

الدراسة الكمومية لذرة الهيدروجين

Quantum study of the Hydrogen atome

1. مقدمة

سنهتم في هذا الفصل بدراسة الخصائص الكمومية لجسيم كتلته μ خاضع لتأثير كمون مركزي $V(r)$. ونقصد بالكمون المركزي ذلك الكمون الذي يتعلق فقط ببعد هذا الجسيم المدرس $r = |\mathbf{r}|$ عن مركز الاحداثيات المختار، ولا يتعلق باتجاه الحركة، أي يبقى ثابتا عندما يقوم الجسيم بحركة دورانية حول المركز فقط دون تغيير في بعده r ، ونقول بالتالي أن الكمون المركزي ذو تناظر كروي. إن الدراسة الكلاسيكية لحركة هذا الجسيم في مثل هذا الكمون المركزي تقود الى انحفاظ العزم الحركي المداري للجسيم \mathcal{L} ، ومن هنا تظهر أهمية هذا الأخير في الميكانيك الكلاسيكي كونه يمثل أحد ثوابت الحركة بالإضافة إلى الطاقة الكلية للجسيم في هذه الحالة. هذه الأهمية التي يمثلها العزم الحركي المداري \mathcal{L} تبرز أيضا عند الدراسة الكمومية لهذه الجملة أين تقابله الملاحظة \mathbf{L} ، ذلك أن هاملموني هذا الجسيم سيكون من الشكل

$$(1) \quad H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r)$$

وبالتالي سيكون متبادلا مع جميع مركبات العزم الحركي، ونكتب

$$(2) \quad [H, \mathbf{L}] = 0$$

وبالتالي فهو مقدار محفوظ أيضا في الميكانيك الكومومي. وفي الحقيقة يمكن البرهان على ذلك بصفة مباشرة، فبسبب التناظر الكروي للكمون المركزي ستكون دراسة الجملة في الاحداثيات الكروية (r, θ, φ) هي المناسبة. وفي هذه الحالة، فإن عبارة اللابلاسيان Δ ، الموجود في المعادلة (1)، تكتب بدلالة العزم الحركي المداري للجسيم كما يلي (انظر المعادلة 2-106 من الفصل الثاني)

$$(3) \quad \Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

بحيث أن كل التعلق بزوايا الحركة مُتضمن في مؤثر العزم الحركي المداري للجسيم. ومن خلال (1) و (3) نرى أن هاملموني الجملة H يكتب إذن

$$(4) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

وبما أن الملاحظة \mathbf{L}^2 تعمل فقط على الدوال المتعلقة بالزوايا الكروية فإن هذا الهاملتوني H يتبادل إذن مع كل مركبات العزم الحركي المداري \mathbf{L} كما كتبنا في (2). وبالتالي فإن المسألة مرتبطة ارتباطاً وثيقاً بدراسة العزم الحركي المداري \mathbf{L} التي قمنا بها في الفصل الثاني، فهاملتوني الجملة سيتبادل بالضرورة مع كل من الملاحظتين \mathbf{L}^2 و L_z . وهذه الحقيقة مهمة جدا، فهي تفيدنا في البحث عن الحالات المستقرة للجملة والتي هي أشعة ذاتية للهاملتوني H لأننا سنبحث عنها بحيث تكون أشعة ذاتية مشتركة لمجموعة الملاحظات المتبادلة $\{H, \mathbf{L}^2, L_z\}$. وما يساعدنا في ذلك أننا نعلم عبارة وخصائص الدوال الذاتية المشتركة للثنائية $\{\mathbf{L}^2, L_z\}$ التي قمنا بدراستها سابقا. فنكتفي إذن لدراسة هذه المسألة بالجزء المتعلق بالبعد r . فمعادلة شرودينغر ستختصر إلى معادلة تفاضلية لهذا المتغير الوحيد r وهو ما يسهل عملية البحث عن الحالات المستقرة للجسيم في هذا الكمون المركزي. هذا من الناحية التقنية لحل مثل هذه المسائل في ميكانيك الكم.

ومن الناحية العملية، فإن أهمية دراسة هذه المسألة تكمن في إمكانية تحويل دراسة جملة مكونة من جسيمين متفاعلين بواسطة كمون يتعلق بالبعد بينهما فقط $V(r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ إلى مسألة بسيطة تخص جسيما وحيدا، نسميه بالجسيم النسبي، وهذا الجسيم سيكون خاضعا إلى كمون مركزي ندرسه في المعلم المرتبط بمركز الكتل. وكتطبيق لهذه الحالة الخاصة فإن ذرة الهيدروجين المكونة من إلكترون وبروتون هي مثال واضح على مثل كمون التفاعل المتعلق بالبعد بين جسيمين فقط، وهو هنا الكمون الكهروستاتيكي (الكولوني) الذي سنحوه إلى مسألة جسيم وهي في حقل قوى

مركزي. وكذلك دراسة نظائر الهيدروجين وكذا كل الذرات شبيهة الهيدروجين، أي المؤينة بحيث تحتوي طبقاتها الالكترونية على الكترون فقط والذي سيتفاعل مع النواة المركبة من عدة جسيمات والتي نعتبرها متماسكة لتكون بذلك جسيما واحدا يتفاعل مع الالكترتون الوحيد. سندرس إذن في البداية الحالة العامة المتعلقة بجسيم خاضع لكمون مركزي، ثم نناقش مسألة الجسيمين المتفاعلين بواسطة كمون متعلق بالبعد بينهما فقط لنمر بعد ذلك إلى التطبيقات العملية لهذه الدراسة على ذرة الهيدروجين لنبحث عن حالاتها المستقرة ومستويات الطاقة لها.

2. الدراسة الكمومية لجسيم في حقل مركزي $V(r)$

1.2 الشكل العام للحلول المستقرة لمعادلة شرودينغر

لمعرفة الحالات المستقرة في ميكانيك الكم نبحث عن حلول معادلة القيم الذاتية للهاملتوني (1) والتي هي معادلة شرودينغر غير المتعلقة بالزمن لأن الكمون المركزي هنا مستقل عن الزمن

$$(5) \quad H|\varphi\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r) \right) |\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

وبما أننا سنعالج المسألة في الاحداثيات الكروية ملائمتها في حالة الكمون المركزي فإنه يمكن كتابة معادلة القيم الذاتية (5) في تمثيل الموضع $\{|\mathbf{r}\rangle \equiv |r, \theta, \varphi\rangle\}$ حسب (3) كما يلي

$$(6) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) \varphi(r, \theta, \varphi) = E\varphi(r, \theta, \varphi)$$

بالنسبة لهاته المسألة فإننا سنعامل الجسيم في البداية وكأنه بدون سبين ثم ندرج السبين فيما بعد إن أردنا الحصول على الوصف التام لحالته الكمومية. بالنسبة لحلول معادلة شرودينغر (6)، فقد ذكرنا في مقدمة هذا الدرس أننا سنبحث عن حلولها المستقرة ضمن الدوال الذاتية المشتركة لمجموعة الملاحظات المتبادلة $\{H, \mathbf{L}^2, L_z\}$ ذلك لأنه حسب (2) لدينا

$$(7) \quad [H, \mathbf{L}^2] = [H, L_z] = 0$$

وهذه الحلول ستكون قاعدة لفضاء الحالات المدارية \mathcal{E}_E للجسيم. إن الحلول $\varphi(r, \theta, \varphi)$ تحقق إذن معادلات القيم الذاتية التالية

$$(8) \quad \begin{cases} \mathbf{L}^2 \varphi(r, \theta, \varphi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 \varphi(r, \theta, \varphi) \\ L_z \varphi(r, \theta, \varphi) = m\hbar \varphi(r, \theta, \varphi) \end{cases}$$

وبما أن كلا الملاحظتين \mathbf{L}^2 و L_z تؤثران فقط على الدوال المتعلقة بالزوايا الكروية (θ, φ) فإنه يمكن كتابة الحلول $\varphi(r, \theta, \varphi)$ على شكل جداء دالة $\mathcal{R}(r)$ متعلقة بالبعد r فقط بدالة أخرى متعلقة بالزوايا (θ, φ) . من جهة أخرى، درسنا في الفصل الثاني الخاص بالعزوم الحركية حلول المعادلات (8) والتي هي المتوافقات الكروية $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ (أنظر الفصل الثاني - المعادلة (93-2)) المتعلقة بالدليلين " ℓ, m ". فإذا رمزنا بدليل ثالث k إلى كل الأعداد الكمومية الأخرى المحتمل ظهورها عند البحث عن الحلول المستقرة فإن الدوال الموجية $\varphi(r, \theta, \varphi)$ ستكتب كما فعلنا في (2-92) كالتالي

$$(9) \quad \varphi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}_{k\ell m}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

أين أضفنا إلى الجزء القطري $\mathcal{R}_{k\ell m}(r)$ كل القرائن " k, ℓ, m " بصفة مبدئية لاحتمال تعلقه بهذه الأعداد الكمية. ونسميها كما يلي

- العدد k : العدد الكمي القطري radial quantum number
- العدد ℓ : العدد الكمي السمي azimuthal quantum number
- العدد m : العدد الكمي المغناطيسي المداري orbital magnetic quantum number

2.2 المعادلة القطرية

في الحقيقة، لن يكون الجزء القطري $\mathcal{R}(r)$ متعلقا إلا بالدليلين " k, ℓ " فقط لأنه بتعويض الدوال (9) في معادلة شرودينغر (6) مع استعمال (8) نجد

$$(10) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) \mathcal{R}_{k\ell}(r) = E_{k\ell} \mathcal{R}_{k\ell}(r)$$

وتسمى المعادلة القطرية (radial equation) والتي لا نلاحظ فيها ظهور العدد المغناطيسي m . وبالتالي فلن يظهر كدليل في الحلول القطرية $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$. كما نلاحظ كذلك أن قيم الطاقة الممكنة $E_{k\ell}$ للجسيم ستتعلق أيضا بالدليلين " k, ℓ " فقط، مع العلم أن القيم الممكنة للعدد الكمي ℓ هي الأعداد الصحيحة الموجبة $\ell \geq 0$ ، في حين أن قيم العدد الكمي k تتعلق بطبيعة الكمون $V(r)$ وكذا طاقة الجسيم $E_{k\ell}$ ، فيمكن له أخذ قيم حقيقية وهي التي توافق حالة الطيف المستمر، أي الحالات غير المرتبطة والتي تمثل حالات التشتت للجسيم بواسطة كمون التفاعل، أو قيم متقطعة صحيحة وهي التي توافق حالة الطيف المتقطع، أي الحالات المرتبطة التي طاقاتها تكون مكمّمة.

بهذه الطريقة تم تبسيط عملية البحث عن الحلول المستقرة $\varphi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi)$ لمعادلة شرودينغر إلى مسألة البحث عن حلول المعادلة القطرية (10) فقط، ذلك أننا نعلم العبارة التحليلية للجزء الزاوي $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ للدوال المستقرة والمعطاة بالعلاقة (2-100) في الفصل الثاني. نشير أيضا إلى أننا سنختار الدوال المستقرة $\varphi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi)$ بحيث تكون مقننة، وهي العلاقة التي نكتبها في الاحداثيات الكروية كما يلي

$$(11) \quad \iiint \varphi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta \, dr d\theta d\varphi = \int_0^\infty |\mathcal{R}_{k\ell}(r)|^2 r^2 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1$$

وبالتالي فإن علاقة التقنين الخاصة بالجزء القطري $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ ستكون

$$(12) \quad \int_0^\infty |\mathcal{R}_{k\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

لأن الدوال التوافقية الكروية تُختار بحيث تكون مقننة. وحتى تكون الحلول القطرية $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ مقننة فيجب أن تكون محدودة ومنظمة وخاصة بجوار الصفر حتى تكون حلولاً لمعادلة شرودينغر (6). أي يجب أن تكون ذات قيم منتهية حتى تكون مقبولة وتحقق (12)، وهو ما سنفرضه على مجموعة الحلول الممكنة للمعادلة القطرية (10). في الحقيقة، بوضع

$$(13) \quad u_{k\ell}(r) = r \mathcal{R}_{k\ell}(r)$$

وضرب كلا طرفي هذه المعادلة بالمتغير r ، فإننا نتحصل على المعادلة القطرية الجديدة التالية

$$(14) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) u_{k\ell}(r) = E_{k\ell} u_{k\ell}(r)$$

وهذه المعادلة شبيهة بمعادلة شرودينغر لجسيم يتحرك في بعد واحد (متغير واحد r فقط) وخاضع لكمون فعلي $V_{\text{eff}}(r)$ بحيث

$$(15) \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

ويمكن الفرق بين الحالتين أن المتغير الوحيد r هنا يأخذ القيم بين الصفر وما لانهاية. فيمكن أن نعتبر أنها حالة جسيم يتحرك في بعد واحد وخاضع للكمون التالي

$$(16) \quad \begin{cases} V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} & \text{if } r > 0 \\ \infty & \text{if } r \leq 0 \end{cases}$$

وبما أن الحلول $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ يجب أن تأخذ قيما منتهية وخاصة عند مركز الكمون، أي عند المبدأ، فإن الحلول $u_{k\ell}(r)$ للمعادلة القطرية (14) يجب أن تنعدم عند الشرط الحدي $r = 0$. فيجب إذن أن يرافق المعادلة (14) الشرط الضروري التالي

$$(17) \quad \lim_{r \rightarrow 0} (r \mathcal{R}_{k\ell}(r)) = u_{k\ell}(0) = 0$$

في الحقيقة وكما سنرى فيما بعد، فإن هذا الشرط سيسمح لنا بقبول أحد الحلين من بين الحلول الممكنة للمعادلة (14) التي هي معادلة تفاضلية من الرتبة الثانية.

