\phi = \frac{y}{x}$$

$$\sec^2\phi \,\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{r\,\sin\theta\,\sin\phi}{r^2 \sin^2\theta\,\cos^2\phi}\,\cos^2\phi$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$$

والنتائج اعلاه يمكن ادراجها في الجدول ادناه

$$\frac{\partial r}{\partial x}=\sin\theta\cos\phi \qquad \frac{\partial r}{\partial y}=\sin\theta\sin\phi \qquad \frac{\partial r}{\partial z}=\cos\theta$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x}=\frac{\cos\theta\ \cos\phi}{r} \qquad \frac{\partial \theta}{\partial y}=\frac{\cos\theta\ \sin\phi}{r} \qquad \frac{\partial \theta}{\partial z}=-\frac{\sin\theta}{r}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}=-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta} \qquad \frac{\partial \phi}{\partial y}=\frac{\cos\phi}{r\sin\theta} \qquad \frac{\partial \phi}{\partial z}=0$$

$$\therefore\quad \frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$=\sin\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial \theta}+(-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi})$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$=\sin\theta\ \sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \sin\phi\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{1}{r}\ \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$=\cos\theta\ \frac{\partial}{\partial r}+(-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta})$$

مؤثر ديل في الاحداثيات الكروية

$$\therefore\quad \vec{\nabla}=\hat{r}\frac{\partial}{\partial r}+\hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}+\hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

المؤثرالابلاسي بدلالة الاحداثيات القطبية الكروية

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

معادلة شرودنكر في الاحداثيات القطبية الكروية

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\phi)+V(r)\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi) \qquad (1)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)\,\psi(r,\theta,\phi)=E\,\psi(r,\theta,\phi) \qquad (2)$$

لأجل حل المعادلة (2) نستخدم طريقة فصل المتغيرات Separation of variable وذلك بوضع

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\,Y(\theta,\phi) \qquad (3)$$

حيث R دالة لـ r بينما Y هي دالة لـ θ , ϕ فقط

من معادلة (3) نستطيع كتابة

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial r}&=Y\,\frac{\partial R}{\partial r}\\ \frac{\partial\psi}{\partial\theta}&=R\,\frac{\partial Y}{\partial\theta}\\ \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}&=R\,\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

واذا عوضنا عن $\psi(r,\theta,\theta)=R(r)\,Y(\theta,\phi)$ ومشتقاتها من المعادلتين (3) ، (4) نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\,Y\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,R\frac{\partial Y}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\,R\,\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)\,RY=ERY$$

وعند قسمة المعادلة اعلاه على $R\,Y$ نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\,\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\,\frac{1}{Y}\,\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial Y}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\,\frac{1}{Y}\,\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)=E \qquad (5)$$

نضرب طرفي المعادلة (5) بالمقدار $(-\frac{2mr^2}{\hbar^2})$ وإعادة ترتيب المعادلة نحصل على المعادلة التالية

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=$$

$$-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \qquad (6)$$

نلاحظ ان الطرف الايسر من المعادلة (6) يعتمد على r فقط ، بينما الطرف الايمن على ϕ,θ فقط . لذا يجب ان يكون كل طرف منهما مساوي الى عدد ثابت مثل λ

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=\lambda$$

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

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]R=\lambda R \qquad (7)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y=0 \qquad (8)$$

ولحل المعادلة (8) ينبغي فصل متغيريها $\phi\,,\,\theta$ وذلك بوضع

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\phi) \qquad (9)$$

وبتعويض المعادلة (9) في المعادل (8) نحصل على

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Phi(\phi)\,\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\,\Theta(\theta)\,\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda\,\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)=0$$

وبالقسمة على $\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\frac{1}{\Phi(\phi)\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda=0$$

نضرب المعادلة اعلاه بـ $\sin^2\theta$ وتحويل الحد الثاني الى الجهة الاخرى

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

ونفس النقاش السابق نرى ان الطرف الايمن من المعادلة اعلاه يعتمد على θ بينما الطرف الايسر يعتمد على ϕ لذا يجب ان يكون كل طرف منهما مساوي الى عدد ثابت مثل μ

$$-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}=\mu \qquad \Rightarrow \quad \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+\mu\,\Phi(\phi)=0 \tag{10}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\,\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{\mu}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \tag{11}$$

<u>Solution of Differation Equation</u> <u>حل المعادلات التفاضلية</u>

نلاحظ من المعادلات السابقة اننا ادخلنا ثابتي الفصل λ , μ ومن الملاحظ ايضا ان الطاقة الكامنة $V(r)$ تظهر فقط في المعادلة (7) اي معادلة R.اي ان الدالة R والمعادلة التفاضلية الخاصة بها تعتمد بشكل ظاهر على نوع دالة الطاقة الكامنة $V(r)$ بينما الدالتان Θ,Φ ومعادلتهما التفاضليتان لاتختلفان اذا اختلف نوع دالة الطاقة الكامنة لان $V(r)$ لاتظهر في هاتين المعادلتين.

الشرط العياري لدالة الموجة

$$\int\psi^*\psi\;d\tau=1$$

حيث ان

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\;\Theta(\theta)\;\Phi(\phi)$$

$$\psi^*(r,\theta,\phi)=R^*(r)\;\Theta^*(\theta)\;\Phi^*(\phi)$$

وبما اننا استخدامنا الاحداثيات القطبية الكروية عنصر الحجم $d\tau$ هو

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

$$\therefore\quad \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}R^*(r)R(r)\;\Theta^*(\theta)\Theta(\theta)\;\Phi^*(\phi)\Phi(\phi)\;r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi=1$$

$$\int_0^\infty R^*(r)R(r)\;r^2dr\int_0^\pi\Theta^*(\theta)\;\Theta(\theta)\;\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}\Phi^*(\phi)\;\Phi(\phi)\;d\phi=1$$

$\Rightarrow$

$$\int_0^\infty R^*(r)\,R(r)\;r^2dr=1$$

$$\int_0^{\pi} \Theta^*(\theta)\, \Theta(\theta) \sin\theta \, d\theta = 1$$

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

اولا حل المعادلة الخاصة لـ $\Phi(\phi)$

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + \mu\, \Phi(\phi) = 0 \qquad (10)$$

نفرض ان الحل للمعادلة اعلاه هو

$$\Phi(\phi) = Ae^{ik\phi}$$

وباخد المشتقة الثانية للمعادلة $\Phi(\phi) = Ae^{ik\phi}$ وتعويضها في معادلة (10) نحصل على

$$\frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} = ik\, Ae^{ik\phi} \quad , \qquad \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -k^2 Ae^{ik\phi}$$

$$-k^2 Ae^{ik\phi} + \mu\, Ae^{ik\phi} = 0$$

$$(-k^2 + \mu) Ae^{ik\phi} = 0$$

$$-k^2 + \mu = 0 \quad \Rightarrow \quad k^2 = \mu \quad ، \quad k = \pm\sqrt{\mu}$$

$$\therefore \quad \Phi(\phi) = Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi}$$

وبما ان دالة الموجة يجب ان تكون فريدة او احادية القيمة في اي نقطة اي ان

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$$

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

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

$$e^{\pm i\sqrt{\mu}\,2\pi)} = 1$$

وباستخدام العلاقة $e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\sin\theta$

$$\cos 2\pi\sqrt{\mu} \pm i \sin 2\pi\sqrt{\mu} = 1$$

وواضح ان الحد الخيالي يجب ان يساوي صفر

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

$$\cos 2\pi\sqrt{\mu} = 1 \quad \Rightarrow \quad 2\pi\sqrt{\mu} = \cos^{-1} 1$$

$$\therefore \quad \sqrt{\mu} = m \tag{12}$$

حيث أن $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots\cdots\cdots$

ويسمى $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots$ بالعدد الكمي المغناطيسي (Magnetic quantum number)

$$\therefore \quad \Phi(\phi) = A e^{im\phi}$$

ولإيجاد A نستخدم الشرط العياري وكما يلي

$$\int \Phi^*(\phi)\, \Phi(\phi)\, d\phi = 1$$

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

$$A^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

$$A = (2\pi)^{-\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \quad \Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \tag{13}$$

