

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

جامعة الشهيد حمه لخضر - الوادي

كلية العلوم الدقيقة

قسم: الفيزياء



جامعة الشهيد حمه لخضر - الوادي  
Université Echouid Hamma Lakhdar - El-Oued



جامعة الشهيد حمه لخضر - الوادي  
Université Echouid Hamma Lakhdar - El-Oued

رقم الترتيب:

رقم التسلسل:

مذكرة تخرج لنيل شهادة

## ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاع و طاقة

من إعداد: غربي مروة - مناصر مباركة

الموضوع

### دراسة ذرة الهيدروجين في فضاء متعدد الأبعاد

نوقشت يوم: 2017/05/23

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيس.

مناقش.

مناقش.

مقررا.

أستاذ مساعد صنف ب

أستاذ مساعد صنف أ

أستاذ مساعد صنف ب

أستاذ مساعد صنف أ

بوراس ليلي

احميم رشيد

بكار الضاوية

عسكري سهيلة

الموسم الجامعي: 2017/2016

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ  
مَنْ كَانَ عَدُوًّا لِلَّهِ فَإِنَّ اللَّهَ عَدُوٌّ لِلْكَافِرِينَ  
يَعْلَمُ مَا فِي قُلُوبِهِمْ  
وَلَا يَخْفَى عَلَى اللَّهِ شَيْءٌ سِوَمَا  
يَعْلَمُ مَا فِي قُلُوبِهِمْ  
وَلَا يَخْفَى عَلَى اللَّهِ شَيْءٌ سِوَمَا  
يَعْلَمُ مَا فِي قُلُوبِهِمْ  
وَلَا يَخْفَى عَلَى اللَّهِ شَيْءٌ سِوَمَا

سنة ١٤٢٠ هـ

شكر و عرفان



# شكر وعرفان

الحمد لله الذي خلقنا ورزقنا من كل خير وأورثنا العلم سلاحا وصلى الله وسلم

على نبينا محمد حبيبنا وشفيعنا، وخاتم الأنبياء والمرسلين أما بعد

\*بادئا تشكراتنا بشكر المولى عزو جل لنعمته التي أنعم بها علينا

\*ثم نتقدم بخالص الشكر والامتنان إلى المؤطرة "عسكري سهيلة" التي لم تبخل علينا  
بنصائحها وإرشاداتها.

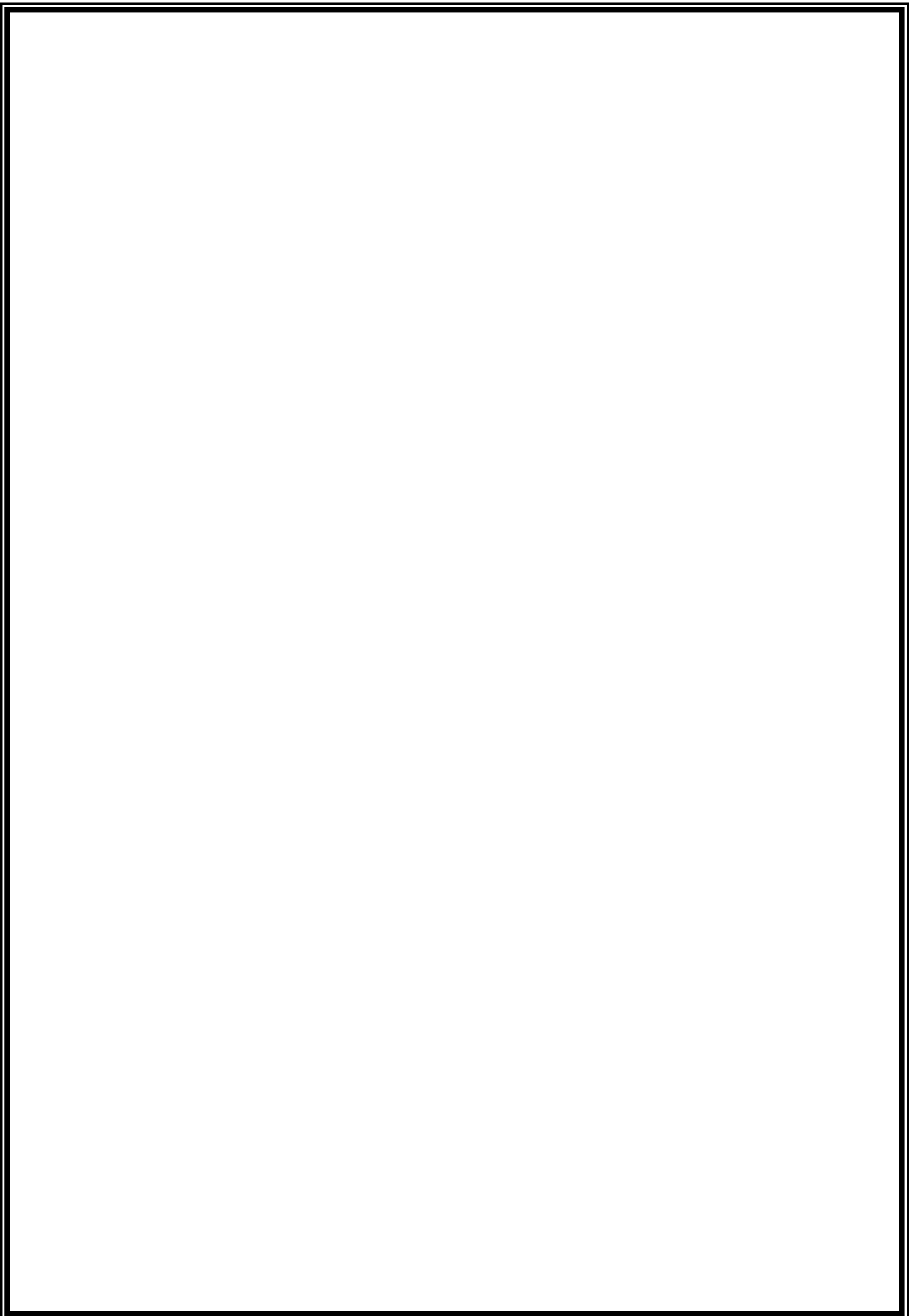
\*كما اخص بالشكر الجزيل الى الاساتذة " بسر الزبير" " سعدالله ابراهيم " الذي مد لنا يد  
العون في سبيل إنجاز هذه المذكرة، كما نشكرهما على سعة صبرهما معنا فيما نحتاجه  
لإنجاز هذا العمل المتواضع.

\* أشكر الاستاذة بوراس ليلي على تكرمها بقبول ترؤس لجنة مناقشتنا والاستاذ احميم  
رشيد بقبوله عضوا ممتحنا في لجنة مناقشتنا كما أشكر الاستاذة بكار الضاوية على قبولها في  
مشاركة لجنة تقييم هذه المذكرة.

\* كما نتقدم بخالص الشكر إلى عبد الكريم ليحيو على ما قدمه لنا بمساعدة معنوية كانت  
أومادية لإتمام هذه المذكرة وإلى دفعة ثانية ماستر فيزياء 2017.

\*ونسأل المولى جلت قدرته أن ينفعنا جميعا فهو وحده المستعان وله الشكر

على كل شيء.



# فهرس المحتويات



فهرس المحتويات

I	..... شكر و عرفان
II	..... فهرس الأشكال
III	..... فهرس الجداول
VI	..... قائمة الرموز
1	..... مقدمة عامة

**الفصل الأول: تطور مفهوم ذرة الهيدروجين**

4	..... 1.I مقدمة
4	..... 2.I نموذج بور (Bohr)
4	..... 1.2.I نظرية بور لذرة الهيدروجين
5	..... 2.2.I فرضيات بور
6	..... 3.2.I التعبير عن نصف قطر المدارات المسموح بها
7	..... 4.2.I التعبير عن الطاقات المتاحة للإلكترون
8	..... 5.2.I قصور نموذج بور
9	..... 3.I نموذج سمر فيلد (Sommerfeld)
9	..... 4.I النموذج الذري الحديث
9	..... 1.4.I المبادئ والقوانين التي بني عليها النموذج الذري
9	..... 1.1.4.I الطبيعة الموجية للمادة
9	..... 2.1.4.I مبدأ الشك لهايزنبرغ
10	..... 3.1.4.I معادلة شرودينجر
11	..... خاتمة

**الفصل الثاني: حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين الحرة في الفضاء المعتاد**

13	..... 1.II مقدمة
13	..... 2.II استنباط معادلة شرودينجر
16	..... 3.II ذرة الهيدروجين في بعد واحد
16	..... 1.3.II معادلة شرودينجر في بعد واحد بدلالة الإحداثيات الكارتيزية
16	..... 2.3.II حل معادلة شرودينجر في بعد واحد بدلالة الإحداثيات الكروية
19	..... 4.II ذرة الهيدروجين في ثلاث أبعاد
19	..... 1.4.II معادلة شرودينجر في ثلاث أبعاد بدلالة الإحداثيات الكارتيزية