من جهة أخرى، نلاحظ أن الحد $(\ell(\ell + 1)\hbar^2/2\mu r^2)$ الموجود في عبارة الكمون الفعلي $V_{\text{eff}}(r)$ موجب دائما ويُسمى بالكمون النابذ (الطارد المركزي) لأنه يوافق قوة تشتت منه تعمل لدفع للجسيم بعيدا عن مركز الكمون $V(r)$. فإن كان الكمون المركزي $V(r)$ أيضا كمون نابذ فحالات الجسيم ستكون حالات تشتت بواسطة هذا الكمون، أما لو كان الكمون $V(r)$ تجاذبيا فإنه يمكن أن نتحصل على حالات مستقرة مرتبطة. طبعا هذا يعتمد على مسافة تأثير هذا الكمون كما يعتمد أيضا على قيمة العزم الحركي المداري أيضا الذي يمثله العدد الكمي ℓ الذي يظهر في العبارة (15).

3. الدراسة الكمومية لجسيمين متفاعلين بواسطة كمون من الشكل $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$

لنعتبر جملة مكونة من جسيمين 1 و 2 (بدون سبين) كتلتاهما m_1 و m_2 وشعاعا موضعاهما \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 على الترتيب. ونفرض أنهما يتفاعلان فيما بينهما بواسطة قوة مشتقة من الطاقة الكامنة $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ المتعلقة بالوضع النسبي بينهما فقط. نقوم أولا بالتذكير بأهم النقاط الخاصة بمعالجة مثل هذه الجملة في الميكانيك الكلاسيكي لنمر بعدها إلى المعالجة الكمومية.

1.3 المعالجة الكلاسيكية

إن دراسة هذه الجملة في الميكانيك الكلاسيكي تعود إلى دراسة حركة جسيم وحيد في معلم جديد مركزه منطبق مع مركز الكتل للجسيمين، ونسبي هذا الجسيم البديل بالجسيم النسبي والذي يكون خاضعا للكمون $V(\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. في الحقيقة إن موضعي مركز الكتل والجسيم النسبي لهذه الجملة تعطى بالأشعة

$$(18) \quad \mathbf{r}_G = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \text{ (center of mass coordinates)}$$

$$(19) \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \text{ (relative coordinates)}$$

فإذا وضعنا

$$(20) \quad \begin{cases} M = m_1 + m_2 \text{ (total mass of the system)} \\ \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ (reduced mass - الكتلة المختصرة)} \end{cases}$$

فإن دالة هاملتون الكلاسيكية ستكون

$$(21) \quad \mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_G^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})$$

حيث أن \mathbf{p}_G و \mathbf{p} هي العزوم المرافقة للمتغيرين \mathbf{r}_G و \mathbf{r} على الترتيب وهي

$$(22) \quad \begin{cases} \mathbf{p}_G = M \dot{\mathbf{r}}_G = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p} = \mu \dot{\mathbf{r}} = (m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2) / M \end{cases}$$

فيكون \mathbf{p}_G هو الاندفاع الكلي للجملة و \mathbf{p} هو الاندفاع النسبي لها. إن دراسة معادلات هاملتون القانونية تقود إلى النتيجة التالية. إن حركة الجسيم المرتبط بمركز الكتل، أي الذي كتلته M ، هي حركة مستقيمة منتظمة بالنسبة للمعلم الأصلي لأن

$$(23) \quad \dot{\mathbf{p}}_G = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_G} = \mathbf{0}$$

وهي نتيجة متوقعة، لأن جملة الجسيمين لا تخضع إلى قوى خارجية، فهي تعتبر جملة معزولة. وبالتالي فإن اعتبرنا معلما مرتبطا بمركز الكتل فسيكون بدوره معلما عطاليا، وفي هذا المعلم، الذي نسميه معلم مركز الكتل سيكون $\mathbf{p}_G = \mathbf{0}$ ، وسيصبح دالة هاملتون لهذه الجملة (21) كما يلي

$$(24) \quad \mathcal{H}_r = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})$$

حيث \mathcal{H}_r هي الطاقة المصاحبة للحركة النسبية لكلا الجسيمين 1 و 2. والطاقة الكلية للجملة بالنسبة للمعلم الأصلي تساوي مجموع الطاقة النسبية والطاقة الحركية للجسيم المرفق بمركز الكتل كما نرى من المعادلة (21).

$$(25) \quad E_T = E_{CM} + E_r = \frac{E_{CM}}{2M} + \frac{E_r}{2\mu} + V(\mathbf{r})$$

إن هذه الحركة النسبية للجسيمين هي المهمة لدراسة جملة مكونة من جسيمين في حالة تفاعل بينهما. إن دالة هاملتون (24) تصف حركة جسيم كتلته μ هي الكتلة المختصرة للجسيمين وموضعه محدد بواسطة الموضع النسبي لهما \mathbf{r} واندفاعه هو الاندفاع النسبي \mathbf{p} وهو خاضع للكومون $V(\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ الممثل للطاقة الكامنة للتفاعل بين الجسيمين الحقيقيين. وهو جسيم وهمي فقط (fictitious particle) نسميه بالجسيم النسبي. وهكذا نكون اقتصرنا دراسة الجملة الأصلية المكونة من جسيمين حقيقيين متفاعلين إلى دراسة حركة جسيم واحد فقط هو الجسيم النسبي.

2.3 المعالجة الكمومية

سنرى أن الدراسة الكمومية لهذه المسألة تعود أيضا إلى دراسة الهاملتوني المتعلق بالجسيم الوهمي، أي بالجسيم النسبي. ففي ميكانيك الكم، توصف مواضع واندفاعات الجسيمين 1 و 2 بواسطة الملاحظات $(\mathbf{R}_1, \mathbf{P}_1)$ و $(\mathbf{R}_2, \mathbf{P}_2)$ على الترتيب. وكل من هاتين الثنائيتين تحقق علاقات التبادل المعروفة بين موضع جسيم واندفاعه. أي العلاقات التالية

$$(26) \quad [\mathbf{R}_{i\alpha}, \mathbf{P}_{j\beta}] = i\hbar\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}; (i, j = x, y, z) \text{ and } (\alpha, \beta = 1, 2)$$

حيث أضفنا $\delta_{\alpha\beta}$ إلى علاقة التبادل هذه لكي نشير إلى أن الملاحظات الخاصة بالجسيم 1 تتبادل مع ملاحظات الجسيم 2. إن المؤثر الهاملتوني الذي يحكم سلوك هذه الجملة هو

$$(27) \quad H = \frac{\mathbf{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{P}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)$$

نريد أن نحول هذه المسألة إلى مسألة متعلقة بدراسة جسيم واحد فقط في معلم مركز الكتلة، ولذلك نستطيع أن نرفق الملاحظات التالية الموافقة لموضع واندفاع الجسيم الوهمي الكلاسيكي المرتبط بمركز الكتلة وذلك وفق حسب العبارات (18) و (22) فيكون

$$(28) \quad \begin{cases} \mathbf{R}_G = m_1\mathbf{R}_1 + m_2\mathbf{R}_2/M \\ \mathbf{P}_G = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 \end{cases}$$

وكذلك نرفق الملاحظات الموافقة لموضع واندفاع الجسيم النسبي، فتكون حسب (19) و (22) هي

$$(29) \quad \begin{cases} \mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 \\ \mathbf{P} = (m_2\mathbf{P}_1 - m_1\mathbf{P}_2)/M \end{cases}$$

وهذه الملاحظات الجديدة تحقق علاقات التبادل مثل تلك التي تحققها الملاحظات الخاصة بالجسيمين الحقيقيين في العلاقة (26)، فنقول إذن أن الملاحظات الجديدة هي ملاحظات الموضع والاندفاع للجسيمين الوهميين المذكورين. أي جسيم مركز الكتلة والجسيم النسبي. وبتعويض العبارات (28) و (29) في عبارة الهاملتوني (27) مع الأخذ بعين الاعتبار علاقات التبادل بين الملاحظات المختلفة نجد

$$(30) \quad H = \frac{H_G}{2M} + \frac{H_r}{2\mu} + V(\mathbf{R}) = H_G + H_r$$

والذي يظهر كمجموع هاملتونين أحدهما خاص بجسيم مركز الكتلة

$$(31) \quad H_G = \frac{\mathbf{P}_G^2}{2M}$$

والأخر خاص بالجسيم النسبي

$$(32) \quad H_r = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + V(\mathbf{R})$$

حيث تحقق ثلاثها علاقات التبادل التالية

$$(33) \quad [H_G, H_r] = [H, H_G] = [H, H_r] = 0$$

وهي العلاقات التي نترجمها بقدرتنا على البحث عن مجموعة الأشعة الذاتية المشتركة للملاحظات $\{H, H_G, H_r\}$. فيمكن اعتبار الدالة الموجية للجملة $\psi(\mathbf{r}_G, \mathbf{r})$ بحيث تكون جداء دالتين موجيتين كل منهما تصف حالة الجسيم الخاص بها. أي

$$(34) \quad \psi(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r}_G)\varphi(\mathbf{r})$$

حيث أن هذه الدوال تحقق معادلات القيم الذاتية التالية

$$(35) \quad \begin{cases} H\psi(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}) = E_T\psi(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}) \\ H_G\chi(\mathbf{r}_G) = E_G\chi(\mathbf{r}_G) \\ H_r\varphi(\mathbf{r}) = E_r\varphi(\mathbf{r}) \end{cases}$$

وتكون بذلك الطاقة الكلية للجملة هي

$$(36) \quad E_T = E_G + E_r$$

إن معادلة القيم الذاتية لهاملتوني جسيم مركز الكتلة H_G تكتب بشكل صريح كما يلي

$$(37) \quad \frac{\mathbf{P}_G^2}{2M}\chi(\mathbf{r}_G) = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_G\chi(\mathbf{r}_G) = E_G\chi(\mathbf{r}_G)$$

وهي معادلة شرودينغر التي تصف جسيما حرا دالته الموجية عبارة عن حزمة أمواج مستوية وطاقته هي

$$(38) \quad E_G = \frac{\mathbf{P}_G^2}{2M}$$

أما معادلة القيم الذاتية لهاملتوني الذي يصف حركة الجسيم النسبي، فشكلها الصريح هو

$$(39) \quad \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + V(\mathbf{R})\right)\varphi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\mathbf{R})\right)\varphi(\mathbf{r}) = E_r\varphi(\mathbf{r})$$

وهي المعادلة التي تهمنا في ميكانيك الكم، فهي التي تصف جملة الجسيمين المتفاعلين في معلم مركز الكتلة، وحلها يمكننا من معرفة الطاقة النسبية للجملة وبالتالي الطاقة الكلية لها في المعلم الأصلي. وهذه الطريقة نكون قد أثبتنا أننا نستطيع إرجاع دراسة جملة مكونة من جسيمين متفاعلين بواسطة كمون ستعلق بالوضع النسبي لهما $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ إلى دراسة مسألة جسيم واحد فقط في معلم مركز كتلة الجملة. فإذا كان كمون التفاعل بين الجسيمين يتعلق فقط بالبعد بينهما ولا يتعلق بالاتجاه النسبي، أي يتعلق بالمسافة $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ، وليس بالشعاع $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ ، فإن الكمون في هذه الحالة هو كمون مركزي ونكتب معادلة شرودينغر (39) الخاصة بالجسيم النسبي إذن كما في (6)

$$(40) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)\right)\varphi(r, \theta, \varphi) = E_r\varphi(r, \theta, \varphi)$$

حيث (r, θ, φ) هي الاحداثيات الكروية للجسيم النسبي في معلم مركز الكتلة الذي هو مركز الكمون، و \mathbf{L} هو عزمه الحركي بالنسبة لهذا المركز. وهذه المسألة درسناها سابقا. وهذا يُبرز أهمية دراسة موضوع حركة جسيم في حقل مركزي.