حيث ان $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots\cdots$

تماثل الجزء الزوالي لدالة الموجة

في الاحداثيات الكارتيزية تماثل الدالة ψ يعني التحويل من $\vec{r} \to -\vec{r}$ ، ولكن في الاحداثيات القطبية الكروية يعني

$$r \to r \quad ، \quad \theta \to \pi - \theta \quad ، \quad \phi \to \pi + \phi$$

$$\phi(\pi + \phi) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}}\, e^{im(\phi + \pi)}$$

$$= (2\pi)^{-\frac{1}{2}}\, e^{im\phi} \cdot e^{im\pi}$$

$$e^{im\pi} = \cos m\pi + i \sin m\pi$$

1. $\sin m\pi = \sin 0 = \sin \pi = \sin 2\pi = 0$
2. $\cos m\pi = (-1)^m$

$$\therefore \quad \Phi(\pi + \phi) = (-1)^m\, \Phi(\phi)$$

$$\therefore \quad \text{Parity of } \Phi(\phi) \text{ is } (-1)^m$$

اي بعبارة اخرى ان تماثل Φ فهو يعني ان الدالة $e^{im\phi}$ يجب ان تضرب بالعامل $e^{im\pi}$ والذي يساوي $(-1)^m$

حل المعادلة الخاصة بـ $\Theta(\theta)$ المعادلة (11)

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{\mu}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \qquad (11)$$

وبالتعويض عن الكمية $\mu=m^2$ في المعادلة اعلاه ينتج

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \qquad (14)$$

ولاجل حل المعادلة اعلاه نعمل بعض التسهيلات الرياضية

نفرض ان $\omega=\cos\theta$ ، $\Theta(\theta)=p(\omega)$

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{d\omega}{d\theta}\cdot\frac{d}{d\omega}$$

$$\frac{d}{d\theta}=-\sin\theta\frac{d}{d\omega}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}(-\sin\theta\frac{d}{d\omega})(\sin\theta(-\sin\theta\frac{d}{d\omega}p(\omega)))+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})\,p(\omega)=0$$

$$\frac{1}{d\omega}(\sin^2\theta\frac{dp(\omega)}{d\omega})+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})p(\omega)=0$$

$$\because\quad \cos^2\theta+\sin^2\theta=1 \quad\rightarrow\quad \sin^2\theta=1-\cos^2\theta$$

$$\therefore\quad \sin^2\theta=1-\omega^2$$

$$\frac{1}{d\omega}\left[(1-\omega^2)\frac{dp(\omega)}{d\omega}\right]+(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2})\,p(\omega)=0 \qquad (15)$$

بما ان قيم $0\le\theta\le\pi$ فان قيم ω المقابلة ستكون $-1\le\omega\le+1$. لو لاحضنا المعادلة (15) نجد انها (Second order non linear differential equation) معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية فيها الثابت λ مجهول بينما m له قيم محددة وكما بينا سابقا وكما في المعادلات (12) (13) ، بصورة عامة فان حلولها تصبح مالانهاية في $\omega=\pm1$ وهذه هي حلول غير مقبولة فيزيائيا. اما الحل المقبول يقابل حالة خاصة فيها

$$\lambda=\ell(\ell+1) \quad ، \quad \ell=0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \quad , \ \ell\ge|m|$$

حيث ان ℓ يسمى العدد الكمي للزخم الزاوي المداري Angular Momentum Quantum Number

فالحلول المقبولة للمعادلة (15) تدعى دوال ليجندر المترافقة Associated Legender functions اي ان

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} p_\ell(\omega) \tag{16}$$

$$\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \quad , \ \ell \geq |m|$$

حيث تسمى الدالة $p_\ell(\omega)$ كثير حدود ليجندر (Legender polynomial) من الرتبة ℓ والمعرفة بالمعادلة

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell} \left[(\omega^2 - 1)^\ell\right] \tag{17}$$

في حالة $m = 0$ فان المعادلة (16) تعطينا

$$p_\ell^0(\omega) = p_\ell(\omega) \tag{18}$$

اي ان كثيرات حدود ليجندر تحقق المعادلة (15) عندما يكون $m = 0$ والذي يعني $p_\ell(\omega)$ تحقق المعادلة التالية

$$\frac{d}{d\omega}\left[(1-\omega^2)\frac{dp_\ell}{d\omega}\right] + \ell(\ell+1)p_\ell = 0 \tag{19}$$

صفات دوال ليجندر

اولا $p_\ell(\omega)$ هي دوال حقيقية على شكل كثيرات حدود في ω ومن درجة ℓ وتماثل $(-1)^\ell$ ندرج بعض منها:

$$p_0(\omega)=1$$

$$p_1(\omega)=\omega$$

$$p_2(\omega)=\tfrac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_3(\omega)=\tfrac{1}{2}(5\omega^2-3\omega)$$

ثانيا الدوال $p_\ell^m(\omega)$ هي عبارة عن الكمية $(1-\omega)^{\frac{|m|}{2}}$ مضروبة في كثيرة حدود حقيقية من الدرجة $(\ell-|m|)$

ولها تماثل $(-1)^{\ell-|m|}$ وفي مايلي بعض من دوال ليجندر المترافقة

$$p_1^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \qquad \ell=1 \ ، \ m=\pm1$$

$$p_2^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot 3\omega \qquad \ell=2 \ ، \ m=\pm1$$

$$p_3^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot \tfrac{3}{5}(5\omega-1) \qquad \ell=3 \ ، \ m=\pm1$$

$$p_2^{\pm2}(\omega)=(1-\omega^2)\cdot 3 \qquad \ell=2 \ ، \ m=\pm2$$

$$p_3^{\pm2}(\omega)=(1-\omega^2)\cdot 15\omega \qquad \ell=3 \ ، \ m=\pm2$$

$$p_3^{\pm3}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{3}{2}}\cdot 15 \qquad \ell=3 \ ، \ m=\pm3$$

Example : Set up the following associated Legender function $p_2^1(\omega)$

Solution: $\ell = 2$ ، $m = 1$

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$ حيث ان

$$\ell = 2 \Rightarrow \quad p_2(\omega) = \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2}{d\omega^2}\left[(\omega^2-1)^2\right]$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega} \cdot \frac{d}{d\omega}(\omega^2-1)^2$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega} 2\cdot(\omega^2-1)\cdot 2\omega$$

$$= \frac{1}{2} \frac{d}{d\omega}(\omega^3-\omega)$$

$$= \frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_2^1(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{d\omega} \frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$= (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \cdot 3\omega$$

$$\therefore \quad p_2^1(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \cdot 3\omega$$ وهو المطلوب

ثالثا الدوال $p_\ell^m(\omega)$ هي دوال متعامدة مع بعضها التعض لقيم $-1 \le \omega \le +1$

$$\int_{-1}^{+1} p_\ell^m(\omega) p_{\ell'}^m(\omega) \; d\omega = 0$$

لكنها غير عياريه أي أن

$$\int_{-1}^{+1} \left|p_\ell^m(\omega)\right|^2 d\omega = \frac{2}{2\ell+1} \cdot \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}$$

وعند ضرب دوال ليجندر المترافقة $p_{\ell'}^m(\omega)$ بالعدد $\left[\frac{2}{2\ell+1} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$ تكون عندئذ دوال عيارية

Spherical Harmonics التوافقيات الكروية

Spherical Harmonics function is simply the product result of zenithal times azimuthal parts of the wave function i.e.

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = p_\ell^m \cdot \Phi_m(\phi)$$

تدعى حاصل ضرب الجزء السمتي بالجزء الزوالي من دالة الموجة بالتوافقيات الكروية اي عند مزج Θ ، Φ نحصل على:

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = N_\ell^m\, p_\ell^m(\cos\theta) \cdot e^{im\phi} \qquad (20)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots\cdots\cdots \quad ، \quad \ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots \vdots \quad , \quad \ell \geq |m|$$

حيث ان N_ℓ^m يدعى بثابت المعايرة لدالة التوافقيات الكروية ويعطى بالعلاقة التالية

$$N_\ell^m = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}}$$

ان دالة التوافقيات الكروية تكون مجموعة من الدوال الذاتية العيارية والمتعامدة كما ان الدالة Y_ℓ^m هي دالة ذاتية للمعادلة (8) بقيمة ذاتية قدرها $\lambda_\ell = \ell(\ell+1)$ والمسالة منحلة بدرجة انحلال مقدارها $(2\ell+1)$ وذلك لان لكل قيمة من ℓ هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m اي ان

$$m = -\ell\,,\ \ell+1, \cdots\cdots\cdots \ell-1\,,\ \ell$$

Example $\quad \ell = 1 \;\Rightarrow\; m = -1,0,1$

$\quad \ell = 2 \;\Rightarrow\; m = -2,-1,0,1,2$

ان تماثل دالة التوافقيات الكروية هو $(-1)^\ell$ لان تماثل الدالة $p_\ell^m(\cos\theta)$ الجزء السمتي هو $(-1)^{(\ell-|m|)}$ وتماثل الجزء الزوالي هو $(-1)^{|m|}$ لذا فان تماثل دالة التوافقيات الكروية يصبح $(-1)^\ell$ وادناه بعض الدالات التوافقيات الكروية لقيم مختلفة لـ ℓ ، m