20	..... 2.4.II معادلة شرودينجر في ثلاث أبعاد بدلالة الإحداثيات الكروية
20	..... 1.2.4.II التغيير من نظام الإحداثيات الكارتيزية إلى نظام الإحداثيات الكروية
21	..... 2.2.4.II فصل المتغيرات
22	..... 5.II حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين
22	..... 1.5.II الحل بالنسبة لـ $\Phi$
23	..... 2.5.II الحل بالنسبة لـ $\theta$
24	..... 3.5.II الحل بالنسبة لـ $R$
25	..... 1.3.5.II تحديد عوامل كثير الحدود $f(r)$
26	..... 6.II عبارة دالة الموجة النهائية
27	..... 7.II عبارة الطاقة لذرة الهيدروجين الحرة
27	..... خاتمة
	<b>الفصل الثالث: حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين في <math>N</math> بعد</b>
29	..... 1.III مقدمة
29	..... 2.III معنى فضاء متعدد الأبعاد ( $N$ بعد)
29	..... 1.2.III مدخل لنظرية الأوتار الفائقة
30	..... 2.2.III سبب تسميتها لنظرية الأوتار
30	..... 3.2.III مفهوم الأبعاد في نظرية الأوتار الفائقة
31	..... 3.III ذرة الهيدروجين في $N$ بعد
31	..... 1.3.III حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين في $N$ بعد
37	..... 4.III طاقات ذرة الهيدروجين الحرة و المقيدة
37	..... خاتمة
	<b>الفصل الرابع: تحليل ومناقشة نتائج حالات الطاقة لذرة الهيدروجين</b>
40	..... 1.VI مقدمة
40	..... 2.VI نتائج حساب الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة
40	..... 1.2.VI مناقشة قيم الطاقة لذرة الهيدروجين المقيدة
48	..... 1.2.VI مقارنة الحالات المقيدة والحرة لذرة الهيدروجين
53	..... خاتمة

## فهرس المحتويات

---

55	.....الخاتمة العامة
57	.....قائمة المراجع
62	.....الملحق A
67	.....الملحق B

# فهرس الأشكال



فهرس الأشكال		
8	يوضح مستويات الطاقة المختلفة لذرة الهيدروجين حسب نموذج بور.....	الشكل (I-1):
17	شكل يبين العلاقة بين نظام الإحداثيات الكارتيزية و نظام الإحداثيات الكروية.....	الشكل (II-1):
20	نموذج مبسط لذرة الهيدروجين , بروتون في المركز $r = 0$ يدور حوله إلكترونات الموجودة حالياً في الإحداثيات الكروية $(r, \theta, \varphi)$ .....	الشكل (II-2):
43	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف $S \perp$ ..... $N=3$	الشكل (VI-1):
43	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف $S \perp$ ..... $N=4$	الشكل (VI-2):
45	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف $S \perp$ ..... $N=9$	الشكل (VI-3):
46	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف $S \perp$ ..... $N=10$	الشكل (VI-4):
46	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف $S \perp$ ..... $N = 3 - 10$	الشكل (VI-5):
48	منحنى تغيرات قيم نصف قطر التجويف الحرج $S_c$ بدلالة البعد الفضائي $N$ .....	الشكل (VI-6):
49	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة البعد الفضائي $N \perp$ ..... $S=22a_0$	الشكل (VI-7):
50	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين الحرة بدلالة البعد الفضائي $N \perp$ ..... $S=22a_0$	الشكل (VI-8):
50	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة بدلالة البعد الفضائي $N \perp$ ..... $S = 22a_0$	الشكل (VI-9):

## فهرس الجداول

52	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة البعد الفضائي $N$ لـ $S=44a_0$	(-VI)	الشكل (10):
52	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين الحرة بدلالة البعد الفضائي $N$ لـ $S=44a_0$	(-VI)	الشكل (11):
53	منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة بدلالة البعد الفضائي $N$ لـ $S = 44a_0$	(-VI)	الشكل (12):

# فهرس الجداول



## فهرس الجداول

فهرس الجداول		
14	جدول يحتوي على بعض الكميات الفيزيائية الكلاسيكية والمؤثرات المناظرة لها في ميكانيكا الكم.....	الجدول (1-II):
41	الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة, لقيم مختلفة من $S$ عند $N=3, N=4$ , في حالة $l = 0$ .....	الجدول (1-VI):
44	الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة, لقيم مختلفة من $S$ عند $N=9, N=10$ , في حالة $l = 0$ .....	الجدول (2-VI):
47	قيم نصف قطر التجويف الحرج $S_c$ لقيم مختلفة من $N$ في حالة $l = 0$ .....	الجدول (3-VI):
48	الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة والحررة في أبعاد مختلفة, في حالة $l = 0$ و $S = 22a_0$ .....	الجدول (4-VI):
51	الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة والحررة في أبعاد مختلفة, في حالة $l = 0$ و $S = 44a_0$ .....	الجدول (5-VI):

# مقدمة عامة



## مقدمة عامة

تعد الفيزياء اليوم عصب العلوم المعاصرة، فهي تدرس في شتى المجالات العلمية والتكنولوجية الحديثة فمن أهم فروعها الفيزياء الذرية، إذ تسلط الضوء على دراسة ما يحدث على مستوى الذرة، فمنذ اكتشاف الموجات المصاحبة للإلكترون كان لابد من توصيف رياضي يتيح للإلكترون الانتقال من مدار إلى آخر ويشع فائض طاقته على شكل فوتون ضوئي. عندما أدخل العالم الفيزيائي ألبرت أينشتاين (Albert Einstein) فكرة أن الضوء يمتلك جسيمات ووضح كيف أن الموجات الضوئية هي من يحدد كيفية انتقال الفوتون من مكان لآخر، وبنفس الطريقة يجب أن تحدد موجات المادة كيفية انتقال الإلكترون من مدار إلى آخر داخل الذرة، من المؤكد لا يمكن وصف هذا بواسطة الميكانيك الكلاسيكي بل يجب إيجاد معادلات تنسجم مع تلك الافكار [1].

في القرن العشرين ظهرت تطورات جديدة في علم الفيزياء وهو نشأة ميكانيك الكم الذي يبني نموذجاً جديداً للذرة يشرح هيكلها واستقرارها [2]، حيث اكتشف كل من الفيزيائي الألماني ورنر هايزنبرغ (Werner Heisenberg) عام 1925م نظرية مبدأ الشك التي صاغها على شكل مصفوفات، والعالم النمساوي ارون شرودينجر (Erwin Schrödinger) عام 1926م نظرية خاصة تحدد كيفية انتشار أمواج المادة داخل الذرة، التي نشرها على شكل معادلة شهيرة عند الفيزيائيين تسمى بمعادلة شرودينجر، فهي تطبق على الجمل الكمية بهدف تحديد حالتها الحركية [3].

إن حل معادلة شرودينجر يكشف الغموض على ما يحدث داخل الذرات، ولقد اتخذت ذرة الهيدروجين كنموذج لحل هذه المعادلة، وهذا راجع لكونها أبسط أنواع الذرات فهي تتكون من جسيمين فقط إلكترون يدور حول النواة منجذباً نحوها بواسطة القوى الكولومية، والنواة التي تؤخذ في أغلب الأحيان ساكنة، ولمعرفة صفات هذا الإلكترون سواء كانت طاقة أو سرعة أو موضع... الخ، يجب علينا حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين في مختلف الأبعاد، حيث تم تطوير العديد من التقنيات الرياضية لحلها، وذلك للحصول على القيم الذاتية للطاقة والكميات الفيزيائية الأخرى ذات الصلة [2].

من السهل بالنسبة لنا كفيزيائيين تصور ذرة الهيدروجين في فضاء ثلاثي الأبعاد، لكن هناك نظرية تدعى بنظرية الأوتار الفائقة، وهي اليوم ذات أهمية بالغة وتعلق عليها أكبر الآمال حيث تنتبأ بأن الفضاء بشكل عام لديه أكثر من ثلاث أبعاد، وتعد هذه النظرية كمحاولة ناجحة في توحيد القوى الأساسية الأربعة في عشرة أبعاد تحت معادلة واحدة تحكم كل قوانين هذا الكون حيث أنها تدمج ما بين ميكانيك الكم الذي يصف القوى الثلاثة ويتعامل مع تصرف الجسيمات التي ليست في احساسنا ولا ترى بالمجهر العادي أي مع أجزاء الذرة، والنسبية العامة التي تصف الجاذبية وتقوم على دراسة تصرفات الجسيمات عند السرعات التي تقترب من سرعة

الضوء، مثل ما كان يحلم ألبرت اينشتاين (Albert Einstein) إلى توحيد الجاذبية مع القوة الكهرومغناطيسية، فقد كان هو الآخر معجبا بما أنجزه جيمس ماكسويل (James Mascwell) الذي تمكن من توحيد القوتين الكهربائية و المغناطيسية ضمن ما تعرف بالقوة الكهرومغناطيسية [4].