سنطبق فيما سيأتي ما درسنا في الفقرات السابقة على ذرة الهيدروجين كنموذج

4. الدراسة الكمومية لذرة الهيدروجين

1.4 نموذج بور لذرة الهيدروجين - مسألة الجسيم النسبي

تتكون ذرة الهيدروجين كما هو معلوم من إلكترون وبروتون يتفاعلان فيما بينهما بواسطة قوة التجاذب الكولونية وذلك لامتلاكهما شحنتين متساويتين في القيمة ومتعاكستين في الإشارة حيث

$$(41) \quad q_e = -q_p = -e = -1.6 \times 10^{-19} \text{ Coulomb}$$

وتعطي طاقة التفاعل الكهروستاتيكي بينهما بالعلاقة التالية

$$(42) \quad V(r) = -\frac{Ke^2}{r}$$

حيث أن الثابت $K = 9 \times 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{C}^{-2}$ و r هو البعد بين الإلكترون والبروتون. إن ذرة الهيدروجين تمثل نموذجا عن جملة جسيمين متفاعلين بينهما بواسطة كمون يتعلق بالبعد بينهما فقط، أي كمون تفاعل مركزي، ولذلك فإن الدراسة الكمومية لهذه الذرة التي تعد أبسط الذرات على الإطلاق تعود إلى دراسة الجسيم النسبي لها كما بيّنا ذلك في الفقرة السابقة. إن كتلة هذا الجسيم النسبي μ تعطى كما في (20) بالعلاقة التالية

$$(43) \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_p + m_e}$$

لكن كتلة البروتون أكبر بحوالي 1836 مرة من كتلة الإلكترون. في الحقيقة

$$(44) \quad \begin{cases} m_e = 9.10953 \times 10^{-31} \text{ kg} \\ m_p = 1.67265 \times 10^{-27} \text{ kg} \end{cases} \Rightarrow \frac{m_p}{m_e} \approx 1836 \Leftrightarrow \frac{m_e}{m_p} \ll 1$$

وبهذا فإن الكتلة المختصرة لجمليهما، أي كتلة الجسيم النسبي تؤول تقريبا إلى كتلة الإلكترون. فحسب (43) و (44) يكون

$$(45) \quad \mu = \frac{m_e}{\left(1 + \frac{m_e}{m_p}\right)} \cong m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)$$

كما أن موضع مركز الكتلة ينطبق تقريبا على البروتون باعتباره ثقيلًا جدًا بالنسبة للإلكترون، فمن خلال (18) يكون

$$(46) \quad \mathbf{r}_{G=CM} = \frac{m_p \mathbf{r}_p + m_e \mathbf{r}_e}{m_p + m_e} \cong \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \mathbf{r}_p + \frac{m_e}{m_p} \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \mathbf{r}_e \cong \mathbf{r}_p$$

حيث \mathbf{r}_p و \mathbf{r}_e هي أشعة الموضع لكل من الإلكترون والبروتون بالنسبة للمعلم الأصلي. وبهذه التقريبات فإن جسيم مركز الكتلة ينطبق على البروتون في حين أن الجسيم النسبي ما هو إلا الإلكترون. وعلى كل حال فالدراسة الدقيقة لذرة الهيدروجين تتطلب دراسة كلا الجسيمين النسبي ومركز الكتلة كما وضحناه في الفقرة السابقة. ولكن العمل بهذا التقريب المذكور أنفا كاف جدا للحصول على الخصائص المتعلقة بذرة الهيدروجين وهو ما يدعونا لدراسة الإلكترون في معلم مركز الكتلة على أنه هو الجسيم النسبي ذاته دونما أن يُحدث ذلك خطأ معتبرا في النهاية.

لا شك أن الحديث عن قوة تفاعل جاذبة مركزية بين جسيمين يقود مباشرة إلى التساؤل عن استقرار هذه الجملة! فإن كان الأمر كذلك فلما تبقى الذرات عموما مستقرة، وبشكل خاص ذرة الهيدروجين؟ مثل هذا السؤال مشكلة كبيرة للنموذج الكوكبي لذرذفورد المقترح للذرات بعد فشل النموذج الأسبق من طرف طومسون. فرغم أن التجربة أكدت البنية الداخلية للذرة على أنها مكونة من نواة مشحونة موجبة مُحاطة بإلكتروناتها سالبة الشحنة والمعادلة لها كما أنها أيضا تدور حولها، إلا أن هذه الصورة عورضت بالنظرية الكهرومغناطيسية الكلاسيكية التي تنص على أن كل جسيم مشحون خاضع لتسارع لابد أن يشع إشعاعا كهرومغناطيسيا يترافق مع فقدان في طاقة هذا الجسيم المشحون، وفي حالة الإلكترونات المتسارعة في حركة دورانية حول النواة فلا بد من أن ينتهي بها المطاف إلى السقوط داخل النواة وبالتالي عدم استقرار الذرة. لكن الحقيقة العلمية غير ذلك، فهي تؤكد على واقع استقرار الذرات كما هو واضح بطبيعة الأشياء.

في سنة 2013، تمت معالجة مشكلة استقرار ذرة الهيدروجين بصورة نصف كمومية (نصف كلاسيكية أيضا!) من طرف نيلز بور والتي كانت أفكاره لا

تزال مشوبة بالطرح الكلاسيكي للمسألة، فإلى غاية ذلك الوقت كانت لاتزال المفاهيم الكلاسيكية هي الأداة الأولى لمعالجة المسائل حتى على المستوى الذري. لكن فرضيات بور لاقت نجاحا مميّزا بالنسبة لذرة الهيدروجين رغم اعتمادها على فكرة المسار الكلاسيكية للجسيمات المجهرية، مثل الأفلاك المستقرة للإلكترونات والتي لا تغادرها إلا إلى أفلاك أخرى مستقرة أيضا¹ سواء بامتصاص أو إصدار أشعة كهرومغناطيسية، إلا أنها في المقابل أيضا اعتمدت على فكرة كمومية هي التي سمحت أساسا بتكميم طاقة الإلكترونات وكذا تحديد هذه المدارات المستقرة. كانت هذه الفكرة هي تكميم العزم الحركي المداري للإلكترون الموجود في مداره المستقر، وهي الفكرة التي تعد إحدى الخطوات الأساسية نحو ميكانيك الكم.

في الحقيقة، لم يكن نجاح نظرية بور لذرة الهيدروجين راجعا إلى تفسير استقرارها فقط، بل كانت موافقتها للنتائج التجريبية لأطياف الإصدار والامتصاص التي كانت متاحة آنذاك (سلسلة بالمر بالتحديد) وكذا طاقة تأينها هي النقطة الأخرى التي دعمت قبول الأفكار الكمومية الأولية رغم غرابتها واستهجائها في ذلك الوقت، وهي التي دفعت بكل من بور وأستاذه رذرفورد إلى محاولة تعميم هذا النموذج على باقي الذرات الأكثر تعقيدا (تركيبا). كانت محاولات باءت بالفشل لأنها لم تتخلص من عبئ الأفكار الكلاسيكية مثل فكرة المسارات المحددة للإلكترونات بالقياس على فكرة مسارات الكواكب حول الشمس. وحتى نموذج بور لذرة الهيدروجين فشل في تفسير البنية الدقيقة وفوق الدقيقة لها. في الحقيقة، كان لا بد من معالجة تُحدث قطيعة كلية مع حتمية الميكانيك الكلاسيكي وأفكاره ماعدا بعض التقاطعات مع خطوطه العريضة. كانت تلك هي معالجة ميكانيك الكم التي تضمنت العديد من الأفكار الجديدة والجريئة.

ما يهمنا من نموذج بور في هذه الفقرة، هي المقادير المميزة لمستويات طاقة ذرة الهيدروجين E_n وبشكل خاص طاقة تأينها E_I ونصف قطر بور a_0 المميز لبعدهم للإلكترون عن النواة والمميز أيضا للأبعاد الذرية عموما، والتي تعطى بالعبارات التالية

$$(47) \quad E_I = \frac{K^2 m_e e^4}{2 \hbar^2} \cong 13.6 \text{ eV}$$

$$(48) \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{K m_e e^2}$$

$$(49) \quad E_n = -\frac{1}{n^2} E_I$$

إن مما يثير الإعجاب أننا سنتحصل على نفس قيم طاقة المستويات (49) بواسطة المعالجة الكمومية لذرة الهيدروجين والتي تظهر كقيم ذاتية لهاملتوني الإلكترون مرافقة للدوال الموجية التي تصف مختلف المستويات الذرية. ولذلك سنصطب هذه المقادير الثلاثة التي سنحتاجها لتمييز رتبة المقادير الفيزيائية لذرة الهيدروجين وشبهاتها في الفقرة التالية.

2.4 المعالجة الكمومية لذرة الهيدروجين

1.2.4 معادلة شرودينغر لإلكترون ذرة الهيدروجين

إن الهاملتوني الذي يحكم حركة الإلكترون (الجسيم النسبي) في ذرة الهيدروجين والذي يخضع إلى الكمون مركزي (42) يكون حسب (32)

$$(50) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2\mu r^2} - \frac{Ke^2}{r}$$

وبما أن كمون التفاعل مركزي فسنطبق عليه نتائج الفقرة 11، وبشكل خاص العبارات (9) و (13) و (14) فنكتب المعادلة القطرية في هذه الحالة كما يلي

$$(51) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ke^2}{r} \right) u_{k\ell}(r) = E_{k\ell} u_{k\ell}(r)$$

¹ يظهر أن القول بمدارات مستقرة يتناقض مع حقيقة عدم بقاء الإلكترونات فيها لأنها تعود مباشرة إلى المدارات السفلى الأكثر استقرارا، طبعاً إن لم تكن مشغولة بالإلكترونات الأخرى، وذلك بإصدار إشعاع كهرومغناطيسي. فلو كانت مستقرة لما لا يضل الإلكترون في تلك المستويات إذن؟ والجواب عن هذا السؤال، وحتى تكون أكثر دقة نستعمل مستويات طاقة عوضاً عن كلمة مدارات، يكمن في أن مستويات الطاقة هذه هي فعلاً مستويات مستقرة، فهي كما سنثبت فيما بعد توافق الحلول المستقرة لمعادلة شرودينغر، إلا أن تفاعل الذرة مع محيطها الخارجي، أي مع الحقول الكهرومغناطيسية بشكل خاص، هو ما يتسبب في عدم بقاء الإلكترونات في هذه المستويات العليا، وهو ما يطلق عليه أيضاً اسم اضطرابات الفراغ للحقل الكهرومغناطيسي الخارجي. إن معالجة هذه المسألة تتطلب قدراً أكبر من ميكانيك الكم، فهي تعالج في إطار الكهرو ديناميكا الكمومية.

مع الشرط (17). في هذه المرحلة، نميز حالتين لطيف الهاملتوني (50)، فمن أجل القيم الموجبة للطاقة $E_{k\ell}$ سيكون الطيف مستمر وهي التي توافق حالات التشتت، أي نشأت الإلكترون بواسطة نواة الذرة، وهذه الحالة تعالج في الفصل الخاص بمسائل التشتت بواسطة كمون مركزي. ومن أجل القيم السالبة للطاقة $E_{k\ell}$ فإننا سنبرهن فيما سيأتي ان طيف الطاقة متقطع. وبعبارة أخرى، فإن المعادلة القطرية (51) لن يكون لها حلولاً مقبولة فيزيائياً إلا من أجل بعض القيم الخاصة للطاقة مثل تلك التي وجدت بواسطة نموذج بور (49)، وهي التي تهمنا في هذا الفصل. أي سنعتبر أن $E_{k\ell} < 0$. إننا نقصد بالحلول المقبولة فيزيائياً هي تلك الحلول $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ التي تكون قابلة للتقنين. أي تحقق شرط التقنين (12).

2.2.4 المعادلة القطرية والسلوك التقريبي للحلول

سيكون من الجيد تفصيل طريقة حل المعادلة التفاضلية (51) لأننا سنرى كيف يظهر تكميم طاقة الجمللة بفرض الشروط الفيزيائية على مجموعة الحلول الرياضية الممكنة لهذه المعادلة واستبعاد تلك التي لا تكون مقبولة فيزيائياً. فنبدأ أولاً بتحويل هذه المعادلة التفاضلية التي تحتوي على مقادير فيزيائية إلى معادلة تحتوي ثوابت ومتغيرات بدون أبعاد. لذلك نحول سَلَم المتغير r بحيث نقيس البعد بوحدات نصف قطر بور a_0

$$(52) \quad r = a_0 \rho$$

كما نغير سَلَم قياس الطاقة بحيث تقاس بوحدات طاقة التآين E_I كما يلي

$$(53) \quad \eta_{k\ell} = \sqrt{-\frac{E_{k\ell}}{E_I}} ; E_{k\ell} < 0$$

فتصبح المعادلة (51) إذن بالشكل التالي

$$(54) \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \eta_{k\ell}^2 \right) u_{k\ell}(\rho) = 0$$

وقصد تبسيط البحث عن حلول هذه المعادلة الأخيرة، يُنظر أولاً في السلوك التقريبي للحلول $u_{k\ell}(\rho)$ بجوار المبدأ، أي لما $\rho \rightarrow 0$ ، وكذلك عند اللانهاية $\rho \rightarrow \infty$ ، مع رفض الحلول التي تتباعد عند هاتين النهايتين، أي التي لا تحقق شرط التقنين.