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \pm\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \pm\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta\cos\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2\theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

<u>Example</u> : Set up the following Spherical Harmonics function Y_2^{+1}

<u>Solution:</u>

$$Y_2^{+1} \Rightarrow \quad \ell = 2 \quad ، \quad m = 1$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = N_\ell^m \, p_\ell^m(\cos\theta) \, e^{im\phi}$$

$$N_\ell^m = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= (-1)^{\frac{1}{2}\cdot 2} \cdot \left(\frac{5}{4\pi} \cdot \frac{1}{6}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left(\frac{5}{24\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} \, p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \, \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$= \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2}{d\omega^2}\left[(\omega^2-1)^2\right]$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega} \frac{d}{d\omega} (\omega^2-1)^2$$

$$= \frac{1}{8}\frac{d}{d\omega}2(\omega^2-1)\cdot 2\omega$$

$$= \frac{1}{2}\frac{d}{d\omega}(\omega^3-\omega)$$

$$= \frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_2^1(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\omega}\frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$= (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot 3\omega$$

$$= 3\cos\theta\sin\theta$$

$$\therefore \quad Y_2^1 = -\left(\frac{5}{24\pi}\right)^{\frac{1}{2}} 3\cos\theta\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta\sin\theta\, e^{i\phi}$$

بعد الحصول على الحل الرياضي الخاص بـ Θ ، Φ وجدنا ان الدالة Φ تحتوي على الثابت الوسيط m المحدد بالاعداد الصحيحة الموجبة والسالية اي ان

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots\cdots\cdots$ (العدد الكمي المغناطيسي)

بينما الدالة Θ تحتوي على ثابت وسيط آخر ℓ محدد باعداد صحيحة موجبة اكبر او تساوي $|m|$

$\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots$ $\quad \ell \geq |m|$ العدد الكمي للزخم الزاوي (المداري)

ثالثا الجزء القطري

من المعادلة (7) وبعد التعويض عن $\lambda=\ell(\ell+1)$ تتحول الى

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}(E-V(r))=\ell(\ell+1)R$$

وبالقسمة على r^2 والترتيب نحصل على

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R=0 \qquad (21)$$

تسمى المعادلة (21) بمادلة شرودنكر القطرية ولاجل ايجاد الجزء القطري لدالة الموجة R يجب معرفة الطاقة الكاملة $V(r)$ وفي هذا الفصل سندرس ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة لها متناولين في دراستنا الجهد المتبادل بين الالكترون والنواة

ذرة الهيدروجين والذراة الشبيهة لها — The Hydrogen and Hydrogen Like Atom

من المعروف ان الذرة الشبيهة بذرة الهيدروجين تتكون من نواة شحنتها Ze ويدور حولها الكترون واحد في مدارها الخارجي ، وعلية ان الطاقة الكامنة للنظام

$$V(r)=\frac{-Ze}{4\pi\varepsilon_\circ r} \qquad \Rightarrow \qquad V(r)=\frac{-k}{r} \quad ، \quad k=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ}$$

وبالتعويض عن $V(r)=\frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ r}$ بالمعادلة (21) نحصل على

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E+\frac{k}{r})-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R=0$$

وبضرب المعادلة الاخيرة بالكمية $\frac{-\hbar^2}{8mE}$

$$\frac{-\hbar^2}{8mEr^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(\frac{-\hbar^2}{8mE})(E+\frac{k}{r})+\frac{\hbar^2}{8mE}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R=0$$

$$\frac{-\hbar^2}{8mEr^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})-\frac{kR}{4Er}+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{8mEr^2}R-\frac{R}{4}=0 \qquad (22)$$

نفرض ان

$$\begin{aligned} \alpha^2 &= \frac{-8mE}{\hbar^2} \\ n &= \frac{-\alpha\, k}{4E} \end{aligned} \tag{23}$$

وبالتعويض بالمعادلة (22) ينتج

$$\frac{1}{\alpha^2 r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) - \frac{n}{\alpha}\,\frac{R}{r} + \frac{\ell(\ell+1)}{\alpha^2 r^2}\,R - \frac{R}{4} = 0$$

نبدل المتغير المستقل بـ ρ من خلال العلاقة

$$\rho = \alpha\, r$$

$$\therefore\ \frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr}\cdot\frac{d}{d\rho}$$

$$\frac{d}{dr} = \alpha\,\frac{d}{d\rho}$$

$$\frac{1}{\rho^2}(2\rho\,\frac{dR}{d\rho} + \rho^2\,\frac{d^2R}{d\rho^2}) + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right]R = 0$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\,\frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right]R = 0 \tag{24}$$

لقيم كبيرة لـ ρ المعادلة (24) تختصر الى

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} - \frac{R}{4} = 0$$

لحل المعادلة اعلاه نفرض الحل بالصيغة هو

$$R(\rho) = e^{c\rho}$$

لايجاد قيمة الثابت c نعوض الحل في المعادلة وكما يلي:

$$c^2 e^{c\rho} - \frac{e^{c\rho}}{4} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad (c^2 - \frac{1}{4}) e^{c\rho} = 0$$

$$e^{c\rho} \neq 0 \qquad \Rightarrow \qquad c^2 - \frac{1}{4} = 0$$

$$\therefore \quad c = \pm \frac{1}{2}$$

الحل بصيغة الاس الموجب غير مقبول فيزياويا وذلك لانه يقترب من المالانهاية عندما تقترب ρ من المالانهاية

وياخذ الحل السالب لانه يحقق الشرط الحدودي.

$$\therefore \quad R(\rho) = e^{-\rho/2} \qquad (25)$$

للحصول على الحل المضبوط للمعادلة 24 فاننا نضرب المعادلة 25 بدالة الى ρ مثل $F(\rho)$ وكما يلي

$$R(\rho) = F(\rho)\, e^{-\rho/2} \qquad (26)$$

ونفرض ان

$$F(\rho) = \rho^s L(\rho) \qquad (27)$$

حيث ان s هو عدد موجب وان $L(\rho)$ هي متسلسلة لانهائية بالصيغة

$$L(\rho) = a_\circ + a_1\rho + a_2\rho + \cdots\cdots\cdots\cdots = \sum_{\upsilon=0}^{\infty} \rho^{\upsilon}$$

وان $a_\circ \neq 0$

بتعويض المعادلة 25 في المعادلة 24 نحصل على

$$R'(\rho) = -\frac{1}{2} e^{-\rho/2} F(\rho) + e^{-\rho/2} F'(\rho)$$

$$R''(\rho) = \frac{1}{4} e^{-\rho/2} F(\rho) + (-\frac{1}{2} e^{-\rho/2} F'(\rho)) + \{-\frac{1}{2} e^{-\rho/2} F'(\rho) + e^{-\rho/2} F''(\rho)\}$$

$$R''(\rho) = (F''(\rho) - F'(\rho) + \frac{1}{4} F(\rho)) e^{-\rho/2}$$

وبالتعويض عن $R(\rho)$ ، $R'(\rho)$ ، $R''(\rho)$

$$\{F''(\rho)-F'(\rho)+\frac{1}{4}F(\rho)\}e^{-\rho/2}+\frac{2}{\rho}\{F'(\rho)-\frac{1}{2}F(\rho)\}e^{-\rho/2}$$

$$+\{\frac{n}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}\}F(\rho)e^{-\rho/2}$$

وبالقسمة على $e^{-\rho/2}$ والتبسيط نحصل

$$F''(\rho)+(\frac{2}{\rho}-1)F'(\rho)+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2})F(\rho)=0 \qquad (28)$$

وبتعويض المعادلة 27 في المعادلة 28 نحصل على

$$F'(\rho)=s\rho^{s-1}L(\rho)+\rho^s L'(\rho)$$

$$F''(\rho)=s(s-1)\rho^{s-2}\cdot L(\rho)+s\rho^{s-1}L'(\rho)+s\rho^{s-1}L'(\rho)+\rho^s L''(\rho)$$

$$=\rho^s L''(\rho)+2s\rho^{s-1}L'(\rho)+s(s-1)\rho^{s-2}L(\rho)$$

بتعويض $F(\rho)$ ، $F'(\rho)$ ، $F''(\rho)$ نحصل على

$$=\rho^s L''(\rho)+2s\rho^{s-1}L'(\rho)+s(s-1)\rho^{s-2}L(\rho)$$

$$+(\frac{2}{\rho}-1)[\rho^s L'(\rho)+s\rho^{s-1}L(\rho)]+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell-1)}{\rho^2})\rho^s L(\rho)=0$$