فكرة فضاء متعدد الأبعاد جذبت مؤخرا انتباه الكثير من العلماء والباحثين في دراسة علم الكونيات [5، 6] ، وهو محور دراستنا في هذه المذكرة، حيث سندرس حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين في فضاء متعدد الأبعاد سواء كانت حرة أم مقيدة وسط تجويف كروي من أجل معرفة ما ينتج عنها في هذا الفضاء، وذلك ضمن أربعة فصول:

الفصل الأول: سلطنا الضوء على مفهوم ذرة الهيدروجين وتطور نموذجها ابتداء من عصر بور الذي شبه الإلكترون الذي يدور حول النواة بالقمر الذي يدور حول الأرض إلى غاية نشأة ميكانيك الكم.

الفصل الثاني: أدرجنا فيه حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين الحرة في الفضاء المعتاد  $N \leq 3$  ، وذلك بعد استنباط هذه المعادلة وتحويلها من نظام الإحداثيات الكارتيزية إلى نظام الإحداثيات الكروية، ومن ثم تحصلنا على عبارة الطاقة لذرة الهيدروجين الحرة.

الفصل الثالث : ارتأينا إلى حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة وسط تجويف كروي نصف قطره  $S$  في فضاء متعدد الأبعاد بطريقة مغايرة.

الفصل الرابع: يمثل لب الدراسة حيث اعتمدنا على برنامج حساب عددي بلغة "MATLAB9" لإيجاد قيم الطاقة لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة ومن خلالها سوف نناقش ونحلل هذه القيم.

## الفصل الأول

# تطور مفهوم ذرة الهيدروجين

## 1.I مقدمة

يعتبر الدالتون (dalton) في نظريته الذرية التي نشرت عام 1808م بأن الذرة كيان غير قابل للتخريب، وقد تعاقب في نهاية القرن العشرين عدد كبير من التجارب أجبرت على إعادة النظر في مفهوم الدالتون [7]، ويلقي هذا الفصل الضوء على تطور الأفكار حول بنية ذرة الهيدروجين ويصف الدقائق التي تم تبيانها ابتداءً من عصر بور (Bohr) إلى العصر الحديث.

## 2.I نموذج بور (Bohr)

## 1.2.I نظرية بور لذرة الهيدروجين

في عام 1913م مقام العالم الدانماركي نيلز بور (Bohr)، بوضع نظرية دمجت أفكار كل من بلانك (Planck) واينشتاين (Einstein) وأكسبته جائزة نوبل عام 1922م.

وتعد نظريته أول نظرية وضعت لتفسير التركيب الإلكتروني لذرة الهيدروجين كما أفادت في تفسير طيف هذه الذرة، ونظراً لبساطة تركيبها والمتمثل في بروتون وإلكترون واحد، تم البدء بدراسة الضوء المنبعث منها عند تهيجها واتفق نموذج بور مع نموذج رذرفورد (Rudherfurdh) "اكتشف النواة الذرية حيث شبه الذرة بكرة تقع النواة في مركزها وتدور حولها إلكترونات سالبة الشحنة" في مبدأ أن النواة موجبة الشحنة عالية الكثافة للذرة، وأن الإلكترون يدور حول النواة، إلا أن النموذجين يختلفان في فهم طبيعة هذا الدوران.

فنموذج رذرفورد عجز عن تفسير حقيقتين هما:

- ثبات الذرة
- الطيف الخطي للذرة

أما بور فقد بنى نظريته على الآتي:

- استفاد من نتائج تجارب الطيف الذري للهيدروجين.
- استفاد من فكرة بلانك في التعبير عن الطاقة بواسطة لغة الكم.
- إن الكتلونات الذرات لا تسقط في النواة (الذرة غير قابلة للفناء تلقائياً).
- كذلك أطيف الذرات ليست متصلة وإنما تظهر بشكل خطوط عند تحليلها بواسطة المطياف.
- فرضية رذرفورد صحيحة وإن الإلكترونات تدور حول النواة في نظام مشابه للنظام الشمسي.

كما اعتمد على مبدئين أساسيين هما:

❖ **مبدأ بلانك في تكميم الطاقة:** الذي يفهم منه أن طاقة الإشعاع الكهرومغناطيسي المنبعثة من المادة لها كميات محددة.

❖ **مبدأ اينشتاين في تكميم طاقة الفوتون:** الذي ينص على أن الضوء عبارة عن جسيمات تسمى الفوتونات وهي كميات محددة من الطاقة، وطاقة الفوتون الواحد تعتمد على تردده كما في المعادلة التالية:

$$E = h\nu \quad (1-I)$$

حيث:

$$h : \text{يمثل ثابت بلانك } 6,62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$\nu$ : تردد الفوتون.

**لذا يرى بور أن**

1. إلكترون الذرة يمكنه أن يتواجد في مستوي واحد فقط من مستويات محددة (مكمم) من الطاقة.
2. طاقة الإلكترون هي التي تحدد مستوي تواجده، ولا يتواجد الإلكترون أبدا بين المستويات، وقد سمي بور هذه المستويات بالمدارات [8، 9].

### 2.2.I فرضيات بور

في نموذج بور يمكن للإلكترونات أن تكون فقط على مسافة محددة من البروتونات المرتبطة بها وعند تواجدها في أي مكان آخر فإنه يستلزم فقد طاقة وعلى هذا الأساس اقترح بور عام 1913م مايلي:

1. يدور الإلكترون بشكل دائري حول النواة تحت تأثير قوة كولوم، بدون انبعاث أي أشعة كهرومغناطيسية.
2. يتواجد الإلكترون في مدارات محددة حول النواة ولا يمكن أن يتواجد بينهما، أما خطوط الطيف تصدر بشكل خطوط متقطعة من التردد الزاوي، يجب أن تكون كمية حركة الدفع الزاوي مكممة أيضا أي تأخذ قيما محددة فقط كالتالي:

$$l = mv.r = n \frac{h}{2\pi} \quad (2-I)$$

3. يصدر الإلكترون إشعاعا كهرومغناطيسيا أو فوتونا عند انتقاله من مدار إلى مدار آخر، يعطى تردد كل فوتون بالعلاقة التالية:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_f - E_i}{h} \quad (3-I)$$

$$\Delta E = h\nu \quad (4-I)$$

إن الفرضية الأولى في نموذج بور تنتهك بشكل واضح وصريح تنبؤات النظرية الكهرومغناطيسية، ولكنها تتفق مع قوانين الميكانيكا الكلاسيكية مثل قوة كولوم وقوانين نيوتن. لذلك استخدم بور قانون كولوم لحساب قوة التجاذب بين النواة والإلكترون تعطى تلك القوة كالتالي :

$$F = k \frac{(Ze)e}{r^2} \quad (5-I)$$

حيث  $e$  شحنة الإلكترون، و  $Ze$  شحنة النواة.

كما أننا نعالج ذرة الهيدروجين هنا وهي أخف الذرات لكونها تحتوي على بروتون واحد فقط أي  $Z = 1$ .

في حالة استقرار الذرة تكون قوة الطرد المركزي مساوية لقوة الجذب الكهربائي، باستخدام قانون نيوتن الثاني نجد أن:

$$k \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad (6-I)$$

حيث  $m$ : كتلة الإلكترون.

من المعادلتين نجد أن:

$$v_n = \frac{kZe^2}{nh} \quad (7-I)$$

وهي سرعة الإلكترون المكممة لاحتوائها على العدد الصحيح  $n$ .

### 3.2.I التعبير عن نصف قطر المدارات المسموح بها

باستبدال  $v$  في العلاقة (2-I) بما يساويها نجد:

$$m \frac{kZe^2}{\left(n \frac{h}{2\pi}\right)} \cdot r = \left(n \frac{h}{2\pi}\right) \quad (8-I)$$

كذلك بالقسمة على  $mr$  نجد :

$$r_n = \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}{mkZe^2} \cdot n^2 \quad (9-I)$$

وهو نصف قطر الذرة في إحدى المدارات، عندما يكون الإلكترون في مستوى الطاقة الأول أي ( $n=1$ ) وتتخذ المعادلة (9-I) أصغر قيمة لها وهو أصغر نصف قطر ويسمى نصف قطر بور  $a_0$ . عند التعويض في

$$a_0 = \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}{mke^2} = 5.29 \times 10^{-11}m = 0.529 \text{ \AA} \quad (10-I) \quad \text{المعادلة (6-I) نجد أن:}$$

وبالتالي يمكن كتابة المعادلة (9-I) بدلالة نصف قطر بور كالتالي:

$$r_n = n^2 \cdot \frac{a_0}{Z} \quad (11-I)$$

بالمثل نستطيع إيجاد سرعة الإلكترون في المدار الأرضي وذلك بوضع  $n = 1$  في المعادلة (7-I):

$$v_1 = 2.19 \times 10^6 \text{ m/s}$$

وهذه أكبر قيمة لسرعة الإلكترون في ذرة الهيدروجين، نلاحظ أن هذه السرعة صغيرة بالنسبة لسرعة الضوء وهذا ما يعلل إهمال تأثير الميكانيكا النسبية هنا.