1.2.2.4 السلوك التقريبي بجوار الصفر

لنحصر بداية سلوكها بجوار المبدأ والذي نتحصل عليه من خلال (54) التي يهيمن فيها الحد $(\ell(\ell+1)/\rho^2)$ على باقي الحدود في هذه الحالة فتصبح بعد إهمال الحددين الأخيرين كما يلي

$$(55) \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) u_{k\ell}(\rho) = 0$$

إن الحل العام لهذه المعادلة هو

$$(56) \quad u_{k\ell}(\rho) = A\rho^{\ell+1} + B\rho^{-\ell}$$

حيث A و B ثوابت. لاشك أن الحل $\rho^{-\ell}$ مرفوض لأنه لامتناهي بجوار الصفر (ماعداً من أجل $\ell = 0$)²، ولذلك نأخذ الحل المناسب $\rho^{\ell+1}$ الذي يمثل السلوك التقريبي للحلول $u_{k\ell}(\rho)$ بجوار الصفر. ونكتب

$$(57) \quad \begin{aligned} u_{k\ell}(\rho) &\sim \rho^{\ell+1} \\ \rho &\sim 0 \end{aligned}$$

2.2.2.4 السلوك التقريبي عند اللانهاية

بالنسبة لسلوك الحلول عند اللانهاية، فإن الحددين الثاني والثالث اللذين يحتويان ρ^{-1} و ρ^{-2} يهملان في المعادلة (54) لتصبح

² ويرفض في هذه الحالة، أي من أجل ، لأننا لا يمكن حساب الطاقة الحركية حينئذ [Flugge p 171]

$$(58) \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \eta_{k\ell}^2 \right) u_{k\ell}(\rho) = 0$$

والتي تقبل الحلول $e^{\pm\eta_{k\ell}\rho}$ والتي نرفض منها الحل $e^{+\eta_{k\ell}\rho}$ لأنه غير محدود عند اللانهاية فيكون غير مقبول فيزيائيا. فيكون السلوك التقريبي إذن في هذه الحالة كما يلي

$$(59) \quad \begin{aligned} u_{k\ell}(\rho) &\sim e^{-\eta_{k\ell}\rho} \\ \rho &\sim \infty \end{aligned}$$

إذن، فنحن نتطلب من حلول المعادلة القطرية (54) أن تسلك نفس السلوك التقريبي الذي أثبتناه في (57) و (59) والذي على أساسه سنقوم بتحويل الدالة $u_{k\ell}(\rho)$ حتى يمكننا الحصول على الحلول الدقيقة لهذه المعادلة القطرية.

3.2.4 حلول المعادلة القطرية

بالاعتماد على السلوك التقريبي للمعادلة القطرية المذكورة، يمكننا أن نأخذ فكرة عن التحويل الذي سنجره على الدالة $u_{k\ell}(\rho)$ حتى نتحصل على الحل النهائي للمعادلة القطرية. فحسب (57) و (59) نكتب

$$(60) \quad u_{k\ell}(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\eta_{k\ell}\rho} y_{k\ell}(\rho)$$

فتصبح المعادلة (54) بعد التعويض

$$(61) \quad \left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - 2\eta_{k\ell}\rho) \frac{d}{d\rho} - 2\eta_{k\ell}(\ell + 1 - \eta_{k\ell}^{-1}) \right] y_{k\ell}(\rho) = 0$$

وهذه المعادلة التفاضلية الأخيرة يمكن تحويلها إلى معادلة لابلاس Laplace وذلك بوضع

$$(62) \quad x = 2\eta_{k\ell}\rho$$

وبالتعويض في (61) نجد المعادلة التفاضلية للابلاس التي تأخذ الشكل التالي

$$(63) \quad \left[x \frac{d^2}{dx^2} + (2\ell + 2 - x) \frac{d}{dx} - (\ell + 1 - \eta_{k\ell}^{-1}) \right] y_{k\ell}(x) = 0$$

والتي تسمى أيضا معادلة كيمار Kummer التي شكلها العام هو

$$(64) \quad \left[z \frac{d^2}{dz^2} + (\beta - z) \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0$$

نتحصل على حلول هذه المعادلة باستعمال طريقة فروبنيوس Frobenius التي تكمن في البحث عن الحلول على شكل متسلسلة قوى للمتغير Z . وطبعا سنختار من بين الحلول الممكنة لهذه المعادلة ذلك الحل المنتظم³، أي الحل الذي يأخذ قيما منتهية بجوار المبدأ، والذي هو عبارة عن سلسلة قوى تُسمى بالسلسلة فوق الهندسية (confluent hypergeometric series) ونرمز لها بالرمز ${}_1F_1(\alpha|\beta|z)$ أو نسميها دوال كيمار $M(\alpha|\beta|z)$ من النوع الأول حيث

$$(65) \quad {}_1F_1(\alpha|\beta|z) = 1 + \frac{\alpha z}{\beta 1!} + \frac{\alpha(\alpha+1) z^2}{\beta(\beta+1) 2!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta+n)} \frac{z^n}{n!}$$

حيث Γ هي دالة غاما (Gamma function). وتمتاز هذه السلسلة بمجموعة من الخواص، منها أنه إذا كان β عددا صحيحا موجبا أكبر من 1، أي $(\beta = 2, 3, \dots)$ ، فإنه يوجد الحل ${}_1F_1(\alpha|\beta|z)$ فقط. لكن أهم خاصية هي التالية

• إذا كان $\alpha = -k$ ، حيث k عدد صحيح موجب ($k = 0, 1, 2, \dots$)، فإن السلسلة ${}_1F_1(\alpha|\beta|z)$ عبارة عن كثير حدود درجته k .

³ انظر لخصائص حلول هذه المعادلة التفاضلية في الملحق الرياضي الموجود في آخر هذا الفصل.

• إذا كان $\alpha \neq -k$ ، فإن ${}_1F_1(\alpha|\beta|z)$ تملك نقطة تفرد في اللانهاية، أي أنها لانهائية عند اللانهاية.

وبالتالي فإن الحالة الموافقة للشرط $\alpha \neq -k$ ليست مقبولة، وسنحتفظ فقط بتلك التي تحقق الشرط $\alpha = -k$ بالعودة إلى معادلتنا التفاضلية (63) فإن الحل المقبول إذن هو

$$(66) \quad y_{k\ell}(x) = {}_1F_1(\ell + 1 - \eta_{k\ell}^{-1} | 2\ell + 2 | x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\ell + 1 - \eta_{k\ell}^{-1} + n) \Gamma(2\ell + 2) x^n}{\Gamma(\ell + 1 - \eta_{k\ell}^{-1}) \Gamma(2\ell + 2 + n) n!}$$

بحيث يتحقق الشرط التالي

$$(67) \quad \ell + 1 - \eta_{k\ell}^{-1} = -k ; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

والذي يمكن كتابته أيضا كما يلي

$$(68) \quad \eta_{k\ell}^{-1} = k + \ell + 1 = n ; \quad n = 1, 2, \dots$$

فالحل $y_{k\ell}(x)$ سيكون إذن عبارة عن كثير حدود درجته k . في الحقيقة، ليس إلا كثير حدود لاغير المعمم Generalized Laguerre polynomial الذي نرسم له $L_k^p(z)$ الذي تعطى عبارته كما يلي⁴

$$(69) \quad \begin{cases} L_k^p(z) = (-1)^p \frac{d^p}{dz^p} L_{k+p}^0(z) \\ L_k^0(z) = L_k(z) = e^z \frac{d^k}{dz^k} (z^k e^{-z}) \end{cases}$$

كما يمكن كتابة عبارة كثيرات حدود Laguerre المعممة بشكل صريح كما يلي

$$(70) \quad L_k^p(z) = \sum_{s=0}^k (-1)^s \frac{[(k+p)!]^2}{(k-s)! (p+s)! s!} z^s$$

حيث يكون لدينا في الحالة الخاصة

$$(71) \quad L_0^p(z) = p!$$

وتكون علاقته بالسلسلة فوق الهندسية ${}_1F_1(-k|2\ell + 2|z)$ في حالتنا هنا هي

$$(72) \quad {}_1F_1(-k|2\ell + 2|z) = \frac{k! (2\ell + 1)!}{[(k + 2\ell + 1)!]^2} L_k^{2\ell+1}(z)$$

وفي الحقيقة إن عامل التناسب بينهما ليس ذا أهمية لأننا سنبحث عن حلول مقننة فيمكن الاستغناء عنه، ولكن لا بأس بمواصلة كتابته إلى حين البحث عن ثابت التقنين فيما بعد. وبالتالي فإنه حسب (66) يكون

$$(73) \quad y_{k\ell}(x) = \frac{k! (2\ell + 1)!}{[(k + 2\ell + 1)!]^2} L_k^{2\ell+1}(x)$$

وبالعودة إلى الحل $u_{k\ell}(r)$ ، فباستعمال (52) و (60) و (62) و (68) و (73) فإننا نجد

$$(74) \quad u_{k\ell}(r) = \frac{k! (2\ell + 1)!}{[(k + 2\ell + 1)!]^2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^{\ell+1} \exp\left[-\frac{r}{(k + \ell + 1)a_0}\right] L_k^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{(k + \ell + 1)a_0}\right)$$

والتي ستمكننا من كتابة الجزء القطري $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ بالاعتماد على العلاقة (13). لكن سيكون من الأفضل استبدال العدد الكمي القطري k بالعدد الكمي الجديد n المعطى بالعلاقة (68) ونكتب إذن

⁴ تختلف عبارة كثيرات حدود Laguerre المعممة من كتاب إلى آخر، ولكن يمكن الربط بينها بسهولة. سنعمل ذلك فيما بعد.

$$(75) \quad \mathcal{R}_{n\ell}(r) = \frac{u_{n\ell}(r)}{r}$$

وبالتالي يكون حسب (74)

$$(76) \quad \mathcal{R}_{n\ell}(r) = N \frac{C_{n\ell}}{\left(\frac{n}{2}\right)^\ell \frac{(n-\ell-1)!(2\ell+1)!}{a_0[(n+\ell)!]^2}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

حيث أن N هو ثابت التقنين للجزء القطري $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ الذي يجب أن يحقق شرط التقنين (12). ولتبسيط الحساب استبدلناه بالثابت $C_{n\ell}$ بحيث نضم كل الثوابت الأخرى ونكتب إذن

$$(77) \quad \mathcal{R}_{n\ell}(r) = C_{n\ell} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

وحتى نحدد قيمة الثابت ننطلق من شرط التقنين (12) الذي نكتبه على الشكل المبسط التالي

$$(78) \quad \int_0^\infty |\mathcal{R}_{n\ell}(z)|^2 z^2 dz = \left(\frac{2}{na_0}\right)^3$$

حيث وضعنا

$$(79) \quad z = \frac{2r}{na_0}$$

وبالتالي فحسب (77) و (78) يصبح شرط التقنين كما يلي

$$(80) \quad |C_{n\ell}|^2 \int_0^\infty z^{2\ell+2} \exp(-z) [L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(z)]^2 dz = \left(\frac{2}{na_0}\right)^3$$

وباستعمال علاقة التقنين لكثيرات حدود Laguerre المعممة التالية []

$$(81) \quad \int_0^\infty z^{2\ell+2} \exp(-z) [L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(z)]^2 dz = \frac{2n[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}$$

سنجد إذن أن

$$(82) \quad C_{n\ell} = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}}$$

حيث تم اختيار ثابت التقنين عددا حقيقيا. وبالتالي فإن العبارة المقننة للجزء القطري $\mathcal{R}_{n\ell}(r)$ حسب (77) هي

$$(83) \quad \mathcal{R}_{n\ell}(r) = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

توجد عبارات مختلفة لهذه الحلول القطرية في كتب أخرى لميكانيك الكم والفيزياء الذرية، وذلك راجع إلى الاختلاف في اختيار عبارة كثيرات حدود Laguerre المعممة. فإذا أخذنا مثلا التعريف البديل التالي⁵

⁵ وفي هذه الحالة ستكون العلاقة بين كثيرات الحدود المعرفة في (69) وتلك $\tilde{L}_k^p(x)$ المعرفة في (84) هي $L_k^p(z) = (-1)^p \tilde{L}_{k+p}^p(z)$ أو $\tilde{L}_k^p(z) = (-1)^p L_{k-p}^p(z)$

حيث نلاحظ بسهولة أن

$$L_0^p(z) = p! \quad \text{و} \quad \tilde{L}_0^p(z) = 0$$

$$(84) \quad \begin{cases} \tilde{L}_{k'}^{p'}(z) = \frac{d^{p'}}{dx^{p'}} \tilde{L}_{k'}^0(z) \\ \tilde{L}_{k'}^0(z) = \tilde{L}_{k'}(z) = e^z \frac{d^{k'}}{dz^{k'}} (z^{k'} e^{-z}) \end{cases}$$

بحيث كتبنا فوقها المد \tilde{L} فقط للتمييز بين التعريفين (69) و (84). فبينما يحتفظ كثير الحدود $\tilde{L}_{k'}^0(z)$ بنفس التعريف كما في (69) الخاص ب $L_k^0(z)$ ، نجد أن تعريف $\tilde{L}_{k'}^{p'}(z)$ مختلف عن تعريف $L_k^p(z)$ وبهذا التعريف الجديد (84) لكثيرات حدود Laguerre المعممة تعمل كثير من الكتب التي تعالج مسألة ذرة الهيدروجين وشبهاتها، ولذلك فإن عبارة الدوال القطرية فيها ستأخذ الشكل الآخر المكافئ

$$(85) \quad \mathcal{R}_{n\ell}(r) = - \left(\frac{2}{na_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) \tilde{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

يجب أن نلاحظ من خلال التعريف (84) أن $\tilde{L}_{k'}^{p'}(z)$ هو كثير حدود درجته $(k' - p')$ (لأننا نشق p' مرة كثير الحدود $\tilde{L}_{k'}^0(z)$ الذي درجته k'). أما في التعريف (69) فإن $L_k^p(z)$ هو كثير حدود درجته k . ولذلك فإن $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(z)$ المكتوب في (83) و $\tilde{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(z)$ يمثلان كثير حدود له نفس الدرجة، أي كثير حدود درجته $(n - \ell - 1)$.