وبضرب العلاقة الاخيرة بـ $\frac{\rho^2}{\rho^s}$

$$\rho^2 L''(\rho)+2s\rho^s L'(\rho)+s(s-1)L(\rho)+(\frac{2}{\rho}-1)[\rho^s L'(\rho)+s\rho^s L(\rho)]$$

$$+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell-1)}{\rho^2})\rho^2 L(\rho)=0$$

والعلاقة الاخيرة يمكن كتابتها بالشكل التالي

$$\rho^2 L''(\rho)+[2s\rho+(2\rho-\rho^2)]L'(\rho)+[s(s-1)+s(\frac{2}{\rho}-1)\rho]L(\rho)$$

$$+(\rho(n-1)-\ell(\ell-1))L(\rho)=0$$

$$\therefore\ \rho^2 L''(\rho)+\rho\,[(2s+1)-\rho]L'(\rho)+[s(s-1)+\rho(n-s-1)-\ell(\ell-1)]\,L(\rho)=0 \qquad (29)$$

وبما ان $L(0)\neq 0$ والمعادلة 29 يجب ان تكون صحيحة لكل قيم ρ ، لذلك لقيمة $\rho=0$ نحصل على

$$s(s-1)=\ell(\ell-1)$$

وبحل هذه المعادلة للمتغير s

$$s^2+s-\ell(\ell+1)+s\ell-s\ell=0$$

$$s^2+s(\ell+1)-s\ell-\ell(\ell+1)=0$$

$$s[s+(\ell+1)]-\ell[s+(\ell+1)]$$

$$[s+(\ell+1)](s-\ell)=0$$

$$s=\ell \qquad \text{or} \qquad s=-(\ell+1)$$

وبما ان $\ell\geq 0$ فان الحل $s=-(\ell+1)$ يجب ان يهمل لانه يجعل المعادلة $R(\rho)$ لانهاية عند $\rho=0$ لذلك فان المعادلة 29 تصبح

$$\rho L''(\rho)+[(2\ell+1)-\rho]L'(\rho)+(n-\ell-1)L(\rho)=0 \qquad (30)$$

واذا عوضنا عن $L(\rho)=\sum_{\upsilon=0}^{\infty}a_\upsilon\rho^\upsilon$ في المعادلة 30 نحصل :

$$L'(\rho)=\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}$$

$$L''(\rho)=\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-2}$$

$$\therefore\quad \sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=0}^{\infty}a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}=0$$

$$\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}$$

$$+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_\circ=0$$

لنفرض ان $\upsilon=m+1$ ونعوض عن ذلك في الحد الاول والحد الثالث من العلاقة الاخيرة فنحصل على

$$\sum_{m=1}^{\infty}(m+1)m\;a_{m+1}\,\rho^{m}-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\sum_{m=1}^{\infty}(m+1)\;a_{m+1}\,\rho^{m}$$

$$+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}a_{\upsilon}\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_{\circ}=0$$

بابدال الرمز m في الحد الاول والحد الثالث بالرمز υ

$$\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\{\upsilon(\upsilon-1)\,a_{\upsilon+1}-\upsilon\,a_{\upsilon}+2(\ell+1)(\upsilon+1)\,a_{\upsilon+1}+(n-\ell-1)\,a_{\upsilon}\}\rho^{\upsilon}$$

$$+2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_{\circ}=0$$

لاجل ان تحقق هذه العلاقة يجب ان يكون

$$2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_{\circ}=0$$

$$a_{\upsilon+1}\,(\upsilon+1)\,(\upsilon+2(\ell+1))-a_{\upsilon}\,(\upsilon-n+\ell+1)=0$$

ومن ذلك نحصل

$$a_1=\frac{-(n-\ell-1)}{2(\ell+1)}\,a_{\circ}$$

$$\frac{a_{\upsilon+1}}{a_{\upsilon}}=\frac{\upsilon-n+\ell+1}{(\upsilon+1)(\upsilon+2\ell+2)}$$

ولقيم كبيرة لـ υ نجد ان

$$\frac{a_{\upsilon+1}}{a_{\upsilon}}=\frac{1}{\upsilon}$$

لذلك فان

$$L(\rho)\approx e^{\rho}$$

وعليه فان الدالة القطرية

$$R(\rho)=e^{\rho}\cdot e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$\approx e^{\frac{\rho}{2}}$$

وهذا غير مسموح لان $R(\rho)$ تزداد اسيا مع ρ وعندما $\rho\to\infty$ فانها تتباعد ولم تعد صالحة كحل ولتحقيق المحدودية فان يجب ان تقطع اي بعبارة اخرى ان تكون الدالة $F(\rho)$ كثيرة حدود بدلا من متسلسلة لانهائية وذلك يمكن عن طريق اختيار n عدد صحيح موجب بحيث ان

$$\upsilon = n - \ell - 1$$

او ان نقول

$$n = \upsilon + \ell + 1$$

وهذا الاجراء يجعل $a_{\upsilon+1}$ (او $a_{n-\ell}$) وكل المعاملات اللاحقة صفر

بما ان اقل قيمة لـ υ هي الصفر فهذا يعني

$$n \geq \ell + 1$$

او ان

$$n > \ell$$

ومن المعروف مسبقا ان $\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \geq |m|$ لذلك فان

$$n = 1,2,3,\cdots\cdots\cdots\cdots > \ell$$

اذن الحالة $n > \ell$ فانه يوجد حل للدالة القطرية بالصيغة

$$R_{n\ell}(\rho) = \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, L_{n\ell} \qquad (31)$$

الدالة $L_{n\ell}(\rho)$ هي كثيرة الحدود ذا الدرجة $(n-\ell-1)$ لذا فان الدالة القطرية $R(\rho)$ هي عبارة عن المقدار $e^{-\frac{\rho}{2}}$ مضروبة في كثيرة حدود من الدرجة $(n-1)$

في الرياضيات الدالة $L_q^p(\rho)$ التي تحقق المعادلة التالية

$$\rho \frac{d^2 L_q^p}{d\rho^2} + (p+1-\rho)\frac{dL_q^p}{d\rho}(q-p)L_q^p = 0 \qquad (*)$$

تسمى بمتسلسلة لاكور المترافقة (Associated Laguerre Polynomials)

التي يعبر عنها رياضيا

$$L_p^q(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho)$$

حيث ان $L_q(\rho)$ تعرف بمتسلسلة لاكور (Laguerre polynomials)

$$L_q(\rho) = e^{\rho}\frac{d^q}{d\rho^q}(e^{-\rho}\rho^q)$$

بمقارنة المعادلة 30 مع المعادلة التفاضلية (*) نجد ان

$L_{n\ell}(\rho) = L_q^p(\rho) = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \qquad q = n + \ell \ ، \ p = 2\ell + 1$ حيث

اذن المعادلة القطرية بصيغتها النهائية هي :

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\ \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1} \tag{32}$$

حيث $N_{n\ell}$ هو ثابت المعايرة ويعطى بالعلاقة

$$N_{n\ell} = -\left[\alpha^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\cdot[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \cdot \frac{(n-\ell-1)!}{2n\cdot[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{33}$$

$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \dfrac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \cdot L_{n+\ell}$ Associated Laguerre Polynomials متسلسلة لاكور المترافقة

$L_{n+\ell} = e^{\rho} \cdot \dfrac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho} \cdot \rho^{n+\ell})$ (Laguerre polynomials) متسلسلة لاكور

حيث ان $\alpha = \dfrac{2z}{na_\circ}$ ، $a_\circ$ نصف قطر مدار بور الاول ، $\rho = \alpha\, r = \dfrac{2z}{na_\circ} r$

وندرج ادناه بعض الامثلة على الجزء القطري

$$R_{10}(\rho) = 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{20}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{21}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} \rho\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{30}(\rho) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (6 - 6\rho + \rho^2)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

Example: Work out the radial wave function R_{10} , R_{20}

Solution:

اولا

$$R_{10} \Rightarrow n=1 \; , \; \ell=0$$

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\; \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{10} = -\left[\left(\frac{2z}{1\cdot a_\circ}\right)^3 \frac{(1-0-1)!}{2\,1[(1+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{a_\circ}\right)^3 \frac{1}{2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \cdot L_{n+\ell}$$

$$L_{n+\ell} = e^{\rho}\; \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho}\; \rho^{n+\ell})$$

$$\therefore \quad L_1 = e^{\rho}\, \frac{d}{d\rho}(e^{-\rho}\,\rho)$$

$$= e^{\rho}\; (e^{-\rho} - \rho\, e^{-\rho})$$
$$= 1-\rho$$
$$L_1^1(\rho) = \frac{d}{d\rho} L_1 = \frac{d}{d\rho}(1-\rho)$$

$$= -1$$

$$\therefore \quad R_{10}(\rho) = -2 \cdot \left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot (-1)$$

$$= 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

ثانيا R_{20}

$$\Rightarrow \quad n = 2 \quad , \quad \ell = 0$$

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell} \; \rho^{\ell} \, e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{20} = -\left[\left(\frac{2z}{2\cdot a_\circ}\right)^3 \frac{(2-0-1)!}{2\cdot 2\,[(2+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left[\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^3 \frac{1}{4\cdot 8}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{\,2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \, L_{n+\ell}(\rho)$$

$$L_{n+\ell}(\rho) = e^{\rho} \; \frac{d^{\,n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}} \, (e^{-\rho} \quad \rho^{n+\ell})$$

$$\therefore \quad L_2(\rho) = e^{\rho} \; \frac{d^{\,2}}{d\rho^{2}} \, (e^{-\rho} \;\; \rho^{2})$$

$$= e^{\rho} \; \frac{d}{d\rho} \frac{d}{d\rho}(e^{-\rho} \;\; \rho^{2})$$

$$= e^{\rho} \; \frac{d}{d\rho} \, (2\rho \, e^{-\rho} - \rho^2 \, e^{-\rho})$$

$$= e^{\rho}\,(-2\rho\, e^{-\rho} + 2e^{-\rho} + \rho^2\, e^{-\rho} - 2\rho\, e^{-\rho})$$

$$\therefore \quad L_2 = \rho^2 - 4\rho + 2$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{\,2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}}\, L_{n+\ell}$$

$$\therefore \quad L_2^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\, L_2$$

$$L_2^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\,(\rho^2 - 4\rho + 2)$$

$$= 2\rho - 4$$

$$L_2^1(\rho) = -2(2-\rho)$$

$$\therefore \quad R_{20}(\rho) = -\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\,[-2(2-\rho)]$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$ وهو المطلوب

وللحصول على الدالات الموجية للذرات الاحادية الالكترون او الذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين نمزج حلول $R_{n\ell}(r)$ من المعادلة (32) وحلول $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ من المعادلة (20) في المعادلة 3 نجد ان

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}\; Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, L_{n+\ell}^{2\ell+1}\quad Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

او

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2z}{na_\circ}\, r\right)^\ell e^{-\frac{zr}{na_\circ}}\, L_{n+\ell}^{2\ell+1}\quad Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\;\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}$$

$$p_\ell^m(\cos\theta) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell} \left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} L_{n+\ell}(\rho)$$

$$L_{n+\ell} = e^\rho \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}} (e^{-\rho} \rho^{n+\ell})$$

وندرج ادناه بعض الامثلة على الذرات الشبيهة لذرة الهيدروجين لبعض قيم لـ n

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (2 - \frac{zr}{a_\circ}) e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (\frac{zr}{a_\circ}) e^{-\frac{zr}{2a_\circ}} \cos\theta$$

مثال: اوجد دالة الموجة للحالة الارضية لذرة الهيدروجين

<u>الحل</u> ايجاد ψ_{100} اي ان $n=1$ ، $\ell=0$ ، $m=0$

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell} Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$R_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{1\cdot a_\circ}\right)^3 \frac{(1-0-1)!}{2\cdot 1[(1+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^0 e^{-\frac{\rho}{2}} L_{1+0}^{2\cdot 0+1}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} L_{n+\ell}$$

$$L_{n+\ell} = e^{\rho}\ \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho}\ \ \rho^{n+\ell}) \qquad\qquad n=1\ \ ,\ \ \ell=0$$

$$L_1 = e^{\rho}\ \frac{d}{d\rho}(e^{-\rho}\ \ \rho) = e^{\rho}\ \ (e^{-\rho} - \rho\ \ e^{-\rho})$$

$$= 1-\rho$$

$$L_1^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\ L_1$$

$$= \frac{d}{d\rho}(1-\rho) = -1$$

$$R_{10}(\rho) = -2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\ (-1)$$

$$= 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$= 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}}\ e^{-\frac{z\,r}{a_\circ}}$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\ \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}\ P_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

$$p_\ell^m(\cos\theta) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}}\ \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}}\ p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell\,\ell!}\ \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$\therefore\quad p_0(\omega) = \frac{1}{2^0 0!}\frac{d^0}{d\omega^0}\left[(\omega^2-1)^0\right]$$

$$=1$$

$\because\quad p_\ell^0 = p_\ell = 1$ **لاحظ معادلة رقم 18**

$$\therefore\quad Y_0^0 = (-1)^{\frac{0}{2}}\left[\frac{2\cdot 0+1}{4\pi}\cdot\frac{0!}{0!}\right]^{\frac{1}{2}}\ \cdot 1\cdot 1$$

$$=\left[\frac{1}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore\ \psi_{100}=2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

وبما ان $z=1$ لذرة الهيدروجين

$$=\frac{a^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{r}{a_\circ}}$$ وهو المطلوب

Energy eigen value

من المعادلة 23 نجد ان

$$\alpha^2=\frac{-8mE}{\hbar^2} \quad ، \quad n=\frac{-\alpha k}{4E}$$

$$\therefore\ \alpha=\frac{-4En}{k} \quad\Rightarrow\quad \alpha^2=\frac{16E^2n^2}{k^2}$$

$$\therefore\ \frac{16E^2n^2}{k^2}=\frac{-8mE}{\hbar^2}$$

$$\therefore\ E=\frac{-mk^2}{2\cdot\hbar^2n^2}$$

وبالتعويض عن قيمة $k=\frac{ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ}$ ، $k^2=\frac{z^2e^4}{16\cdot\pi^2\varepsilon_\circ^2}$

$$\therefore\ E_n=-\frac{me^4z^2}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} \qquad (34)$$

المعادلة (34) هي نفس المعادلة التي سبق ان حصل عليها بور عندما افترض ان الزخم الزاوي للالكترون في مداره حول النواة هو عبارة عن عدد صحيح مضروب في $\hbar$. والمعادلة (34) تبين ان الطاقة E تعتمد على العدد الكمي الاساسي n ولا تعتمد على العدد الكمي ℓ ، m لذلك تكتب E عادة بالشكل E_n بدلالة n فقط. واوطا طاقة تقابل الحالة $(n=1)$ أي أن

$$E_1=-\frac{me^4z^2}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}$$

وهو طاقة المستوى الارضي.

تعلمنا ان لكل قيمة لـ n هنالك n من القيم الممكنة لـ ℓ فمثلا عندما تكون $n=3$ فان $\ell=0,1,2$ كذلك فان لكل قيمة لـ ℓ هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m فمثلا $m=-1,0,+1$ عندما تكون $\ell=1$ لذا يكون مستوى الطاقة لذرة الهيدروجين منحل بدرجة انحلال تساوي $g(n)=\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1}(2\ell+1)$ والتي تساوي n^2

Prove that $\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1}(2\ell+1)=n^2$ **واجب بيتي**

Angular momentum **الزخم الزاوي**

وفقا للميكانيك الكلاسيكي فان الزخم الزاوي لجسم حول نقطة الاصل يعطى بالعلاقة التالية

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$$

حيث $\vec{r}$ هو متجه الموضع ، $\vec{p}$ الزخم الخطي للجسيم. واذا كان الجسيم تحت تاثير طاقة كامنة متناظرة كرويا $V(r)$ فان الزخم الزاوي ثابت اي ان $\frac{d\vec{L}}{dt}=0$ والان ماهي صفات الزخم الزاوي لهذا الجسيم في الميكانيك الكمي ؟

الصفة الكمية لمؤثر الزخم الخطي هي

$$p=-i\hbar\nabla$$

$$\therefore \quad \hat{L}=\hat{r}\times(-i\hbar)\nabla$$

وعليه فان

$$\hat{L}=-i\hbar\begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z}\end{vmatrix}$$

وهذا يعني ان مركبات مؤثر الزخم الزاوي تاخذ الصيغ الاتية

$$\hat{L}_x=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$\hat{L}_y=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})$$

$$\hat{L}_z=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

ان انسب نوع من الاحداثيات لدراسة الزخم الزاوي بشكل خاص والحركة تحت تاثير القوة المركزية بشكل عام هي الاحداثيات القطبية الكروية.