#### 4.2.I التعبير عن الطاقات المتاحة للإلكترون

لقد اعتبرنا في هذه المعالجة أن كتلة النواة (البروتون) أكبر بكثير من كتلة الإلكترون حيث  $m_p = 1836.1527 m_e$ .

لذلك إذا أردنا تحسين الحسابات بشكل أكثر دقة نقوم بتعويض ما يسمى بالكتلة المختزلة بدلا من كتلة الإلكترون في جميع المعادلات الموجودة في نموذج بور، تعطى الكتلة المختزلة كالتالي [11]:

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad (12-I)$$

حيث  $m_e$  و  $m_p$ : كتلتي البروتون و الإلكترون على التوالي.

يمكننا إيجاد طاقة الإلكترون الكلية  $E_n$  في إحدى مداراته، وذلك من خلال العلاقتين (7-I) و (9-I) مع استخدام الإشارة السالبة للجهد الكهربائي لأننا سنعتبر جهد الإلكترون يساوي الصفر عندما يكون على بعد لانهاهي من النواة:

$$E_n = E_{cn} = \frac{-kZ^2 \mu e^4}{2n^2 h^2} \quad (13-I)$$

عندما يكون الإلكترون في الحالة الأساسية  $n = 1$  تصبح قيمة الطاقة الكلية في المدار الأول مساوية إلى:

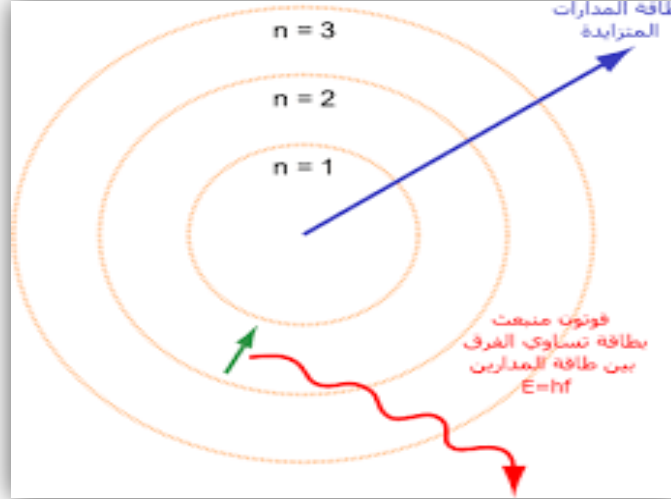
$$E_1 = -13.6 \text{ eV} \quad (14-I)$$

وبالتالي الطاقات المتاحة للإلكترون كلها سالبة وتعطى بالعلاقة التالية:

$$E_n = \frac{-13.6}{n^2} Z^2 \quad (15-I)$$

إذا أردنا حساب مستوى أي طاقة نقوم باستخدام المعادلة (15-I) فمثلا لمعرفة قيمة مستوى الطاقة الثاني نضع  $n = 2$ ، ومستوي الطاقة الثالث نضع  $n = 3$ ، وهكذا لبقية المستويات الأخرى [10].

إن نموذج بور حول الذرة مقنع للغاية في تفسير خطوط الطيف على الذرات أحادية الإلكترون ويمكن تطبيقه على بعض الذرات المتأينة مثل  $He^+Li^{++}$ ، في هذه العناصر نقوم بتعويض مستويات الطاقة المختلفة لذرة الهيدروجين، عند انتقال إلكترون من مستوي الطاقة الثالث  $n = 3$  إلى مستوي الطاقة الأول  $n = 1$  يصدر فوتون ضوئي طاقته  $h\nu$ .



الشكل (1-I): يوضح مستويات الطاقة المختلفة لذرة الهيدروجين حسب نموذج بور.

لنفترض الآن أن الإلكترون قد انتقل من مستوي الطاقة  $n = \infty$  إلى  $n = 1$ ، باستخدام المعادلتين (4-I) و (13-I) مع  $v = \frac{c}{\lambda}$  وأخذ  $\frac{1}{\lambda}$  من المعادلة (5-I)، نجد أن المعادلتان لا تتساوى إلا في حالة:

$$R = \frac{kZ^2\mu e^4}{2n^2h^3c} \quad (16-I)$$

وتساوي هذه الكمية بالضبط ثابت ريديبيرغ (Rudhberg) بدلالة مقادير فيزيائية معروفة تماما.

بهذه الطريقة أعطى بور المعنى الفيزيائي لثابت ريديبيرغ الذي كان معروفا من قبل ككتاب تجريبي فقط [10].

## 5.2.I قصور نموذج بور

لقد اخذت نظرية بور التي تشبه الإلكترون الذي يدور حول النواة بالقمر الذي يدور حول الأرض بعين الاعتبار، لكن هذه النظرية البسيطة تبين في الأخير أنها تقريبية، فلم تستطع مثلا تفسير مفعول زيمان (يكون للذرة الموضوع في مجال الحقل المغناطيسي قوى طيف إصدار أكثر تعقيدا).

كما واجهت مسألة بور مسألة أكثر خطورة ولم تستطع تفسير الخطوط الدقيقة للذرات التي لها أكثر من إلكترون واحد، كما أن النظرية فشلت في تفسير دورية خواص عناصر الجدول الدوري، لذلك التفت العالم من نظرية المدار الى نظرية أكثر جدية وأكثر قوة مبنية على أساس ميكانيكا الكم.

**3.I نموذج سمر فيلد (Sommerfeld)**

عندما عجز نموذج بور عن تفسير اثر زيمان، أسعف عالم ألماني يدعى سمر فيلد النظرية باقتراحه وجود مدارات إهليجية إضافة إلى المدارات الدائرية بحيث تقع النواة في إحدى بؤرتي القطع الناقص، ووضع قواعد التكميم للجمل الفيزيائية التي تكون إحداثياتها توابع للزمن.

**4.I النموذج الذري الحديث**

ظهرت في حدود عام 1930م نظرية جديدة مبنية على الخواص الموجية للمادة عوضت نظرية بور فحركة الالكترونات لم تعد مقتصرة على مدارات محددة، ولكنها حركة معقدة جدا يمكن وصفها بدقة باللجوء إلى ميكانيكا الكم الذي وضع أول معالمه العالمان بور واينشتاين [12].

**1.4.I المبادئ والقوانين التي بني عليها النموذج الذري****1.1.4.I الطبيعة الموجية للمادة**

في سنة 1923م قدم العالم لويس ديبروغلي فرضيته الجديدة التي تنص على أن جميع المواد تمتلك صفات موجية، وقد اقترح أن لكل دقيقة متحركة موجة مرتبطة بها ذات طول موجي ويعطى بالعلاقة:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (17-I)$$

وفي سنة 1927م وثق دافسيون وجرمر فكرة دي بروغلي وذلك بدراستهما لحزمة من الالكترونات بحيث اتضح لهما أن هذه الأخيرة يمكن أن تتصرف بحق مثل الموجة، و تحديد كما تحيد الأشعة السينية.

وفي الحقيقة أن البلورة مكونة من ذرات موزعة بشكل منتظم وتتصرف كشبكة انعراج ويعتبر هذا دليل على صحة فرضية دي بروغلي حول الطبيعة الموجية للمادة.

إن التجارب الحديثة تبين أن المادة والموجة ليستا شيئين منفصلين بل يرتبط بعضهما ببعض في جميع المواد، وأنه من المعقول أن نتوقع أن جميع الأشياء في الطبيعة تمتلك كلتا الصفتين معا [13، 14].

**2.1.4.I مبدأ الشك لهايزنبرغ**

بناء على النماذج الذرية التي اعتبرت أن الإلكترون يتحرك وفق مسارات محددة فانه من المستحيل إعطاء تمثيل حقيقي عما يجري على مستوى الذرة، وهذا راجع للفرق بين الظواهر الماكروسكوبية والميكروسكوبية [13].