كما توجد كتب أخرى تأخذ بالتعريف التالي لكثيرات حدود Laguerre والتي سنرمز لها $\bar{L}_k^p(z)$ لتمييزها عن كثيرات الحدود السابقة حيث

$$(86) \quad \begin{cases} \bar{L}_k^p(z) = (-1)^p \frac{d^p}{dz^p} \bar{L}_{k+p}^0(z) \\ \bar{L}_k^0(z) = \bar{L}_k(z) = \frac{1}{k!} e^z \frac{d^k}{dz^k} (z^k e^{-z}) \end{cases}$$

حيث يحتفظ كثير الحدود المعمم $\bar{L}_k^p(z)$ بنفس تعريف $L_k^p(z)$ في (69)، بينما يكون تعريف كثير الحدود $\bar{L}_k^0(z)$ مختلفاً عن $L_k^0(z)$ الذي عرفناه أيضاً في (69). وبالتالي فإن عبارة الدوال القطرية سنجدتها في هذه الكتب تكتب كالتالي

$$(87) \quad \mathcal{R}_{n\ell}(r) = \left(\frac{2}{na_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) \bar{L}_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

نعطي هنا بعض العبارات الصريحة الأولى لهذه الدوال القطرية

ونتحصل في حالتنا هذه على العلاقة التالية

$$L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(z) = (-1)^{2\ell+1} \bar{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(z) = -\bar{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(z)$$

ولذلك فإن العبارة (81) لا تتغير بالنسبة لكثيرات الحدود $\bar{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(z)$ ، ونكتبها

$$\int_0^\infty z^{2\ell+2} \exp(-z) [\bar{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(z)]^2 dz = \frac{2n[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}$$

وبالتالي نتحصل على نفس ثابت التقنين $C_{n\ell}$ كما في (82).

⁶ نلاحظ من خلال التعريفين (69) و (86) أن العلاقة بين $L_k^0(z)$ و $\bar{L}_k^0(z)$ هي

$$\bar{L}_k^0(z) = \frac{1}{k!} L_k^0(z) \quad \text{أو} \quad L_k^0(z) = k! \bar{L}_k^0(z)$$

وبالتالي فإننا نجد العلاقة بين كثيرات الحدود المعممة $L_k^p(z)$ و $\bar{L}_k^p(z)$ هي

$$\bar{L}_k^p(z) = \frac{1}{(p+k)!} L_k^p(z) \quad \text{أو} \quad L_k^p(z) = (p+k)! \bar{L}_k^p(z)$$

حيث نلاحظ بسهولة أن

$$L_0^p(z) = p! \quad \text{و} \quad \bar{L}_0^p(z) = 1$$

وفي هذه الحالة فإن عبارة التكامل (81) تتغير لتصبح

$$\int_0^\infty z^{2\ell+2} \exp(-z) [\bar{L}_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(z)]^2 dz = \frac{2n[(n+\ell)!]}{(n-\ell-1)!}$$

The first few radial wave functions $R_{nl}(r)$ of the hydrogen atom.

$$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{2a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$R_{31}(r) = \frac{8}{9\sqrt{6a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) \left(\frac{r}{3a_0}\right) e^{-r/3a_0}$$

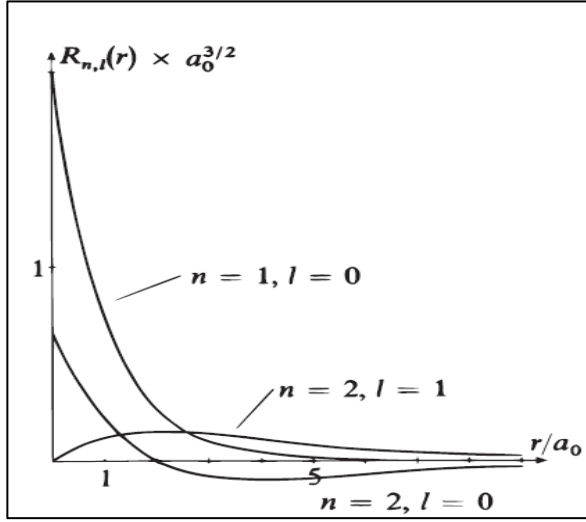
$$R_{30}(r) = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$$

$$R_{32}(r) = \frac{4}{9\sqrt{30a_0^3}} \left(\frac{r}{3a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$$

يمكن أن نلاحظ من خلال هاته العبارات الصريحة أن الدوال القطرية التي توافق القيم $\ell \neq 0$ تنعدم عند المبدأ، بينما تلك التي توافق الطبقات الفرعية ns ، أي التي يكون من أجلها $\ell = 0$ ، تأخذ قيمة غير مهملة عند المبدأ. في الحقيقة لقد رأينا السلوك التقريبي للحلول $u_{k\ell}(r)$ بجوار الصفر في العلاقة (57)، والتي تقود حسب (75) إلى أن السلوك التقريبي للدوال القطرية بجوار المبدأ هو

(88)

$$\mathcal{R}_{n\ell}(r) \sim r^\ell$$



وبالتالي فإن الحالات التي تنتمي إلى الطبقات الفرعية ns ($\ell = 0$) هي فقط التي يكون من أجلها احتمال الوجود للإلكترون غير معدوم. إن هذه الحقيقة لها علاقة بظاهرة أسرار الإلكترونات من طرف الأنوية الخاصة ببعض الذرات، كما له علاقة بالبنية فوق الدقيقة للخطوط الطيفية.

يمكن ملاحظة سلوك الدوال القطرية الشكل المقابل حيث نلاحظ مثلا أن $\mathcal{R}_{21}(r)$ يمثل قيمة مهمة لاحتمال وجود الإلكترون بجوار المبدأ على عكس $\mathcal{R}_{20}(r)$ أو $\mathcal{R}_{10}(r)$. سنعود لدراسة الدوال الموجية لذرة الهيدروجين بعد دراسة المستويات الطاقوية المختلفة لها ودرجة انحلالها.

4.2.4 مستويات طاقة ذرة الهيدروجين

1.4.2.4 المستويات الطاقوية

إن اختيار حلول المعادلة القطرية بحيث تكون مقبولة فيزيائيا أوصلنا إلى الشرط (68) والذي سيعطي لنا قيم الطاقة المختلفة للإلكترون، أي يمكننا من تكميم المستويات الطاقوية لذرة الهيدروجين لأن الوسيط $\eta_{k\ell}$ متعلق بهذه القيم كما نرى من العلاقة (53) والتي بتعويضها في (68) نجد أن

$$(89) \quad E_{k\ell} = -\frac{1}{(k + \ell + 1)^2} E_I$$

نلاحظ أن قيم الطاقة $E_{k\ell}$ تتعلق بالمجموع $(k + \ell)$ فقط، ولذلك يمكن كتابتها بدلالة الدليل $n = k + \ell + 1$ لتأخذ الصورة البسيطة

$$(90) \quad E_n = -\frac{1}{n^2} E_I ; n = 1, 2, 3$$

ونسمي العدد الجديد n بالعدد الكمي الرئيسي principal quantum number. وهي نفس عبارة مستويات الطاقة التي نتحصل عليها باستعمال نموذج بور كما في (49).

2.4.2.4 درجة انحلال المستويات الطاقوية

لاشك أن هاته المستويات الطاقوية منحلة، لأننا نعلم على الأقل أنها غير متعلقة بالعدد الكمي المغناطيسي المداري m وبالتالي فإنه من أجل كل قيمة للعدد الكمي المداري ℓ توجد $(2\ell + 1)$ حالة لها نفس الطاقة. وهذا الانحلال يسمى بالانحلال الأساسي «essential degeneracy». لكن

يمكن أن تُصادف أيضا نفس قيمة الطاقة $E_{k\ell} = E_{k'\ell'}$ من أجل ثنائيتين مختلفتين (k, ℓ) و (k', ℓ') بحيث يكون مجموع كل عددين من نفس الثنائية متساويا مع الآخر، أي $k + \ell = k' + \ell'$ ، لأن المستويات الطاقوية متعلقة بمجموعهما فقط حسب (89)، إن هذا الانحلال يسمى بالانحلال العَرَضِي أو الانحلال الحادث «accidental degeneracy». في الحقيقة، إن عدد القيم التي يأخذها ℓ تتعلق بالعدد الكمي الرئيسي n ، فحسب (68) فإنه من أجل كل قيمة للعدد الرئيسي n فإن القيم الممكنة للعدد ℓ هي n قيمة بحيث

$$(91) \quad \ell = n - k - 1 \Rightarrow \ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

إن كل قيمة للعدد الكمي الرئيسي n تميز "طبقة إلكترونية" معينة وكل طبقة إلكترونية تحتوي على طبقات فرعية عددها n ، وكل واحدة من هذه الطبقات الفرعية يُميزها العدد الكمي المداري ℓ والتي ستحتوي إذن على $(2\ell + 1)$ حالة كمومية. فعدد الطبقات الفرعية يوافق الانحلال العَرَضِي وعدد الحالات لكل طبقة فرعية يوافق الانحلال الأساسي. وبالتالي فإن درجة انحلال كل مستوى طاقي E_n هو

$$(92) \quad g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$$

أما إذا أخذنا في الحسبان درجات حرية السبين s الذي يقابله من أجل $(2s + 1)$ من أجل كل قيمة s ، فإننا سنتحصل بالنسبة للالكترون، الذي سبينه يساوي نصف $s = 1/2$ ، على حالتين إضافيتين من أجل حالة كمومية مدارية ممكنة. وبالتالي فإن درجة الانحلال الفعلية للمستويات الطاقوية لذرة الهيدروجين هي

$$(93) \quad g_n = 2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2n^2$$

فمثلا من أجل الطاقة E_3 التي ستكون منحلّة 9 مرات هناك طبقة إلكترونية تحتوي على ثلاث طبقات فرعية، الطبقة الفرعية الأولى $\ell = 0$ تحتوي على حالتين كموميتين، والطبقة الفرعية الثانية $\ell = 1$ تحتوي على ست حالات كمومية، والطبقة الفرعية الثالثة $\ell = 2$ ستحتوي على عشر حالات كمومية.

3.4.2.4 الترميز المطيافي للطبقات الإلكترونية وطبقاتها الفرعية

جرت العادة في علم المطيافية الذي يدرس أطيايف الإصدار والامتصاص لمختلف العناصر (ذرات أو جزيئات أو أيونات أو غيرها) أن يرفق بكل خط طيفي حرف لاتيني. واتباعا لهذا الاصطلاح سترفق بكل قيمة للعدد الكمي المداري ℓ حرفا لاتينيا يميز الطبقة الفرعية الموافقة له ونكتب

$$(94) \quad \begin{array}{cccccc} \text{قيم العدد الكمي } \ell & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \dots \\ \text{الحرف اللاتيني الموافق للطبقة الفرعية} & s & p & d & f & g & h \end{array}$$

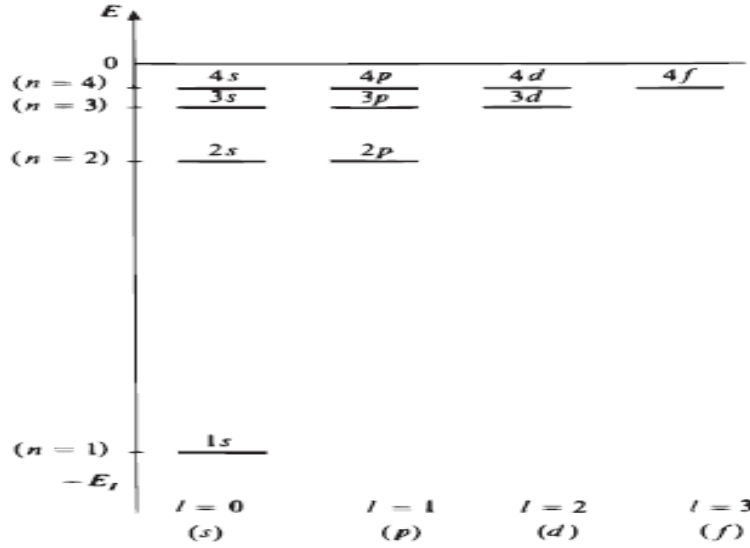
كما تُميز عادة الطبقات الإلكترونية أيضا بحروف لاتينية بحيث

$$(95) \quad \begin{array}{cccc} \text{قيم العدد الكمي } n & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \dots \\ \text{الحرف اللاتيني الموافق للطبقة الإلكترونية} & K & L & M & N \end{array}$$

وبالتالي سيكون الترميز المطيافي بحيث نشير إلى طبقة فرعية بكتابة العدد الكمي الرئيسي n الذي تنتهي إليه الطبقة الفرعية أولا، ثم نكتب الحرف اللاتيني الموافق لهذه الطبقة الفرعية المميزة بالعدد ℓ . فنرمز مثلا للمستوى الأساسي الذي ينتهي إلى الطبقة الإلكترونية K بالكتابة $1s$. بينما نشير إلى الحالات المثارة الأولى الموجودة في الطبقة الإلكترونية L بالكتابة $2s$ و $2p$. وهكذا بالنسبة لبقية الطبقات الإلكترونية وطبقاتها الفرعية.

4.4.2.4 مخطط مستويات طاقة ذرة الهيدروجين

بالاعتماد على عبارة الطاقة (90) وكذا الترميز المطيا في مختلف هذه المستويات الطاقوية فإنه يمكن أن نعتد المخطط التالي هذه المستويات يكون كما في الشكل أسفله.