باستخدام معادلات التحويل من الاحداثيات الكارتيزية الى الاحداثيات الكروية.

$$\left.\begin{aligned} x &= r\ \sin\theta\cos\phi \\ y &= r\ \sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}\right\}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}=\sin\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\ \cos\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+(-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\sin\theta\ \sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\ \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\ \frac{\partial}{\partial r}+(-\frac{1}{r})\ \sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}$$

ويمكن ايجاد مركبات الزخم الزاوي بالاحداثيات الكروية اذا ناخذ كل مركبة بصيفتها في الاحداثيات الكارتيزية ثم نجري التعويضات الازمة كما يلي

<u>اولا</u> $\hat{L}_x$

$$\hat{L}_x=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$=-i\hbar[\{r\sin\theta\sin\phi(\cos\theta\ \frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\ \frac{\partial}{\partial\theta})\}-$$

$$\{r\cos\theta(\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})\}]$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar[r\sin\theta\sin\phi\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}-\sin\phi\sin^2\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$-r\cos\theta\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}-\cos^2\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}]$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar(\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi})$$

ثانيا L_y

$$\hat{L}_y=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})$$

$$=-i\hbar[\{r\cos\theta(\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta})\}$$

$$-\{r\sin\theta\cos\phi(\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\,\frac{\partial}{\partial\theta})\}$$

$$=-i\hbar[r\cos\theta\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\cos^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$-r\sin\theta\cos\phi\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}+\sin^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}_y=i\hbar(\cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}-\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta})$$

ثالثا L_z

$$\hat{L}_z=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

$$=-i\hbar[\{r\sin\theta\cos\phi\,(\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$+\frac{1}{r}\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})-\{r\sin\theta\sin\phi\,(\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}$$

$$+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})\}]$$

$$= -i\hbar[\{r\sin^2\theta\cos\phi\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r} + \sin\theta\cos\phi\cos\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos^2\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$- r\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial r} - \cos\theta\cos\phi\sin\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \sin^2\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$\therefore$

$$\hat{L}_x = -i\hbar(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}) \qquad (35)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

ننتقل الان الى ايجاد $\hat{L}^2$ مربع الزخم الزاوي الكلي

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \qquad (36)$$

وبالتعويض عن قيم $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ من المعادلة 35 في المعادلة 36 ينتج

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2[(\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi})\ (\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$+ (\cot\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta})\ (\cot\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\ \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\ \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] \qquad (37)$$

لنعود الان الى دالة الموجة $\psi(r,\theta,\phi)$ التي تم ايجادها وهي

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}\ Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$= R_{n\ell}\ N_\ell^m\ p_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

ولنؤثر عليها بالمؤثر $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$

$$\hat{L}_z \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} [R_{n\ell} N_\ell^m p_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi}]$$

$$= -i\hbar R_{n\ell} N_\ell^m p_\ell^m(\cos\theta) \frac{d}{d\phi} e^{im\phi}$$

$$(-i\hbar)(im)[R_{n\ell} N_\ell^m p_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi}]$$

$$\hat{L}_z \psi = m\hbar \psi \qquad (38)$$

اي ان الدالة ψ هي قيمة ذاتية للمؤثر $\hat{L}_z$ وبقيمة ذاتية تساوي $m\hbar$. وبعبارة اخرى ان مركبة الزخم الزاوي في اتجاه z لجهد مركزي هي ثابت الحركة بقيمة تساوي $m\hbar$

ولنؤثر الان بـ $\hat{L}^2$ (مربع الزخم الزاوي) على دالة الموجة

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell} Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$\hat{L}^2 \psi_{n\ell m} = -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] \psi_{n\ell m}$$

$$= -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] R_{n\ell} Y_\ell^m$$

$$= -\hbar^2 R_{n\ell} [\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}]$$

وتبعا للمعادلة 8 فان الكمية داخل القوسين الكبيرين في هذه النتيجة تساوي $-\lambda Y$ اذن

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 R_{n\ell}(-\lambda Y)$$

$$= \lambda \hbar^2 R_{n\ell} Y$$

$$= \lambda \hbar^2 \psi$$

وبالتعويض عن λ باكمية $\ell(\ell+1)$ يكون

$$\hat{L}^2\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)=\ell(\ell+1)\hbar^2\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) \tag{39}$$

من المعادلة 39 ان الدالة $\psi_{n\ell m}$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{L}^2$ وبقيمة ذاتية تساوي $\ell(\ell+1)\hbar^2$ لذا فان الزخم الزاوي لجسيم في جهد مركزي هو ثابت قيمة $\ell(\ell+1)\hbar^2$. او ان الزخم الزاوي للجسيم له قيمة مضبوطة تساوي $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ وله مركبة في الاتجاه z بقيمة مضبوطة ايضا تساوي $m\hbar$

مقارنة مع النظرية الكلاسيكية Comparison with classical theory

حركة جسيم مركزي الجهد في النظرية الكلاسيكية تبين ثبوت مربع الزخم الزاوي وكذلك مركباته في الاتجاهات الثلاثة اما في النظرية الكمية وجدنا $\hat{L}^2$، $\hat{L}_z$ ثابتتان بينما لم يكن $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ قيمتين معرفتين او ثابتتن لان الدالة ψ ليس بدالة ذاتية لاي من مؤثريها. اضافة الى ذلك فان اهم اسس النظرية الكمية هو مبدا اللادقة هذا المبدا اذا طبق على مركبات الزخم الزاوي سيكون بالشكل

$$\Delta\hat{L}_x\cdot\Delta\hat{L}_y\approx m\hbar$$

على فرض ان $\hat{L}_z$ثابت اي ان $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ في هذه الحالة لايمكن ان يثبتا انيا لان ذلك سيعني ان $\Delta\hat{L}_x=\Delta\hat{L}_y=0$. اما النظرية الكلاسيكية فانها تتغاضى عن الكمية $m\hbar$ الضئيلة المقدار جدا وعندها يصبح بالفعل $\Delta\hat{L}_x$ ، $\Delta\hat{L}_y$ مساوي الى الصفر وهو مايقابل ثبوت كل منهما.

س 1) اذا علمت ان الدالة الموجية لذرة الهيدروجين هي $\psi = \frac{a^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{r}{a_\circ}}$

أ- اوجد $< \frac{1}{r} >$

ب- $< r >$ ، $< r^2 >$ واجب بيتي

<u>الجواب</u>

$$< \frac{1}{r} >= \int \psi^* \frac{1}{r} \psi \; d\tau$$

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

وبعد التعويض عن دالة الموجة ψ وترتيب الحدود نحصل

$$< \frac{1}{r} >= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{a_\circ^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-r}{a_\circ}} \; \frac{1}{r} \frac{a_\circ^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-r}{a_\circ}} \; r^2 \sin\theta \; dr \; d\theta \; d\phi$$

$$= \frac{a_\circ^{-3}}{\pi} \int_0^\infty e^{\frac{-2r}{a_\circ}} \; r \; dr \int_0^\pi \sin\theta \; d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= \frac{a_\circ^{-3}}{\pi} 4\pi \int_0^\infty e^{\frac{-2r}{a_\circ}} \; r \; dr$$

وباستخدام التكامل $\int_0^\infty x^n \; e^{-ax} \; dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$

$$\frac{a_\circ^{-3}}{\pi} 4\pi \; \frac{1}{(\frac{2}{a_\circ})^2} = \frac{1}{a_\circ}$$

س 2) اذا كانت دالة الموجة لاحد المستويات لذرة الهيدروجين هي

$$\psi(r,\theta,\phi) = A\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\; r^2 \sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$$

1. استخدم $\hat{L}^2$ (مربع الزخم الزاوي) ، $\hat{L}_z$ (مركبة الزخم الزاوي في اتجاه z) اوجد قيم ℓ ، m ؟
2. باستخدام معادلة شرودنكر اوجد الطاقة E ؟