في عام 1927م أدخل هايزنبرغ هذه الفكرة التي تعرف الآن بمبدأ الشك أو اللايقينية لهايزنبرغ فإذا قمنا بقياس موضع الى حدود ارتياب  $(\Delta x)$  وقمنا بقياس أي كمية مركبة  $(x)$  لدفعه الخطي بارتياب  $(\Delta P_x)$  فإن حاصل ضرب الارتياب لكليهما لا يمكن أن يكون أصغر من  $\frac{h}{4\pi}$  أبداً:

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \frac{h}{4\pi} \quad (18-I)$$

أي أنها استحالة فيزيائية أن نقيس أنيا الموقع المضبوط وكمية الحركة الخطية المضبوطة لجسيم. كما أشار هايزنبرغ الى عدم نشوء الشك الحتمي من عيوب في أجهزة القياس وإنما تنشأ من البنية الكمية للمادة.

من باب المقارنة نتصور الآن جسماً كمية حركته غير يقينية بحيث أنه يمتلك مدى من القيم الممكنة لكمية الحركة، تبعاً لعلاقة ديبروغلي تؤدي هذه الى مدى من الأطوال الموجية وبذلك لا يتم تمثيل الجسم بطول موجي منفرد ولكن بمجموعة أطوال موجية مختلفة ضمن هذا المدى، وتكون هذه المجموعة جيب موجة، أي إذا طلب منا إيجاد موضع الجسيم يمكننا القول فقط أنه في مكان ما في المنطقة المحددة بواسطة جيب الموجة (بسبب أن هناك اختلاف واضح بين هذه المنطقة وبقية الفضاء)، لذلك بفقدان بعض الإيضاحات حول كمية حركة الجسم ربحتنا إيضاحات حول موضعه [14].

### ملاحظة

يفسر البعض مبدأ الشك بشكل غير صحيح بأنه يعني قياسات متداخلة مع النظام، فعلى سبيل المثال إذا لوحظ إلكترون في تجربة افتراضية باستعمال مجهر بصري فإن الفوتون المستعمل لرؤية الإلكترون سيصطدم معه ويجعله يتحرك ليعطيه عدم التيقن في كمية الحركة، ولكن هذه ليست هي فكرة مبدأ الشك [9].

### 3.1.4.I معادلة شرودينجر

وضع العالم شرودينجر معادلته الموجية سنة 1926م التي تصف حالة الإلكترون مستخدماً في ذلك عبقريته الرياضية [12]، ولقد تطابقت قيم حلول هذه المعادلة مع القيم التجريبية مما أكد صحة الفرضيات الموجية الموضوعية، إن خضوع الإلكترون أثناء حركته لجذب النواة يجعل معادلته شبيهة بمعادلة الأمواج المستقرة مع الأخذ بعين الاعتبار أن حركة الإلكترون تتم في الفراغ وفق ثلاث أبعاد كما توضحه المعادلة التفاضلية التالية [9]:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \Psi = 0 \quad (19-I)$$

تبين عند حل هذه المعادلة الموجية أن بعض المحطات أو بعض الطاقات فقط تكون مميزة بثلاثة أعداد كوانتية.

### 1. العدد الكمي الأول

هو العدد الكمي الرئيسي ( $n$ )، ويحدد الحجم الفعلي للمحط أو التوزيع الفراغي للإلكترون، ويحدد كذلك طاقة الإلكترون، يمكن لهذا العدد أن يأخذ القيم الصحيح ( $1, 2, 3, \dots$ )، ويشار إليه بالأحرف ( $K, L, M, \dots$ ).

### 2. العدد الكمي الثاني

ويرمز له بالرمز ( $l$ ) يعين العزم الزاوي المداري للإلكترون إلا أنه بصورة عامة يدعى عدد "كم شكل المدار" والذي يأخذ القيم ( $0, 1, 3, \dots, n-1$ )، ويشار إليه بالأحرف التالية ( $s, p, d, \dots$ ).

ملاحظة: إن هذين العددين الكميين يعينان الخواص الفضائية لمدار الإلكترون.

### 3. العدد الكمي الثالث

نرمز له بالرمز ( $m_l$ ) ويحدد توجه الشكل الفراغي بالنسبة للاتجاه العشوائي، يدعى عدد الكم هذا "العدد الكمي المغناطيسي المداري"، يعتمد ( $m_l$ ) على قيمة ( $l$ ) ويمكنه أن يأخذ القيم الصحيحة التالية ( $\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ ) يكون عددها ( $2l + 1$ ).

إن أعداد الكم الثلاثة المجتمعة تعين مدارا ذريا.

### 4. العدد الكمي الرابع (اللف)

يدعى السبين ونرمز له بالرمز ( $s$ )، يمكن شرح خواص الإلكترون في محط ما بتصوير هذا الإلكترون شبيه بقضيب ممغنط صغير جدا له قطبان شمالي وجنوبي، ويمكن وصف سلوك هذا القضيب الممغنط بواسطة العدد الكمي الرابع ( $s$ ) والذي يدل على اللف الذاتي للإلكترون [12].

## خاتمة

ارتأينا في هذا الفصل الى أهم الإنجازات التي توصل إليها العالم نيلز بور حول مفهوم ذرة الهيدروجين، كونه دفع الباحثين في عصره الى جدالات ومناقشات كان شأنها وهدفها البحث عن نموذج ذري يقترب من الواقع، وهذا ماتحقق في الأونة الأخيرة وهو الوصول الى نموذج ذري حديث أو مايسمى بالنموذج الاحتمالي المعتمد عليه في دراستنا بالنسبة للفصول القادمة لهذه المذكرة.

## الفصل الثاني

حل معادلة شرودينجر  
لذرة الهيدروجين في  
الفضاء المعتاد

## 1.II مقدمة

تشكلت جملة من المفاهيم الجديدة تعرف الآن بميكانيكا الكم أو علم الكم، والذي يمكننا من فهم عدة تجارب عجز الميكانيك الكلاسيكي على فهمها، وذلك من خلال ثلاث مسلمات أساسية، ومن بينها المسلمة الثانية لميكانيكا الكم التي نصت على أنه لكل كمية فيزيائية يمكن قياسها كمؤثر يدعى بمؤثر الهاملتون  $\hat{H}$  [15]، وذلك من خلال الاعتماد على معادلة شرودينجر وهي عبارة عن معادلة تفاضلية جزئية تصف كيفية تغير الحالة الكمية لنظام فيزيائي مع الزمن، وقد صاغها عالم الفيزياء النمساوي إروين شرودينجر (Erwin Schrödinger) في أواخر عام 1925م ونشرها عام 1926م وتحل هذه المعادلة أهمية خاصة في ميكانيكا الكم تعادل أهمية القانون الثاني لنيوتن في الميكانيك الكلاسيكي [16]. لهذا سوف نتطرق في هذا الفصل إلى دراسة كمية لذرة الهيدروجين الحرة في الفضاء المعتاد باستخدام معادلة شرودينجر من أجل الحصول على مستويات الطاقة لها.

## 2.II كتابة معادلة شرودينجر

إن حل معادلة شرودينجر يعطي دالة الموجة التي تصف حالة الجسيم الكمي وكذلك قيمة الطاقة  $E$  حيث أن دالة الموجة المستوية لجسيم حر عبارة عن دالة افتراضية (حقيقية أو مركبة) ليس لها معنى فيزيائي بل مربعها يعطي معنى فيزيائي، وهو احتمال تواجد الجسيم في نقطة ما عند أي لحظة من الزمن، فلا يمكن قياسها عمليا ولكنها تعتبر كمقياس [15,17,18] وتعطى عبارتها كالتالي [19]:

$$\Psi = e^{i(K.r - \omega t)} = e^{i(P.r - Et)/\hbar} = e^{iP.r/\hbar} \cdot e^{-iEt/\hbar} \quad (1-II)$$

حيث:

$K$ : متجه انتشار الموجة.

$\hbar$ : ثابت بلانك  $h$  مقسوم على  $2\pi$ .

$E$ : طاقة الجسيم.

$P$ : كمية الحركة.

$\omega$ : تواتر الاهتزاز.

للحصول على المؤثر  $\hat{H}$  نفاضل المعادلة (1-II) بالنسبة للزمن  $t$  نجد:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar} E \Psi \Rightarrow i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi \quad (2-II)$$

ومنه

$$\widehat{H} \Psi = E \Psi \rightarrow \widehat{H} = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (3-II)$$

للحصول على المؤثر  $\widehat{P}$  نفاضل المعادلة (II-1) بالنسبة للموضع  $r$  نجد:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} = \frac{1}{\hbar} P e^{i(P r - Et)/\hbar} = \frac{i}{\hbar} P \Psi \quad (4-II)$$

ومنه

$$\widehat{P} \Psi = P \Psi \rightarrow \widehat{P} = -i \hbar \frac{\partial}{\partial r} \rightarrow \widehat{P}^2 = -\hbar^2 \nabla^2 \quad (5-II)$$

$$P^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 : \text{حيث}$$

الجدول (II-1): جدول يحتوي على بعض الكميات الفيزيائية الكلاسيكية والمؤثرات المناظرة لها في ميكانيكا الكم.