حيث يمكننا رؤية الانحلال العارض لمستويات الطاقة بين الطبقات الفرعية المختلفة لكنها منتمية لنفس الطبقة الالكترونية مثل الطبقتين الفرعيتين $(2s, 2p)$ المنتميتين للطبقة الالكترونية $L(n=2)$ كما في الشكل. لكن انحلال الطبقة الفرعية $2p$ الذي يساوي ثلاثة أو ستة بدون حساب السبين أو بحسابه على الترتيب فهو انحلال أساسي،، وأيضاً الطبقات الفرعية $(4s, 4p, 4d, 4f)$ المنتمية للطبقة الالكترونية $N(n=4)$ وهكذا.

5.2.4 الدوال الموجية للحالات المرتبطة لذرة الهيدروجين

بما أن قيم الطاقة (90) منحلة n^2 مرة⁷، فإن الدوال الموجية المرافقة لها في شكلها العام كتكيب خطي للدوال $\varphi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$ المستقلة خطياً والتي عددها n^2 . فمن أجل كل حالة كمومية محددة جيداً بالأعداد الكمومية (n, ℓ, m) فإن دالة الموجة $\varphi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$ ، والتي هي دالة ذاتية مشتركة لمجموعة الملاحظات $\{H, L^2, L_z\}$ ، تكتب حسب النتائج (9) و (83) كما يلي

$$(96) \quad \varphi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = C_{n\ell} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

حيث تم الاستغناء عن العدد الكمي القطري k لصالح العدد الكمي الرئيسي n . وبما أن معرفة الثلاثية (n, ℓ, m) تكفي لتحديد دالة الموجة بصورة وحيدة في فضاء الحالات المدارية فإن المجموعة $\{H, L^2, L_z\}$ تشكل مجموعة تامة من الملاحظات المتبادلة، لأن الأعداد (n, ℓ, m) مرتبطة بالقيم الذاتية لهذه الملاحظات التي بقياسها نستطيع تحضير الحالة الكمومية المرغوبة. نعطي في الجدول التالي بعض العبارات الصريحة لدوال الموجة المرافقة للمستويات الطاقوية الأولى لذرة الهيدروجين.

⁷ لا تأخذ درجة حرية السبين في الاعتبار هنا للتبسيط.

الدالة الموجية المرافقة $\varphi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$	الطبقة الفرعية
$\varphi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi) = \varphi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{(-r/a_0)}$	الطبقة الفرعية 1s
$\varphi_{2,0,0}(r, \theta, \varphi) = \varphi_{2,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{(-r/2a_0)}$	الطبقة الفرعية 2s
$\varphi_{2,1,1}(r, \theta, \varphi) = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{(-r/2a_0)} \sin \theta e^{i\varphi}$	الطبقة الفرعية 2p
$\varphi_{2,1,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{(-r/2a_0)} \cos \theta$	
$\varphi_{2,1,-1}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{(-r/2a_0)} \sin \theta e^{-i\varphi}$	

5. الدراسة الكمومية لهزاز توافقي ثلاثي البعد

تُعتبر دراسة مسألة الهزاز التوافقي من بين المسائل القليلة التي لها حل دقيق في ميكانيك الكم سواء كانت في بعد واحد أو في أبعاد كثيرة. فالمعالجة الكمومية لهذه المسألة في الإحداثيات الكارتيزية يمكن ردها بسهولة إلى دراسة مسألة هزاز توافقي في بعد واحد لأننا نستطيع فصل هذه المتغيرات الكارتيزية عن بعضها، كما أن دراسة الهزاز التوافقي في بعد واحد تعتبر من المسائل البسيطة التي تُتناول في بدايات دراسة ميكانيك الكم. لا شك أن قدرتنا على فصل المتغيرات في مسألة الهزاز التوافقي متعدد الأبعاد يمكّننا من معالجة كل بعد وحده واعتبار فضاء الحالات الكلي كجاء تنسوري لفضاءات الحالات الجزئية المرفقة بكل بعد من الأبعاد والتي يكون الهاملتوني الجزئي الخاص بذلك البعد عبارة عن ثابت حركة، كما أنه يشكل لوحده مجموعة تامة من الملاحظات المتبادلة في الفضاء الجزئي المرفق. كما أن الهاملتوني الكلي سيكون عبارة عن مجموع هذه الهاملتونيات التي تكوّن مع بعضها في الفضاء الكلي مجموعة تامة من الملاحظات المتبادلة.

وفي الحالة الخاصة التي يكون فيها الهزاز التوافقي متمائل المناحي في ثلاثة أبعاد، فهو هنا أيضا أحد النماذج عن الجسيم الخاضع لكمون مركزي. في الحقيقة، بسبب تماثل نبض كمون الجذب التوافقي في أبعاده الثلاثة فإنه يمكن اعتباره ككمون لا يتعلق إلا ببعد الجسيم عن المبدأ. ولذلك يمكننا أن نطبق عليه الطريقة العامة لمعالجة هذه الكمونات المركزية كما وضحناها في الفقرة الثانية من هذا الفصل، والتي أخذنا فيها المجموع التامة من الملاحظات المتبادلة لتكون الهاملتوني الكلي للجسيم ومربع العزم الحركي المداري وأحد مساقط هذا الأخير على احد المحاور الكارتيزية، والذي يُختار عادة المحور (Oz) . وهي ثابت الحركة في هذه الحالة وهي مجموعة بديلة عن مجموعة الهاملتونيات الجزئية التي تستعمل في الإحداثيات الكارتيزية. وكل مجموعة من الدوال الذاتية الخاصة بمجموعة ما تعتبر قاعدة لفضاء الحالات الكلي كما أنه يمكن الربط بينهما كما سنرى في نهاية هذه الفقرة. ولذلك نود أولاً أن نذكر بأهم نتائج المعالجة الكمومية للهزاز التوافقي في الإحداثيات الكارتيزية. لنمر بعد ذلك إلى الحل في الإحداثيات الكروية التي ستمكّننا من فصل الإحداثيات الزاوية عن القطرية.

1.5 دراسة الهزاز التوافقي في الإحداثيات الكارتيزية

1.1.5 تذكير بنتائج الهزاز التوافقي في بعد واحد

إن الهزاز التوافقي في بعد واحد، وليكن المحور (Ox) ، هو عبارة عن جسيم كتلته μ وخاضع إلى الكمون

$$(97) \quad V(x) = \frac{1}{2} \mu \omega_x^2 x^2$$

والذي تشتق منه قوة الارجاع $\mathbf{F} = -\mu \omega^2 x \mathbf{i}$ التي تعمل على إعادة الجسم إلى مركز توازنه. إن البحث عن القيم الذاتية لهاملتوني هذا الجسيم الذي عبارته

$$(98) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \mu \omega_x^2 x^2$$

يعطي لنا القيم המקومة لطاقته والتي تُكتب كما يلي

$$(99) \quad E_{n_x} = \hbar \left(n_x + \frac{1}{2} \right); \quad n_x = 0, 1, 2, \dots$$

بحيث أن الدوال الموجية الذاتية المرفقة بهذه القيم هي

$$(100) \quad \varphi_{n_x}(x) = (a_x^2 \pi)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x!}} e^{-x^2/2a_x^2} H_{n_x} \left(\frac{x}{a_x} \right)$$

حيث $a_x = \sqrt{\hbar/\mu\omega_x}$ هو طول مميز لأبعاد الهزاز التوافقي أحادي البعد تماما كما يميز نصف قطر بور a_0 الأبعاد الذرية. بينما الدوال $H_n(z)$ هي كثيرات حدود هرميت Hermite polynomial من الدرجة n التي عبارتها

$$(101) \quad H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$$

إن الدوال $\varphi_n(x)$ تشكل قاعدة في فضاء الحالات المدارية للجسيم ذي البعد الواحد. كما أن جميع قيم الطاقة (99) غير منحلة، إلا إذا أخذنا سبين الجسيم في الحسبان.

2.1.5 تذكير بنتائج الهزاز التوافقي في ثلاثة أبعاد

كما ذكرنا في بداية هذه الفقرة، فإن أبعاد الهزاز التوافقي غير مهمة في معالجة المسألة معالجة دقيقة ما دمنا قادرين على فصل المتغيرات في الاحداثيات الكارتيزية كما سنرى. ولكن سندرس فقط المسألة في ثلاثة أبعاد لأن تعميمها سيكون بسيطا. فالجسيم في هذه الحالة إذن سيكون خاضعا إلى الكمون

$$(102) \quad V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mu (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

فإن كان الهزاز متمائل المناحي، أي $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ ، فإن الكمون (102) يصبح

$$(103) \quad V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 \mathbf{r}^2$$

إن فضاء الحالات المدارية الكلي ما هو إلا الجداء التنسوري للفضاءات الجزئية الخاصة بكل بعد من الأبعاد الثلاثة. وبالتالي فإن هاملتوني هذا الجسيم يمكن اعتباره كمجموع ثلاثة مؤثرات هاملتونية كل واحد منها خاص ببعد معين ونكتبه كما يلي

$$(104) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \mathbf{r}^2 = H_x + H_y + H_z$$

إن كل هاملتوني من هذه الهاملتونيات الجزئية يعتبر ثابت حركة في فضائه الجزئي، كما أن المجموعة $\{H_x, H_y, H_z\}$ تشكل مجموعة تامة من الملاحظات المتبادلة.

حسب (99) و (104) فإن الطاقة الكلية لهذا الهزاز التوافقي ذو الأبعاد الثلاثة ماهي إلا مجموع الطاقات الموافقة لكل بعد، ويكون بالتالي⁸

$$(105) \quad E_n = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \hbar \omega \left(n + \frac{3}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

حيث وضعنا

$$(106) \quad n = n_x + n_y + n_z$$

من الواضح من خلال (106) أن مستويات الطاقة E_n منحلة، ويمكن حساب درجة انحلالها فنجد

⁸ فإن كان الكمون غير متمائل المناحي فإن عبارة الطاقة في هذه الحالة هي

$$E_n = \hbar \left(n_x \omega_x + n_y \omega_y + n_z \omega_z + \frac{3}{2} \right); \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

$$(107) \quad g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

كما أن دالة الموجة المرفقة بثلاثية معينة من الأعداد الكمومية (n_x, n_y, n_z) ستكون عبارة عن جداء دوال الموجة الخاصة بكل بعد كذلك التي أعطينا عباراتها في بعد واحد (100)، إذن

$$(108) \quad \varphi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = (a^2\pi)^{-3/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x! n_y! n_z!}} e^{-r^2/2a^2} H_{n_x}\left(\frac{x}{a}\right) H_{n_y}\left(\frac{y}{a}\right) H_{n_z}\left(\frac{z}{a}\right)$$

حيث

$$(109) \quad a = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$$

إن مجموعة الدوال $\{\varphi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r})\}$ تشكل قاعدة لفضاء الحالات الكلي. وسنربط بينها وبين القاعدة الأخرى التي سننشئها بمعالجة نفس المسألة في الإحداثيات الكروية كمسألة جسيم في كمون مركزي.

2.5 دراسة الهزاز التوافقي متماثل المناحي في الإحداثيات الكروية

1.2.5 معادلة شرودينغر للهزاز التوافقي متماثل المناحي في الإحداثيات الكروية

نلاحظ من خلال عبارة كمون الهزاز التوافقي (102) أنه إذا لم يكن هذا الهزاز متماثل المناحي، فإن الكمون لا يمكن اعتباره كمون مركزي لأنه سيتعلق أيضا باتجاه حركة الجسيم في الفضاء وليس ببعده عن المبدأ فقط. ولذلك نشير هنا إلى أن معالجته كمسألة جسيم خاضع لكمون مركزي لا تكون صالحة إلا إذا كان كمونه متماثل المناحي، وفي هذه الحالة سيمكننا كتابته كما فعلنا في (103)، أو من جديد

$$(110) \quad V(\mathbf{r}) = V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

وهو كمون ذو تناظر كروي، ولذلك فإن عبارة هاملتوني هذا الهزاز تُكتب في الإحداثيات الكروية، كما فعلنا ذلك في المعادلة (4). لكن في حالتنا هنا تصبح كما يلي

$$(111) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

وبالتالي فإن معادلة شرودينغر في هذه الحالة تأخذ الشكل التالي

$$(112) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \right) \varphi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi) = E \varphi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi)$$

حيث أن دوال الموجة $\varphi_{k\ell m}$ تكتب بعد فصل المتغيرات الزاوية عن القطرية كما في العلاقة (9). يبقى فقط البحث عن الجزء القطري $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ إن المعادلة القطرية المستخرجة من (112) يمكن أن نكتبها حسب (14) كما يلي

$$(113) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \right) u_{k\ell}(r) = E_{k\ell} u_{k\ell}(r)$$

والتي يجب أن يرافقها شرط انعدام الحلول $u_{k\ell}(r)$ عند مركز الكمون. حيث نُذكر هنا أن $u_{k\ell}(r) = r \mathcal{R}_{k\ell}(r)$. نلاحظ في شكل هذه المعادلة أنه من أجل $\ell = 0$ أنها تصبح معادلة هزاز توافقي في بعد واحد.