__الجواب__

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]$$

وبما ان مربع الزخم الزاوي هو دالة لـ θ ، ϕ لذا فان المتغير r يعتبر ثابت لذا نفرض ان

$$\psi(r,\theta,\phi) = C\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

حيث ان $C = A\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\, r^2$

نؤثر المؤثر $\hat{L}^2$ على دالة الموجة ψ

$$\hat{L}^2\,\psi = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]\psi$$

$$= -\hbar^2 C\,[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}]$$

$$= -\hbar^2 C\,[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta(\cos^2\theta\, e^{i\phi} - \sin^2\theta\, e^{i\phi}) + \frac{\sin\theta\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\, e^{i\phi}]$$

وحيث ان $\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\, e^{i\phi} = -e^{i\phi}$

$$= -\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\,(1-\sin^2\theta)\, e^{i\phi}) - \sin^2\theta\, e^{i\phi} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

حيث عوضنا عن $\cos^2\theta = 1 - \sin^2\theta$

$$=-\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\, e^{i\phi}-2\sin^3\theta)\, e^{i\phi})-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}(\cos\theta\, e^{i\phi}-6\sin^2\theta\cos\theta\;\, e^{i\phi})-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}-6\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[-6\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}]$$

$$=6\hbar^2 C\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$=6\hbar^2\psi$$

وبما ان

$$\hat{L}^2\psi=\hbar^2\ell(\ell+1)\psi$$

$$6\hbar^2\psi=\hbar^2\ell(\ell+1)\psi$$

$$6=\ell(\ell+1)\quad\Rightarrow\quad\ell=2$$

وبتاثير المؤثر $\hat{L}_z$ على دالة الموجة ψ

$$\hat{L}_z\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi}$$

$$=-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\phi}\,A\,r^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$=-i\hbar\, Ar^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi}\, e^{i\phi}$$

$$=-i\hbar\, Ar^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}(i)$$

$$=\hbar\psi$$

وبما ان

$$\hat{L}_z \psi = m\hbar\psi$$

$$\therefore \quad \hbar\psi = m\hbar\psi \quad \Rightarrow \quad m = 1$$

ب. بما ان الطاقة تظهر فقط بمعادلة شرودنكر القطرية اذن نستخدم

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \{\frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{k}{r}) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\}R = 0$$

نفرض ان $\psi = R = \beta' r^2 e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$ حيث ان $\beta' = \sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$

$$\frac{dR}{dr} = 2r\beta' e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{\beta' r^2}{3a_\circ} e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$r^2\frac{dR}{dr} = 2r^3\beta' e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{\beta' r^4}{3a_\circ} e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) = 6r^2\beta' e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{2r^3}{3a_\circ}\beta' e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{4}{3}\frac{\beta' r^3}{a_\circ} e^{-\frac{r}{3a_\circ}} + \frac{\beta' r^4}{3a_\circ} e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$= 6R - \frac{2}{3}\frac{r}{a_\circ}R - \frac{4r}{3a_\circ}R + \frac{r^2}{9a_\circ^2}R$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) = \frac{6R}{r^2} - \frac{2}{r a_\circ}R + \frac{1}{9a_\circ^2}R$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{2mER}{\hbar^2} + \frac{2mk}{\hbar^2 r} - \frac{6}{r^2}R = 0$$

$$\frac{6R}{r^2} - \frac{2R}{a_\circ r} + \frac{R}{9a_\circ^2} + \frac{2mER}{\hbar^2} + \frac{2mk}{\hbar^2 r} - \frac{6R}{r^2} = 0$$

$$\frac{-2}{a_\circ} + \frac{2mk}{\hbar^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{a_\circ} = \frac{mk}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad a_\circ = \frac{\hbar^2}{mk}$$

$$\frac{1}{9a_\circ^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0 \qquad E = \frac{-\hbar^2}{18a_\circ^2 m} = \frac{-\hbar^2}{18\cdot\frac{\hbar^4}{m^2k^2}\cdot m}$$

$$= -\frac{m e^4}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}\frac{1}{9}$$

حيث $k = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_\circ}$

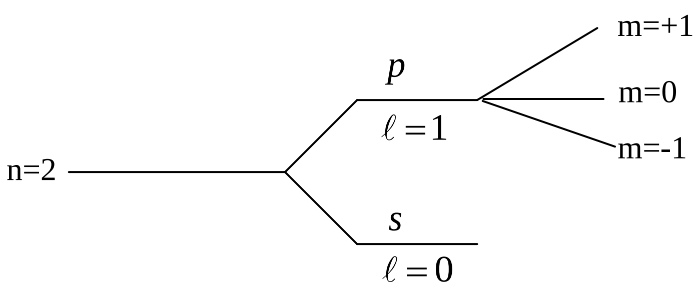
سبق ان بينا ان دالة الموجة ψ هي دالة ذاتية لمربع الزخم الزاوي وبقيمة ذاتية $\ell(\ell+1)\hbar^2$ لذلك فان الزخم الزاوي لجسيم يتحرك في جهد مركزي هو ثابت حركة قيمة هذا الزخم يمكن ان يحدد بدقة وهي تتخذ القيم $\ell=n-1 \Rightarrow \ell=0$ ولذلك (في مجال كولوم لاي قيمة n تحدد مستوى الطاقة هنالك n من القيم المميزة للزخم الزاوي المداري. وكذلك بينا ان دالة الموجة ψ هي دالة ذاتية للمركبة z للزخم الزاوي وبقيمة ذاتية $m\hbar$ وهذا يعني ان اي جسيم يتحرك في نظام جهده مركزي فان المركبة z هي ثابت حركة وقيمتها $m\hbar$. ان قيم m تحدد

$$m=-\ell,-\ell+1,-\ell+2,\cdots\cdots\cdots\cdots 0,\cdots\cdots\cdots\cdots \ell$$

ان الحالات التي تتميز بعدد كمي مداري $\ell=0$ وعدد كمي مغناطيسي $m=0$ تسمى بحالات s اما الحالة p فهي تتميز بالعدد الكمي المداري $\ell=1$ وبذلك ياخذ العدد الكمي المغناطيسي (هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m) القيم $m=-1,0,1$ ولهذا توجد ثلاث دوال منحلة وعموما يرمز للحالات ℓ بالرموز الطيفية الاتية

i	.	2	3	4
s	p	d	f	g

لناخذ مثال عندما $n=2$



نلاحظ ان دوال الموجة هي ψ_{200} ، ψ_{21+1} ، ψ_{210} ، ψ_{21-1} اذن عدد الانحلال هو 4

ان قيمة m لايمكن ان تتعدى قيمة ℓ وهذا مطابق لواقع الحال اذ ان مركبة الزخم الزاوي $\hat{L}_z$ لايمكن ان تساوي تماما قيمة الزخم الزاوي الكلي لان:

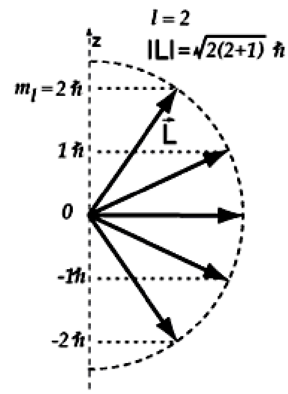
$$\hat{L}=\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$$

$$(\hat{L}_z)_{\max}=\ell\hbar$$

ان المعادلتين الاخيرتين هما صيغة اخرى لمبدا الدقة فيما ان $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ لاتحقق خاصية التبادل فيما بينهما فمعنى ذلك اننا لانستطيع قياس هذه الكميات بدقة تامة في ان واحد

H.w **Show that** 1) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ 2) $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$

3) $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$



الشكل يبين تكميم الزخم الزاوي (الزخم الزاوي الكلي) ياخذ اتجاهات معينة فقط التي تلك التي تكون فيها مساقط على محور z اي المركبة $\hat{L}_z$ عبارة عن مضاعفات صحيحة للمقدار $\hbar$

H.w **Show that** 1) $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ 2) $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$ 3) $[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0$

التفسير الفيزياوي للمعادلات اعلاه ان المؤثر $\hat{L}^2$ يتبادل مع جميع مركبات الزخم الزاوي اي يمكن ايجاد قيم مضبوطة وبنفس الوقت لـ $\hat{L}^2$