كميا	كلاسيكيا	الكمية الفيزيائية
$\hat{x}$	$x$	أحداثي الموضع
$\hat{P}_x = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$	$\vec{p}_x$	مركبة كمية الحركة الخطي
$\hat{p} = -i \hbar \nabla$	$\vec{p}$	كمية الحركة الخطية
$\hat{k} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$	$\vec{k} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$	طاقة الحركة
$\widehat{H} = -i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$	$\vec{E} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$	الطاقة الكلية

إذن تكتب معادلة شرودينجر في شكلها العام كما يلي:

$$\widehat{H} \Psi(r, t) = E \Psi(r, t) \quad (6-II)$$

$\widehat{H}$ : مؤثر الهاملتون وتعطى عبارته كالتالي:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (7-II)$$

حيث  $V(r)$ : الطاقة الكامنة.

بتعويض مؤثر الهاملتون بعبارته في معادلة شرودينجر العامة (6-II) نجد [20]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right\} \Psi(r, t) = E \Psi(r, t) \quad (8-II)$$

المعادلة (8-II) تعرف بمعادلة شرودينجر المتعلقة بالزمن، والتي تتضمن أربعة متغيرات وهي الإحداثيات الثلاثة للموضع (x, y, z) والزمن t، وهذه المتغيرات منفصلة بينما لا تكون الطاقة الكامنة دالة زمنية، وفي دراستنا هذه نبحث عن قيم خاصة ودوال مستقلة عن الزمن، لهذا سوف نفصل معادلة الزمن عن معادلة الموضع باستخدام طريقة فصل المتغيرات، حيث نفرض أن الدالة  $\Psi(r, t)$  هي جداء دالتين إحداهما تتعلق بالزمن t والاخرى بالموضع r كالتالي:

$$\Psi(r, t) = \Psi(r) \cdot \Psi(t) \quad (9-II)$$

نعوض (9-II) في المعادلة (8-II) ونكتب:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right\} \Psi(r) \cdot \Psi(t) = E \Psi(r) \cdot \Psi(t) \quad (10-II)$$

نفاضل المعادلة (9-II) مرة بالنسبة للزمن t ومرتين بالنسبة للموضع r نجد:

$$\frac{\partial \Psi(r) \cdot \Psi(t)}{\partial t} = \Psi(r) \cdot \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \quad (11-II)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(r) \cdot \Psi(t)}{\partial r^2} = \Psi(t) \cdot \frac{\partial^2 \Psi(r)}{\partial r^2} \quad (12-II)$$

نعوض (11-II) و(12-II) في معادلة (10-II) ونقسم على  $\Psi(r) \cdot \Psi(t)$  نحصل على:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(r)}{\partial r^2} + V(r) \right\} \frac{1}{\Psi(r)} = \frac{1}{\Psi(t)} \left\{ i \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \right\} \quad (13-II)$$

في المعادلة (13-II) نجد أن الطرف الأيسر يعتمد على الموضع r والأيمن على الزمن t، من نظريات المعادلات التفاضلية أن كلا الطرفين مساو لثابت وهو E الطاقة الكلية للجسيم وهي طاقة محفوظة.

إن حل الطرف الأيمن يعطي الدالة الزمنية التالية:

$$\Psi(t) = e^{iEt/\hbar} \quad (14-II)$$

أما الطرف الأيسر يعطي حله معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن كالتالي:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right\} \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (15-II)$$

$\Delta = \nabla^2$ : مؤثر لابلاس ويعطى بالعلاقة التالية:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (16-II)$$

نعوض مؤثر لابلاس بعبارته في المعادلة (15-II) نجد [21.19]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r) \right\} \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (17-II)$$

### 3.II ذرة الهيدروجين في بعد واحد

#### 1.3.II معادلة شرودينجر في بعد واحد بدلالة الإحداثيات الكارتيزية

من معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن (17-II) يمكننا استنباط معادلة شرودينجر لبعد واحد وذلك باعتبار الحركة في بعد واحد  $x$  ومنه تصبح المعادلة (17-II) كالتالي [15، 19]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + V(x) \right\} \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (18-II)$$

بما أن الإلكترون يدور حول النواة المركزية على بعد مسافة  $r$  تحت تأثير الطاقة الكامنة (الوضع) المركزية  $V(r)$ .

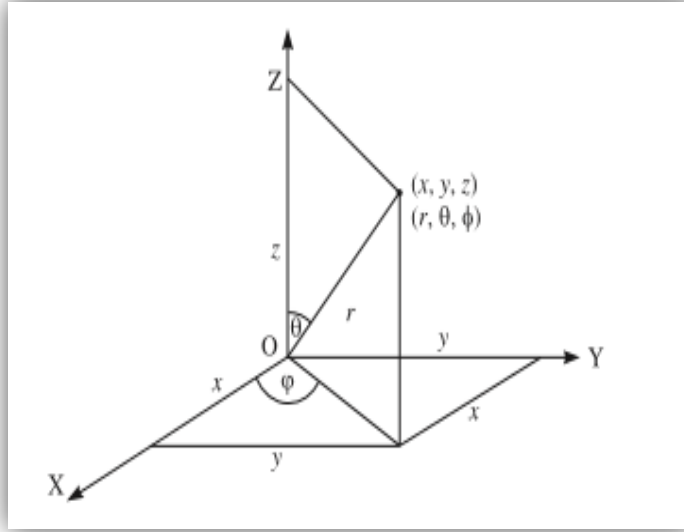
$$V(x) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|x|} \quad \text{حيث: } V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

إذن معادلة شرودينجر في هذه الحالة تكتب كالتالي [22]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|x|} \right\} \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (19-II)$$

#### 2.3.II حل معادلة شرودينجر في بعد واحد بدلالة الإحداثيات الكروية

عند التعامل مع الإلكترون كجسيم متحرك حول النواة فإنه يجب علينا كتابة معادلة شرودينجر في بعد واحد بدلالة الإحداثيات الكروية، ولذلك ننتقل من نظام الإحداثيات الكارتيزية إلى نظام الإحداثيات الكروية وذلك بالاعتماد على الشكل الموالي [19، 23، 24]:



الشكل (1-II): شكل يبين العلاقة بين نظام الإحداثيات الكارتيزية و نظام الإحداثيات الكروية [25].

مع العلم أن:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (20-II)$$

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \cos^{-1}(z / \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}) \\ \varphi = \tan^{-1}(y/x) \end{cases} \quad (21 - II)$$

يكتب مؤثر لابلاس في بعد واحد كما يلي ( أنظر الملحق A):

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (22-II)$$

نعوض (22-II) في (19-II) نتحصل على معادلة شرودينجر لبعده واحد في الإحداثيات الكروية وهي:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} \Psi(\varphi) = E\Psi(\varphi) \quad (23-II)$$

نكتبها على شكل معادلة صفرية

$$\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Psi(\varphi) + \frac{2 \mu r^2}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi(\varphi) = 0 \quad (24-II)$$

نلاحظ أن

$$E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = E - V = \frac{p^2}{2\mu} \quad (25-II)$$

إذن حل المعادلة (24-II) هو:

$$\Psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i p r \varphi / \hbar} \quad (26-II)$$

يشترط أن قيمة الموجة الواحدة  $\Psi(\varphi)$  هي  $\Psi(\varphi + 2\pi)$  مما يؤدي إلى حالة  $P r = n \hbar$ .