2.2.5 المعادلة القطرية والسلوك التقريبي للحلول

قبل المرور إلى حلول هذه المعادلة القطرية، نجري بعض التحويلات عليها حتى تتخذ شكلا بسيطا ونتخلص من المقادير ذات الأبعاد الفيزيائية لتتعامل مع معادلة بدون أبعاد حيث سنقوم بتقدير البعد r بوحدة الطول المميز للهزاز التوافقي a المعطى بالعلاقة (109) كما سنقوم بتقدير مستويات الطاقة $E_{k\ell}$ بالوحدات $\hbar\omega$ تبعا للعلاقة (105). فنكتب إذن

$$(114) \quad \rho = r/a$$

$$(115) \quad \varepsilon_{k\ell} = E_{k\ell}/\hbar\omega$$

فتصبح المعادلة (113) إذن كما يلي

$$(116) \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + 2\varepsilon_{k\ell} - \rho^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) u_{k\ell}(\rho) = 0$$

ندرس الآن السلوك التقريبي لحلول هذه المعادلة بجوار المبدأ وعند اللانهاية، وهو الأمر الذي سيعطينا فكرة عن التحويل المناسب للدوال $u_{k\ell}(\rho)$ حتى نتحصل على الحل النهائي الدقيق.

1.2.2.5 السلوك التقريبي بجوار الصفر

عندما يكون $\rho \sim 0$ فإن الحد المهيمن في المعادلة (116) هو الحد الذي يحتوي على ρ^{-2} ونتحصل على نفس المعادلة كما في (55) الخاصة بذرة الهيدروجين. وبالتالي فإن الحل المقبول سيكون أيضا مثل (57)، أي

$$(117) \quad \begin{aligned} u_{k\ell}(\rho) &\sim \rho^{\ell+1} \\ \rho &\sim 0 \end{aligned}$$

2.2.2.5 السلوك التقريبي عند اللانهاية

عندما يأخذ ρ قيمة كبيرة جدا فإن الحد المحتوي على ρ^{-2} في المعادلة (116) سهمل أمام الحد ρ^2 ولذلك فإن المعادلة القطرية ستكتب

$$(118) \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2 \right) u_{k\ell}(\rho) = 0$$

وهي معادلة لها سلوك مختلف عن تلك المعادلة (59) الخاصة بذرة الهيدروجين عند اللانهاية. إن حلّي هذه المعادلة هما $e^{-\rho^2/2}$ و $e^{+\rho^2/2}$. لا شك أن الحل الثاني منهما مرفوض لأنه لا متناهي عند اللانهاية، وبذلك يكون السلوك التقريبي للحلول عند اللانهاية هو

$$(119) \quad \begin{aligned} u_{k\ell}(\rho) &\sim e^{-\rho^2/2} \\ \rho &\sim \infty \end{aligned}$$

ولذلك فإن أي حل مقبول للمعادلة القطرية يجب أن يسلك بجوار المبدأ وعند اللانهاية نفس السلوك (117) و (119) على الترتيب.

3.2.5 حلول المعادلة القطرية للهزاز التوافقي

حتى نتحصل على حل المعادلة القطرية (116) سنقوم بتحويل الدالة $u_{k\ell}(\rho)$ إلى دالة أخرى $y_{k\ell}(\rho)$ بناء على العبارات التقريبية (117) و (119) فنكتب إذن

$$(120) \quad u_{k\ell}(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\rho^2/2} y_{k\ell}(\rho)$$

وبتعوّض هذا التحويل في (116) نجد

$$(121) \quad \left(\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - 2\rho^2) \frac{d}{d\rho} + (2\varepsilon_{k\ell} - 2\ell - 3)\rho \right) y_{k\ell}(\rho) = 0$$

ويمكن تحويل هذه المعادلة إلى معادلة لابلاس - كيمار Laplace - Kummer's equation وذلك إذا وضعنا

$$(122) \quad \xi = \rho^2$$

فيصبح شكل المعادلة (121) كما يلي

$$(123) \quad \left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + \left(\ell + \frac{3}{2} - \xi \right) \frac{d}{d\xi} - \left(\frac{2\ell + 3 - 2\varepsilon_{k\ell}}{4} \right) \right] y_{k\ell}(\xi) = 0$$

وهذه هي معادلة لابلاس - كيمار التي كتبنا شكلها العام في (64) حيث لدينا هنا

$$(124) \quad \begin{cases} \alpha = (2\ell + 3 - 2\varepsilon_{k\ell})/4 \\ \beta = \ell + \frac{3}{2} > 1 \end{cases}$$

كما أن حلولها المقبولة⁹ هي السلسلة فوق الهندسية ${}_1F_1(\alpha|\beta|\xi)$ ، أي أن

$$(125) \quad y_{k\ell}(\xi) = {}_1F_1(\alpha|\beta|\xi) = {}_1F_1\left(\frac{2\ell + 3 - 2\varepsilon_{k\ell}}{4} \middle| \ell + \frac{3}{2} \middle| \xi\right)$$

والتي يجب أن تحقق الشرط $\alpha = -k$ حتى تكون منتهية عند اللانهاية. وبالتالي فحسب (124) نجد شرط تكميم طاقة الهزاز

$$(126) \quad \frac{1}{4}(2\ell + 3 - 2\varepsilon_{k\ell}) = -k ; k = 0, 1, 2, \dots$$

أو يمكن كتابتها بشكل صريح كما يلي

$$(127) \quad \varepsilon_{k\ell} = 2k + \ell + \frac{3}{2}$$

نلاحظ من خلال هذه العبارة لمستويات طاقة الهزاز التوافقي تماثل المناحي أنها لا تتعلق سوى بمجموع الدليلين ℓ و k ، أي بالمجموع $(2k + \ell)$ فقط، وبالتالي سيمكننا استبداله، أي المجموع، بالعدد الكمي الرئيسي n الذي سنستخدمه بدلا من العدد الكمي المداري k حيث نضع

$$(128) \quad n = 2k + \ell \Rightarrow k = (n - \ell)/2$$

إن شرط تكميم مستويات الطاقة $\alpha = -k$ يجعل السلسلة فوق الهندسية ${}_1F_1(\alpha|\beta|\xi)$ عبارة عن كثير حدود درجته k . وفي الحقيقة ما هو إلا كثير حدود Laguerre المعمم الذي أعطينا تعريفه في (69)، كما أعطينا أيضا العلاقة بينه وبين السلسلة ${}_1F_1(\alpha|\beta|\xi)$ في (72)، والتي نعيد كتابتها في هذه الحالة على شكل تناسب كما يلي

$$(129) \quad {}_1F_1\left(-k \middle| \ell + \frac{3}{2} \middle| \xi\right) \propto L_k^{\ell+1/2}(\xi)$$

حيث لم نهتم بثابت التناسب لأننا في النهاية سنقوم بالبحث عن حلول مقننة وبالتالي لن يكون مفيدا كتابته هنا. ونكتب إذن حسب (122) و (125) و (129) أن

$$(130) \quad y_{k\ell}(\rho^2) \propto L_k^{\ell+1/2}(\rho^2)$$

وبالتالي فإن حلول المعادلة القطرية (113) ستكتب حسب العلاقات (114)، (120)، (122)، (130)، كما يلي

$$(131) \quad u_{k\ell}(r) \propto \left(\frac{r}{a}\right)^{\ell+1} e^{-r^2/2a^2} L_k^{\ell+1/2}\left(\frac{r^2}{a^2}\right)$$

أخيرا يمكن استخراج عبارة الجزء القطري $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ لدالة الموجة وذلك وفق علاقته بالحلول $u_{k\ell}(r)$.

$$(132) \quad \mathcal{R}_{k\ell}(r) = C_{k\ell} \left(\frac{r}{a}\right)^{\ell} e^{-r^2/2a^2} L_k^{\ell+1/2}\left(\frac{r^2}{a^2}\right)$$

حيث $C_{n\ell}$ ما هو إلا ثابت التقنين للجزء القطري $\mathcal{R}_{n\ell}(r)$. إن شرط التقنين (12) سيكتب كما يلي

$$(133) \quad \int_0^{\infty} |\mathcal{R}_{k\ell}(\xi)|^2 \sqrt{\xi} d\xi = 2a^{-3}$$

حيث $\xi = \rho^2 = r^2/a^2$ في (132) إذن بتعويض (132) في (133) نجد

⁹ حيث أن الحل الثاني ${}_1F_1(\beta - \alpha + 1 | 2 - \beta | \xi)^{1-\beta}$ لا متناهي بجوار الصفر.

$$(134) \quad |C_{k\ell}|^2 \int_0^\infty \xi^{\ell+\frac{1}{2}} e^{-\xi} \left(L_k^{\ell+\frac{1}{2}}(\xi) \right)^2 d\xi = 2a^{-3}$$

ولكن لدينا من شرط تعامد كثيرات حدود Laguerre النتيجة التالية

$$(135) \quad \int_0^\infty z^q e^{-z} [L_k^q(z)]^2 dz = \frac{[(k+q)!]^3}{k!}$$

وبتعويض نتيجة التكامل (135) في (134) نجد قيمة ثابت التقنين الذي سنختاره حقيقيا

$$(136) \quad C_{k\ell} = \sqrt{\frac{2}{a^3} \frac{k!}{\left[\left(k + \ell + \frac{1}{2} \right)! \right]^3}}$$

وبالتالي فإن عبارة الجزء القطري المقنن لدالة الموجة الخاصة بالهزاز التوافقي متماثل المناحي هي

$$(137) \quad \mathcal{R}_{k\ell}(r) = \sqrt{\frac{2}{a^3} \frac{k!}{\left[\left(k + \ell + \frac{1}{2} \right)! \right]^3}} \left(\frac{r}{a} \right)^\ell e^{-r^2/2a^2} L_k^{\ell+1/2} \left(\frac{r^2}{a^2} \right)$$

إن معالجة مسألة الهزاز التوافقي متماثل المناحي في الاحداثيات الكروية جد مهمة في الفيزياء النووية، لأن نموذج الطبقات يعتمد على تقريب كمون التفاعل الوسطي بين نوكلونات النواة إلى كمون هزاز توافقي، ويتم توزيع المستويات الطاقوية وفقا للأعداد الكمية (k, ℓ, m) بدلا من الأعداد الكمية (n_x, n_y, n_z) . ولكن عبارة الحلول القطرية $\mathcal{R}_{k\ell}(r)$ في كثير من كتب الفيزياء النووية تأخذ شكلا مختلفا قليلا عن العبارة (137) وذلك راجع أولا إلى العمل بالتعريف (86) لكثيرات حدود Laguerre. وفي هذه الحالة سيكون لدينا¹⁰

$$(138) \quad L_k^{\ell+1/2} \left(\frac{r^2}{a^2} \right) = \left(k + \ell + \frac{1}{2} \right)! \bar{L}_k^{\ell+1/2} \left(\frac{r^2}{a^2} \right)$$

وعند تعويضها في (137) نجد

$$(139) \quad \mathcal{R}_{k\ell}(r) = \sqrt{\frac{2}{a^3} \frac{k!}{\left(k + \ell + \frac{1}{2} \right)!}} \left(\frac{r}{a} \right)^\ell e^{-r^2/2a^2} \bar{L}_k^{\ell+1/2} \left(\frac{r^2}{a^2} \right)$$

كما أنه يمكن التخلص من العامل نصف الصحيح كما يلي¹¹

$$(140) \quad \left(k + \ell + \frac{1}{2} \right)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{(2k+2\ell+1)}} \frac{(2k+2\ell+1)!}{(k+\ell)!}$$

¹⁰ وبالتالي فإن شرط تعامد كثيرات حدود Laguerre (135) سيكون في هذه الحالة

$$\int_0^\infty z^q e^{-z} [L_k^q(z)]^2 dz = \frac{(k+q)!}{k!}$$

¹¹ باستعمال خواص دالة غاما Gamma لدينا

$$\Gamma(z+1)\Gamma\left(z+\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{(1+2z)}} \Gamma(2z+2)$$

والتي نستخرج منها

$$\left(z + \frac{1}{2} \right)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{(1+2z)}} \frac{(2z+1)!}{z!}$$

ويمكن استعمال عبارة العامل المضاعف لتبسيط هذه العلاقة أكثر فنجد¹²

$$(141) \quad \left(k + \ell + \frac{1}{2}\right)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{(k+\ell+1)}} (2k + 2\ell + 1)!!$$

وبتعبير (141) في (139) نجد

$$(142) \quad \mathcal{R}_{k\ell}(r) = \sqrt{\frac{2^{(k+\ell+2)}}{a^3 \sqrt{\pi}} \frac{k!}{(2k + 2\ell + 1)!!}} \left(\frac{r}{a}\right)^\ell e^{-r^2/2a^2} \bar{L}_k^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}\left(\frac{r^2}{a^2}\right)$$

بالعودة إلى عبارتنا (137)، فسيكون من الأفضل كتابتها باستخدام العدد الكمي الرئيسي n المعرف بالعلاقة (128) فنجد بعد التبسيط

$$(143) \quad \mathcal{R}_{n\ell}(r) = \sqrt{\left[\frac{2^{(n+\ell+\frac{4}{3})} ((n+\ell)/2)! [((n-\ell)/2)!]^{1/3}}{a\sqrt{\pi} (n+\ell+1)!}\right]^3} \left(\frac{r}{a}\right)^\ell e^{-r^2/2a^2} L_{\left(\frac{n-\ell}{2}\right)}^{\left(\frac{\ell+1}{2}\right)}\left(\frac{r^2}{a^2}\right)$$

والتي يمكننا منها استخراج العبارات الصريحة لهذه الدوال القطرية من أجل قيمتين معينتين للعدد n و ℓ . لكن قبل ذلك يجب أن نعرف ماهي هذه القيم الممكنة للعدد الكمي الرئيسي والمداري n و ℓ على الترتيب. فمن خلال (128) نستنتج أنه يجب يكون لهما نفس الزوجية، أي إذا كان n فرديا فإن ℓ يجب يكون فرديا، وإن كان n زوجيا فإن ℓ يجب يكون أيضا زوجيا. لأنهما إن اختلفا في الزوجية فلن تكون نتيجة k عددا صحيحا. في الحقيقة، إن القيم الممكنة للعدد ℓ من أجل عدد معين n هي¹³

$$(144) \quad \begin{cases} \ell = n, n-2, n-4, \dots, 2, 0 & \text{if } n \text{ (زوجي)} \\ \ell = n, n-2, n-4, \dots, 3, 1 & \text{if } n \text{ (فردى)} \end{cases}$$

ويمكن أن نضعها في جدول وفق قيم n كالتالي

n	0	1	2	3	4	5						
ℓ	0	1	0	2	1	3	0	2	4	1	3	5

بالاعتماد على العبارة (143) نكتب العبارات الصريحة للدوال القطرية الأولى للهرزاز التوافقي متمائل المناحي كما في الجدول أدناه.