Prove that $[L_x\ ,\ L_y] = i\hbar L_z$

$$[L_x\ ,\ L_y]\psi = (L_x L_y - L_y L_x)\,\psi$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad , \quad \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \quad , \quad \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$[L_x\ ,\ L_y]\psi$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[\left((y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})\cdot(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})\right) - \left((z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})\cdot(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})\right)\right]\psi$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\,\frac{\partial}{\partial z}(z\frac{\partial\psi}{\partial x})-y\frac{\partial}{\partial z}(x\frac{\partial\psi}{\partial z})-z\frac{\partial}{\partial y}(z\frac{\partial\psi}{\partial x})+z\frac{\partial}{\partial y}(x\frac{\partial\psi}{\partial z})\right.$$

$$\left.-z\frac{\partial}{\partial x}(y\frac{\partial\psi}{\partial z})+z\frac{\partial}{\partial x}(z\frac{\partial\psi}{\partial y})+x\frac{\partial}{\partial z}(y\frac{\partial\psi}{\partial z})-x\frac{\partial}{\partial z}(z\frac{\partial\psi}{\partial y})\right]$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\frac{\partial\psi}{\partial x}+yz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\,x}-yx\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-z^2\,\frac{\partial^2\psi}{\partial y\,x}+zx\frac{\partial^2\psi}{\partial y\,z}-zy\frac{\partial^2\psi}{\partial x\,z}+z^2\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x\,y}\right.$$

$$\left.+xy\,\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-x\frac{\partial\psi}{\partial y}-xz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\,y}\right]$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\,\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right]$$

$$=-\left(\frac{\hbar}{i}\right)\left\{\left(\frac{\hbar}{i}\right)\left[x\frac{\partial\psi}{\partial y}-y\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]\right\}$$

$$=i\hbar\,L_z\,\psi$$

$$=i\hbar\,L_z$$

برم الإلكترون Electron Spin

كان نقاشنا للحالات الكمية للذرة الوحيدة الإلكترون محددا بأبسط نموذج ممكن مما جعل الحصول على حل للمسالة بدلالة دوال معروفة امرا سهلا نسبيا. غير أن الأمور تتعقد شيا فشيا عندما نحاول استخدام الميكانيك الكمي لتفسير ظواهر شائعة في التجارب المعروفة عن الأطياف ونخص بالذكر ظاهرة زيمان الشاذة التي قادت الى افتراض البرم الإلكتروني.

يتاثر الإلكترون كأي جسم مشحون اذا ادخل ضمن مجال مغناطيسي. فمثلا لمجال مغناطيسي متجانس شدته H_z وفي الاتجاه z فان طاقة التفاعل التي تدخل في معادلة شرودنكر كحد اضافي هي $\frac{e}{2m}L_z H_z$ حيث L_z هي مركبة الزخم الزاوي المداري للالكترون و $(-e)$ هي شحنة الالكترون و m هي كتلة الالكترون. ولتفسير هذه الطاقة نعطي للالكترون عزما مغناطيسيا من خلال العلاقة

$$\mu = -\frac{e}{2m}L \qquad (1)$$

ان تاثير حد طاقة التفاعل هو تزحزح في مستويات الطاقة الذري يؤدي الى تغير في الطيف الخطي عندما يتسلط مجال مغناطيسي خارجي على الذرة. لقد استطاعت النظرية الكلاسيكية في تفسير ما يسمى ظاهرة زيمان الاعتيادية والتي فيها يتفرق الطيف الى ثلاث ترددات في حين تصبح المسالة معقدة عندما يحصل ما يسمى بظاهرة زيمان الشاذة والتي لايمكن تفسيرها بالطريقة ذاتها لان خطوط الطيف تتفرق بشكل متعدد فجاء افتراض البرم الإلكتروني.

لقد افترض ان للالكترون برم σ وعزم مغناطيسي داخلي μ_s اما مقدار البرم فقد افترض انه يقابل اعدادا كمية بنصف وحدة لمربع البرم ولمركبتة في الاتجاه z. أي القيمة الذاتية الوحيدة الممكنة لمربع σ هي:

$$\sigma \cdot \sigma = \delta(\delta+1)\hbar^2 \qquad (2)$$

حيث $\delta = \frac{1}{2}$ أي ان

$$\sigma^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \qquad (3)$$

ولمركبة σ باي اتجاه مثل الاتجاه z هنالك قيمتين ذاتيتين ممكنتين :

$$\sigma_z = m_s \hbar \qquad (4)$$

حيث $m_s = \frac{1}{2}$ او $-\frac{1}{2}$ اما العزم المغناطيسي فيفترض انه يتناسب مع σ بثابت تناسب يساوي $-e/m$ أي ان

$$\mu_s = -\frac{e}{m}\sigma \qquad (5)$$

وعليه يكون

$$\mu_{s_z} = -\frac{e}{m}\sigma_z$$

واذا عوضنا عن σ_z بـــ $\pm\frac{1}{2}\hbar$ نحصل على

$$\mu_{s_z} = \pm\frac{e\hbar}{2m} \qquad (6)$$

حيث μ_{s_z} يسمى بمغنيطون بور Bohr magneton ويرمز له μ_B

ان برم الاكترون هي صفة كمية ليس لها نضير في الفيزياء الكلاسيكية لان البرم استنادا الى مبدا التقابل يصبح مهملا اذا اهمل ثابت بلانك. ان فكرة البرم تقترن ادخال متغيرات ثلاثة جديدة هي σ_x , σ_y , σ_z لتعريف مسقط البرم على المحاور الثلاثة , وكذلك مؤثرات ثلاثة مقابله هي $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ وطبيعي فان المتغيرات البرمية تتخذ لنفسها القيمتين المتميزتين $\pm\frac{1}{2}\hbar$ فقط. اضافة الى ذلك يجب ان يتصف كل مؤثر بالصفة التالية:

$$\hat{\sigma}_z S = \sigma_\circ S \qquad (7)$$

حيث المعادلة اعلاه هي معادلة قيمة ذاتية فيها $\sigma_\circ = \pm\frac{1}{2}\hbar$ عبارة عن القيمتين الذاتيتين. ودالتا الموجة المقابلتان للمتغير σ_z يرمز لهما $S_{\frac{1}{2}}$ و $S_{-\frac{1}{2}}$ هاتان الدالتان يجب ان تكونا مجموعة عيارية متعامدة كاملة للدوال الموجية البرمية بحيث ان اعتماد البرم على اية دالة يمكن التعبير عنه بالمزج الخطي.

$$S(\sigma_z) = aS_{\frac{1}{2}}(\sigma_z) + bS_{-\frac{1}{2}}(\sigma_z) \qquad (8)$$

وصفة العيارية والتعامد تاخذ هنا صيغة الجمع على القيمتين الممكنتين لـ σ_z

$$\sum_{\sigma_z=-\frac{1}{2}\hbar}^{+\frac{1}{2}\hbar} S^*{}_{m_s}(\sigma_z)\, S_{m'_s}(\sigma_z) = \sigma_{m_s\, m'_s} \qquad (9)$$

في نظرية باولي تمثل المعاملات a و b في المعادلة 8 بمصفوفة عمودية ثنائية هكذا:

$$S = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

ومؤثرات البرم $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ تمثل بالمصفوفات التالية

$$\hat{\sigma}_x = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\sigma}_y = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\sigma}_z = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{10}$$

هذه المصفوفات اذا اثرت على دالة الموجة فان

$$\hat{\sigma}_z S = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

$$= \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}a\\ -b\end{pmatrix}$$

ودوال الموجة هنا تساوي الى

$$S_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} \quad , \quad S_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

وفي نظرية باولي فان المصفوفة الاجونية الهرميتية Hermitian Adjoint Matrix تلعب دور الدالة ψ^* في نظرية شرودنكر ونحصل على هذه المصفوفة باستبدال الصفوف بالاعمدة ثم استبدال كل عنصر في المصفوفة الناتجة بمرافقه المعقد فمثلا اذا كان $S = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$ فان $S^+ = \begin{pmatrix}a^* & b^*\end{pmatrix}$ هي المصفوفة الاجونية الهرميتية لـ S. مما تقدم يظهر حاصل ضرب مصفوفة عمودية في مصفوفتها الاجونية هي مصفوفة حقيقية لصف واحد وعمود واحد. يقابل التكامل $\int \psi^* \psi \, d\tau$ أي

$$S^+ S = \begin{pmatrix}a^* & b^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = a^* a + b^* b = 1$$

والقيمة المتوقعه لمتغيرات البرم تكتب على النحو التالي :

$$<\sigma_i> = S^+ \hat{\sigma}_i S \tag{11}$$

<u>اسئله</u>

س1) جد القيمة المتوقعه لــ σ_z؟

س2) افرض ان $S(\sigma_z)$ معلوم جد a و b

س3) جد مؤثر باولي لمربع البرم ومن ثم اثبت ان أي دالة برمية عيارية هي دالة ذاتية لـ $\hat{\sigma}\cdot\hat{\sigma}$ بقيمة ذاتية تساوي $\frac{3}{4}\hbar^2$