لدينا [22]:

$$E = \frac{1}{2} V = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (27-II)$$

لنحسب  $E - V$  ثم نعوضها في المعادلة (24-II) كما يلي:

$$E - V = \frac{1}{2} V - V = -\frac{1}{2} V = -E = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (28-II)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{2 \mu r^2}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi(\varphi) = \frac{\partial^2 \Psi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \left( \frac{\mu r e^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon_0} \right) \Psi(\varphi) = 0 \quad (29-II)$$

نبحث عن  $r$  لتعويضها في عبارة الطاقة  $E$ :

مع العلم أن:

$$\frac{2 \mu r^2}{\hbar^2} \frac{p^2}{2} = \frac{\mu r e^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon_0} \quad (30-II)$$

$$\frac{(Pr)^2}{\hbar^2} = \frac{\mu r e^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon_0} \quad (31-II)$$

نعوض  $P r = n \hbar$  في العبارة (31-II) السابقة نجد:

$$\frac{n^2 \hbar^2}{\hbar^2} = \frac{\mu r e^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon_0} \rightarrow n^2 = \frac{\mu r_n e^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon_0} \quad (32-II)$$

نكتب  $r = r_n$

$$n^2 = \frac{\mu r_n e^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon_0} \rightarrow r_n = \frac{n^2 4\pi \hbar^2 \epsilon_0}{\mu e^2} \quad (33-II)$$

نعوض  $r_n$  في عبارة الطاقة حيث  $E$  نكتبها  $E_n$  نجد:

$$E_n = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} \quad (34-II)$$

ومنه الطاقة الذاتية للإلكترون تكون:

$$E_n = \frac{-\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (35-II)$$

حيث:

$$E_0 = \frac{-\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = -13,598292 \approx -13,6 \quad (36-II)$$

ومنه نكتب:

$$E_n = -13,6 \frac{1}{n^2} eV \quad (37-II)$$

حيث :  $n = 1, 2, 3, \dots$

ومنه نقول إن طاقة الإلكترون تتغير وفق  $\frac{1}{n^2}$  أي عندما تكون  $n = 1$  تصبح  $E_n$  كما يلي [23]:

$$E_1 = E_0 = -13,6 eV \quad (38-II)$$

## 4.II ذرة الهيدروجين في ثلاث أبعاد

### 1.4.II معادلة شرودينجر في ثلاث أبعاد بدلالة الإحداثيات الكارتيزية

لدينا مما سبق المعادلة (17-II) وهي معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن في ثلاث أبعاد بدلالة الإحداثيات الكارتيزية حيث نكتب  $(r) \equiv (x, y, z)$  كما يلي [18، 19، 26، 27]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (39-II)$$

## 2.4.II معادلة شرودينجر في ثلاث أبعاد بدلالة الإحداثيات الكروية

### 1.1.4.II التغيير من نظام الإحداثيات الكارتيزية إلى نظام الإحداثيات الكروية

المشكلة التي سنواجهها عند محاولتنا لحل المعادلة (39-II) هي أنه لا يمكننا فصل المتغيرات عن بعضها البعض بسبب وجود  $r$  في الطاقة الكامنة  $V(r)$ ، ولذلك نلجأ إلى نقل المسألة من نظام الإحداثيات الكارتيزية بمتغيرات  $(x, y, z)$  إلى نظام الإحداثيات الكروية بمتغيرات  $(r, \theta, \varphi)$  كما هو موضح في الشكل (1-II) السابق.

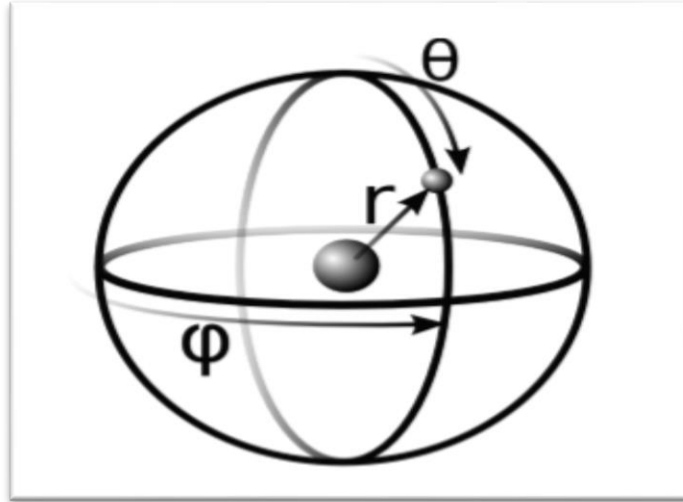
لدينا مؤثر لابلاس في الإحداثيات الكروية:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{1}{r^2 \sin \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (40-II)$$

نعوض  $\nabla^2$  في معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن (39-II) ونغير  $\Psi(r, \theta, \varphi) \rightarrow \Psi(x, y, z)$  نجد:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{1}{r^2 \sin \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi) \quad (41-II)$$

حيث أنه يتم وضع الحدود  $(r, \theta, \varphi)$  التالية  $0 \leq r \leq \infty$  و  $0 \leq \theta \leq \pi$ ،  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  على الإحداثيات الكروية القطبية وتوضيحها في الشكل الموالي:



الشكل (2-II): نموذج مبسط لذرة الهيدروجين ، بروتون في المركز  $r = 0$  يدور حوله إلكترون الموجودة حالياً في الإحداثيات الكروية  $(r, \theta, \varphi)$  [26].

كما يمكننا كتابة (II-41) كما يلي:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[ \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \Psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (42 - II)$$

علما بأن الطاقة الكامنة للإلكترون غير معروفة عند  $r \rightarrow \infty$  كما ينبغي أن يكون البروتون في اللانهاية ليس له تأثير مادي على الإلكترون لحل المشكلة يجب علينا أن نستخدم فصل المتغيرات.

#### 2.1.4.II فصل المتغيرات

الفكرة الأساسية وراء فصل المتغيرات هي حل المعادلة (II-42) لتعطي في النهاية الدالة  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  في حالة ذرة الهيدروجين الحل النهائي للدالة  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  مساويا لحاصل ضرب ثلاث دوال منفصلة ونكتب:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

بعد ذلك نستبدل نموذج الحل أعلاه في المعادلة (II-42) نجد:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[ \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = E R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (43-II)$$

الخطوة الموالية هي حل المشتقات والقسم على  $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  نجد:

$$\frac{\mu r e^2}{2\pi\epsilon_0} + \frac{\hbar^2}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + 2\mu E r^2 = \hbar^2 \lambda = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \right] \quad (44-II)$$

الطرف الأيسر من المعادلة (II-44) يعتمد فقط على  $r$  أما الطرف الأيمن مستقل عن  $r$ ، وهذا يعني أن كلا الجانبين مساو لثابت يدعى  $\lambda$ ، بعد إعادة ترتيب الطرف الأيمن نحصل على فصل  $\theta$  و  $\varphi$  كما يلي:

$$\frac{\sin \theta}{\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda \frac{\sin^2 \theta}{\hbar^2} = b^2 = \frac{-1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \quad (45-II)$$

نطبق نفس الطريقة مرة أخرى نلاحظ أن الجانب الأيسر من المعادلة (II-45) يعتمد فقط على  $\theta$  بينما الجانب الأيمن يعتمد فقط على  $\varphi$ ، وكلا الجانبين مساو لثابت يدعى  $b^2$  ويمكن أن يكون  $b$  عدد مركب، إذن ندرس كلا الجانبين فنحصل من الجانب الأيسر على معادلة تفاضلية تتعلق بـ  $\theta$  ومن الجانب الأيمن على

معادلة تفاضلية تتعلق ب  $\varphi$  وهما كالآتي:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + b^2\Phi = 0 \quad (46-II)$$

$$\frac{\sin\theta}{\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\theta}{d\theta} \right) + \lambda \frac{\sin^2\theta}{\hbar^2} = b^2 \quad (47-II)$$

و أخيرا نشير إلى الجانب الأيسر من المعادلة (44-II) فهو عبارة عن معادلة تفاضلية تتعلق ب  $R$  التالية [20]:

$$\frac{\mu r e^2}{2\pi\epsilon_0} + \frac{\hbar^2}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + 2\mu E r^2 = \hbar^2 \lambda \quad (48-II)$$

## 5.II حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين

بعد أن تم فصل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين إلى ثلاث معادلات تفاضلية عادية لكل متغير على حدى، يجب علينا حلها.

### 1.5.II الحل بالنسبة لـ $\Phi$

للمعادلة التفاضلية (46-II) المتعلقة ب  $\varphi$  الحلول القياسية التالية:

$$\Phi = A e^{ib\varphi} \quad (46 a)$$

$$\Phi = B e^{-ib\varphi} \quad (46 b)$$

بالتماثل لنموذج ذرة الهيدروجين حيث أن هذين الحلين لـ  $\varphi$  ينطوي على أن الإلكترون يتحرك في اتجاهين متعاكسين حول البروتون، وهكذا نختار مبدئياً الحل (46a) فقط ، مع العلم أن وظيفة الموجة يجب أن تكون بقيمة واحدة في كل نقطة، أي أن  $\varphi = \varphi_0 + 2\pi$  و  $\varphi = \varphi_0$  تمثل نفس القيمة  $\varphi_0$  ومنه نكتب  $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$  لكل  $\varphi$  يصبح شكل الحل (46a) كما يلي:

$$A e^{ib\varphi} = A e^{ib(\varphi+2\pi)} = A e^{ib\varphi} \cdot e^{ib2\pi} \rightarrow e^{ib2\pi} = 1 \quad (49-II)$$

ويترتب عن هذا أن  $b$  عدد صحيح الذي يمكننا أن نسميه عدد الكم المغناطيسي  $m$  حيث

$$m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

نعلم أن المرافق المركب  $e^{im\varphi}$  هو  $e^{-im\varphi}$  ومنه من شرط التنظيم نحدد قيمة الثابت  $A$  كالتالي:

$$\int_0^{2\pi} (Ae^{im\varphi})^*(Ae^{im\varphi}) d\varphi = 1 \rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (50-II)$$