¹² حسب تعريف العامل المضاعف لدينا

$$n! = n!! (n-1)!!$$

فإذا كان n عددا زوجيا، أي $n = 2p, p \geq 0$ فإن

$$n!! = 2^p p!$$

ويتطابقهما معا على الترتيب على $(2k + 2\ell + 1)!$ نجد

$$(2k + 2\ell + 1)! = (2k + 2\ell + 1)!! (2k + 2\ell)!! = (2k + 2\ell + 1)!! 2^{(k+\ell)} (k + \ell)!$$

¹³ لأن القيم الممكنة للعدد الكمي القطري k هي

$$\begin{cases} k = 0, 1, 2, \dots, \frac{n}{2} & \text{if } n \text{ (زوجي)} \\ k = 0, 1, 2, \dots, \frac{n-1}{2} & \text{if } n \text{ (فردى)} \end{cases}$$

وذلك حسب العلاقة $k = (n - \ell)/2 \geq 0$

الدالة القطرية $\mathcal{R}_{n\ell}(r)$ للهزاز التوافقي	قيم الثنائية (n, ℓ)
$\mathcal{R}_{0,0}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3\sqrt{\pi}}} e^{-r^2/2a^2}$	$(n = 0, \ell = 0)$
$\mathcal{R}_{1,1}(r) = \sqrt{\frac{8}{3a^5\sqrt{\pi}}} r e^{-r^2/2a^2}$	$(n = 1, \ell = 1)$
$\mathcal{R}_{2,0}(r) = \sqrt{\frac{8}{3a^3\sqrt{\pi}}} \left(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{a^2}\right) e^{-r^2/2a^2}$	$(n = 2, \ell = 0, 2)$
$\mathcal{R}_{2,2}(r) = \sqrt{\frac{16}{15a^7\sqrt{\pi}}} r^2 e^{-r^2/2a^2}$	

4.2.5 مستويات طاقة الهزاز التوافقي متماثل المناحي

1.4.2.5 المستويات الطاقوية

إن شرط قبول حلول المعادلة القطرية الخاصة بالهزاز التوافقي متماثل المناحي سمح لنا بالحصول على تكميم مستويات طاقة هذا الهزاز وذلك من خلال العلاقة (127) التي نكتبها بدلالة العدد الكمي الأساسي كما يلي

$$(145) \quad \varepsilon_n = n + \frac{3}{2}; n = 0, 1, 2, \dots$$

وبتعويض ε_n بعبارته (115) نجد

$$(146) \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2}\right); n = 0, 1, 2, \dots$$

وهي علاقة مشابهة لتلك التي حصلنا عليها في جملة الاحداثيات الكارتيزية كما تبينه العلاقة (106). إن أصغر قيمة لطاقة هذا الهزاز هي طاقة المستوى الأساسي $(3\hbar\omega/2)$ وتسمى بالطاقة صفر للهزاز. وهذا المستوى هو الوحيد غير المنحل، وجميع المستويات الأخرى منحلة ودرجة انحلالها هي كما تبينه (107) والتي سنثبتها في الفقرة التالية.¹⁴

2.4.2.5 درجة انحلال المستويات الطاقوية

لاحظنا من خلال العلاقة (128) أن زوجية العدد ℓ هي نفسها زوجية العدد n . أي من خلال (144) يمكن أن نكتب

¹⁴ إن عبارة مستويات الطاقة بدلالة العدد الكمي القطري k تكتب كما يلي

$$\varepsilon_{k\ell} = \hbar\omega \left(2k + \ell + \frac{3}{2}\right), k = 0, 1, 2, \dots$$

ولكننا ننبه هنا إلى أنها تكتب في كتب الفيزياء النووية على الصورة التالية

$$\varepsilon_{k\ell} = \hbar\omega \left(2(k' - 1) + \ell + \frac{3}{2}\right) = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2}\right), k' = 1, 2, \dots$$

حيث يتم عادة أخذ

$$N = 2(k' - 1) + \ell, N = 0, 1, 2, \dots$$

حيث يبدأ العدد الكمي القطري الجديد $(k' = k + 1)$ قيمة ابتداء من 1 وليس من الصفر كما في العلاقة السابقة. ويكون $N = n$.

$$(147) \quad \begin{cases} \ell = 2p ; p = 0, 1, 2, \dots, \frac{n}{2} & \text{if } n \text{ (زوجي)} \\ \ell = 2p + 1 ; p = 0, 1, 2, \dots, \frac{n-1}{2} & \text{if } n \text{ (فردى)} \end{cases}$$

كما نعلم أنه من أجل كل قيمة للعدد الكمي المداري ℓ توجد $(2\ell + 1)$ قيمة ممكنة للعدد الكمي المغناطيسي m . وهو ما يوافق الانحلال الذي سميناه انحلالاً أساسياً لأنه ناتج من صمود الهاملتوني تحت تأثير الدوران. كما أن هناك أيضاً انحلالات عارضة كما تبينه دائماً العلاقة (128). ومن أجل حساب درجة انحلال مستوى معين E_n نميز حالتين.

1- إذا كان n زوجي فإن عدد القيم الممكنة للعدد ℓ هي $(\frac{n}{2} + 1)$ قيمة، ومقابل كل قيمة هناك $(2\ell + 1)$ حالة ممكنة وبالتالي

$$(148) \quad g_n = \sum_{\ell=0,2,\dots,n} (2\ell + 1) = \sum_{p=0}^{n/2} (4p + 1) = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$$

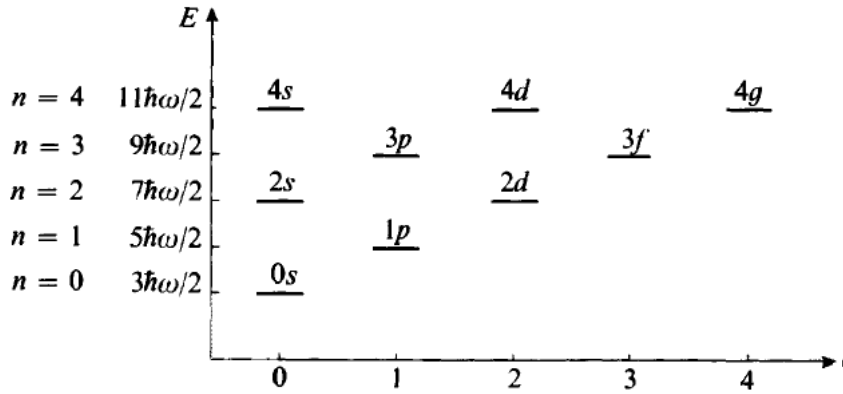
2- إذا كان n فردي فإن عدد القيم الممكنة للعدد ℓ هي $(\frac{n+1}{2})$ قيمة، ومقابل كل قيمة هناك $(2\ell + 1)$ حالة ممكنة وبالتالي

$$(149) \quad g_n = \sum_{\ell=1,3,\dots,n} (2\ell + 1) = \sum_{p=0}^{(n-1)/2} (4p + 3) = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$$

وبالتالي سواء كان العدد الكمي الرئيسي زوجياً أو فردياً فإننا نتحصل على نفس العبارة لدرجة انحلال مستوى ما. طبعاً إن أخذنا في الحسبان درجة حرية السبين فيكفي ضرب إحدى العلاقاتين (148) أو (149) بالعدد $(2S + 1)$ ، أي بالعدد 2 إن كنا نقصد فرميون سبينه نصف (مثل البروتون أو النيوترون). وهذا مهم حينما نريد تطبيق نتائج دراسة كمون الهزاز التوافقي تماثل المناحي لدراسة نموذج الطبقات للنواة الذرية.

3.4.2.5 مخطط مستويات طاقة الهزاز التوافقي تماثل المناحي

بالاحتفاظ بنفس الترميز المطيافي الذي ذكرناه في مسألة ذرة الهيدروجين، أي الترميز (94). يمكن أن نعطي مخططاً لمستويات الطاقة (146) كما يوضحه الشكل أسفله.



أين يمكننا ملاحظة الانحلال العارض لمستويات الطاقة بين الطبقات الفرعية المختلفة والمنتمية لنفس الطبقة مثل الطبقتين الفرعيتين $(2s, 2d)$ المنتميتين لنفس الطبقة $L(n = 2)$ والتي طاقتها تساوي $(7\hbar\omega/2)$ كما هو واضح من الشكل. فدرجة انحلال هذا المستوى هي

$$(150) \quad g_2 = \frac{1}{2}(2 + 1)(2 + 2) = 6 \text{ (بدون سبين)}$$

والتي تنقسم إلى انحلالين عرضيين وهو الذي يقابل الطبقتين الفرعيتين $(2s, 2d)$ ، فبينما الطبقة الفرعية $2s$ غير منحلة فإن انحلال الطبقة الفرعية $2d$ يساوي خمسة (بدون حساب السبين) وهو انحلال أساسي ويكون مجموع الانحلال للمستويات الفرعية هو ستة، أي g_2 . ونفس الأمر مع الطبقات الفرعية $(4s, 4d, 4g)$ المنتمية للطبقة $N(n = 4)$ وهكذا.

5.2.5 الدوال الموجية للحالات المرتبطة للهبزاز التوافقي

لقد رأينا أن قيم مستويات طاقة الهبزاز التوافقي متماثل المناحي (146) منحلة g_n مرة. ولذلك فإن الدوال الموجية المرافقة لأي مستوى طاقي في شكلها العام تكون على شكل تركيب خطي للدوال $\varphi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$ المستقلة خطيا والتي عددها g_n . إن مجموعة جميع الدوال $\varphi_{n\ell m}$ من أجل كل القيم الممكنة لمجموعة الأعداد الكمومية (n, ℓ, m) تشكل أساسا لفضاء الحالات المدارية الكلي. بينما مجموعة الدوال المرفقة بقيمة ما لمستوى طاقي تشكل أساسا لفضاء الحالات المدارية الجزئي المرفق بنفس قيمة الطاقة. كما أن كل دالة منها $\varphi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$ ، أي كل دالة مرفقة بحالة كمومية محددة جيدا بواسطة الثلاثية المكونة من الأعداد الكمومية الثلاثة الرئيسي والمداري والمغناطيسي المداري (n, ℓ, m) ، هي دالة ذاتية مشتركة لمجموعة الملاحظات $\{H, L^2, L_z\}$ ، تكتب حسب النتائج (9) و (143) كما يلي

$$(151) \quad \varphi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = C_{n\ell} \left(\frac{r}{a}\right)^\ell e^{-r^2/2a^2} L_{\left(\frac{n-\ell}{2}\right)}^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)} \left(\frac{r^2}{a^2}\right) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

إن معرفة الثلاثية (n, ℓ, m) تكفي لتحديد دالة الموجة بصورة وحيدة في فضاء الحالات المدارية. ولذلك فإن المجموعة $\{H, L^2, L_z\}$ تشكل مجموعة تامة من الملاحظات المتبادلة، لأن الأعداد (n, ℓ, m) مرتبطة بالقيم الذاتية لهذه الملاحظات التي بقياسها نستطيع تحضير الحالة الكمومية المرغوبة.

نعطي في الجدول التالي بعض العبارات الصريحة لدوال الموجة المرافقة للمستويات الطاقوية الأولى للهبزاز التوافقي متماثل المناحي

الدالة الموجية المرافقة $\varphi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$	الطبقة الفرعية
$\varphi_{0,0,0}(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}_{0,0}(r)Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{(a\sqrt{\pi})^3}} e^{-r^2/2a^2}$	الطبقة الفرعية 0s
$\varphi_{1,1,m}(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}_{1,1}(r)Y_1^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{8}{3a^5\sqrt{\pi}}} r e^{-r^2/2a^2} Y_1^m(\theta, \varphi); m = 0, \pm 1$	الطبقة الفرعية 1p
$\varphi_{2,0,0}(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}_{2,0}(r)Y_0^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{3(a\sqrt{\pi})^3}} \left(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{a^2}\right) e^{-r^2/2a^2}$	الطبقة الفرعية 2s
$\varphi_{2,2,m}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{16}{15a^7\sqrt{\pi}}} r^2 e^{-r^2/2a^2} Y_2^m(\theta, \varphi); m = 0, \pm 1, \pm 2$	الطبقة الفرعية 2d