ومنه نكتب الحل (46a) كما يلي:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (51-II)$$

## 2.5.II الحل بالنسبة لـ $\theta$

لحل المعادلة (47-II) المتعلقة بـ  $\theta$  نفرض أن  $\alpha = \cos \theta$  ونكتب  $\theta(\theta) = P(\alpha)$

لدينا العلاقات التالية:

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\alpha}{d\theta} \frac{d}{d\alpha} = -\sin \theta \frac{d}{d\alpha} \quad (47a)$$

$$\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta = 1 - \alpha^2 \quad (47b)$$

عند تعويض العلاقة (47a) في المعادلة (47-II) نجد:

$$\frac{-\sin^2 \theta}{\theta} \frac{d}{d\alpha} \left( -\sin^2 \theta \frac{d\theta}{d\alpha} \right) + \lambda \frac{\sin^2 \theta}{\hbar^2} = m^2 \quad (52-II)$$

نعوض العلاقة (47b) في المعادلة (52-II) ونكتبها على شكل معادلة صفرية كما يلي:

$$\frac{d}{d\alpha} \left( (1 - \alpha^2) \frac{d\theta}{d\alpha} \right) + \left( \lambda - \frac{m^2}{\hbar^2(1-\alpha^2)} \right) \theta = 0 \quad (53-II)$$

في الحالة العامة لهذه المعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية حلان مستقلان يصبحان لانهاية من أجل  $\alpha = \pm 1$ ، التابع الموجي يكون معدوم عند مسافة غير محددة  $\alpha \rightarrow \infty$ ، وتعرف هذه المعادلة بمعادلة ليجندر حيث يكون لها حلول عند  $l = 0, 1, 2, \dots$  و  $\lambda = l(l+1)$ ، كما أننا ندعو لعدد الكم  $l$  بالدفع الزاوي، أحد الحلان يمكن أن يكون معرف من أجل كل قيم  $\alpha$ .

من أجل  $m = 0$  فإن  $P(\alpha)$  ستكون كثير حدود لليجنندر (Legendre).

من أجل  $m \neq 0$  فإن الحل هو كثيرات الحدود ليجندر المرافقة  $P_l^m(\alpha)$  وهو حل دائما معرف، لن يكون ممكنا إلا إذا  $|m| < l$  بحيث:

$$P_l^{|m|}(\alpha) = (1 - \alpha^2)^{\frac{|m|}{2}} \cdot \frac{d^{|m|}}{d\alpha^{|m|}} P_l(\alpha) \quad (54-II)$$

ويكتب حل المعادلة (53-II) كما يلي:

$$\Theta_{l,m}(\theta) = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{2l+1}{4\pi}} P_l^m(\cos \theta) \quad (55-II)$$

### 3.5.II. الحل بالنسبة لـ $R$

تسمى المعادلة التفاضلية  $R(r)$  بالمعادلة النصف قطرية وهي كما نلاحظ دالة في نصف القطر  $r$  (بعد النواة عن الإلكترون) نعوض  $\lambda = l(l+1)$  في (48-II) نجد:

$$\frac{\mu r e^2}{2\pi\epsilon_0} + \frac{\hbar^2}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + 2\mu E r^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad (56-II)$$

كما يمكن أن نكتب المعادلة (56-II) كما يلي:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{\mu e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0 \quad (57-II)$$

لإعطاء الطاقة الحركية السالبة للجسيمات في المالا نهاية فإنه يجب أن نفرض هذا الشرط  $r \rightarrow \infty$  مع العلم أن الطاقات الكامنة في اللانهاية هو صفر وبالتالي يكون للجسيمات الطاقة الكلية السالبة  $E$ ، إذن نبدأ دراسة هذه المعادلة التفاضلية لـ  $R$  تحت الشرط  $r \rightarrow \infty$ :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R = 0 \quad (58-II)$$

ولها حلول خاصة وهي:

$$R(r) = e^{\left( \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} r \right)} = e^{\beta r} \quad (58a)$$

$$R(r) = e^{-\left( \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} r \right)} = e^{-\beta r} \quad (58b)$$

حيث :

$$\beta = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} = cte \quad (59-II)$$

يقبل الحل (58b) لأنه يحقق  $r \rightarrow 0$  وإضافة إلى ذلك يحقق شرط التنظيم وهو أساس كل تابع موجي .

ومنه فإن  $R(r)$  هي عبارة عن ضرب دالتين كما يلي:

$$R(r) = f(r) e^{-\beta r} \quad (60-II)$$

حيث  $f(r)$  : كثير حدود.

نعوض في المعادلة (57-II) عبارة  $R(r)$  بما يساويها نجد:

$$\frac{d^2}{dr^2} (f(r) e^{-\beta r}) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} (f(r) e^{-\beta r}) + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{\mu e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) f(r) e^{-\beta r} = 0 \quad (61-II)$$

$$[k(k+1) - l(l+1)]r^{k-2} - \left( 2\beta k + 2\beta + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right) r^{k-1} = 0 \quad (62-II)$$

(الملحق A)

### 1.3.5.II تحديد عوامل كثير الحدود $f(r)$

• حالة  $r^{k-1}$

$$-\left( 2\beta k + 2\beta + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right) = -\left( 2k + 2 + \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right) \beta = 0 \quad (63-II)$$

$$-\left( 2k + 2 + \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right) \beta = 0 \rightarrow \begin{cases} -\beta = 0 & \text{مرفوض} \\ \left( 2k + 2 + \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right) = 2(k+1) + \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 E} = 0 \end{cases}$$

$$\rightarrow 2(k+1) = -\frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \rightarrow k+1 = -\frac{\beta e^2}{8\pi\epsilon_0 E} \quad (64-II)$$

نعوض (59-II) في العبارة (64-II) نجد:

$$k+1 = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 E} \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 \hbar} \frac{\sqrt{-2\mu}}{E} = n \quad (65-II)$$

$$\rightarrow k+1 = n \rightarrow k = n-1 \quad (66-II)$$

ومنه كثير الحدود  $f(r)$  يصبح:

$$f(r) = r^{n-1} \quad (67-II)$$

بما أن  $k$  عدد صحيح فإن  $n$  عدد صحيح.

• حالة  $r^{k-2}$

لتحديد العامل الثاني لـ  $f(r)$  نبحث عن عامل من أجله الحد المضروب  $r^{k-2}$  معدوم نضع  $k = g$  ونبحث عن  $g$  لأن  $k$  وجدناه سابقا فتصبح المعادلة (62-II) كما يلي:

$$[g(g+1) - l(l+1)]r^{g-2} - \left(2\beta k + 2\beta + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E}\right)r^{g-1} = 0 \quad (68-II)$$

$$g(g+1) - l(l+1) = 0 \rightarrow \begin{cases} g = l \\ g = -(l+1) \end{cases} \text{ أو} \quad (69-II)$$

إذن يوجد حلين للمعادلة (68-II) فالحل  $g = -(l+1)$  من أجل الطاقة السالبة ويستوجب أن  $r \rightarrow 0$  وكثافة الاحتمال  $P(r) \rightarrow \infty$  وهو غير ممكن لأنه لا يحقق شرط التنظيم ومنه فالحل المقبول هو  $g = l$  ومن هنا نكتب كثير الحدود  $f(r)$  كما يلي:

$$f(r) = r^l \quad (70-II)$$

بالمطابقة مع  $r^{n-1}$  نجد  $n-1 = l$  ومع العلم أن:

$$0 < l < n-1 \quad (71-II)$$

لأن  $l$  يخص الدرجة الثانية و  $n-1$  يخص الدرجة الأولى.

وعليه يمكن كتابة  $f(r)$  تتعلق  $n$  و  $l$  أعداد معروفة في الفيزياء الذرية بتغيرها بتغير الطاقات إذن:

$$f_{l,n}(r) = \sum_{s=l}^{n-1} a_{l,n,s} r^s \quad (72-II)$$

نعوض (72-II) في العبارة (60-II) حيث نكتب  $R_{l,n}(r)$  نجد:

$$R_{l,n}(r) = \left(\sum_{s=l}^{n-1} a_{l,n,s} r^s\right) e^{-\beta r} = \left(\sum_{s=l}^{n-1} a_{l,n,s} r^s\right) e^{-\frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} r} \quad (73-II)$$

## 6.II عبارة دالة الموجة النهائية

من خلال المعادلات الثلاثة (51-II)، (55-II) و (73-II) السابقة يمكننا أن نكتب العبارة النهائية لدالة الموجة كما يلي [26]:

$$\Psi_{l,m,n}(r, \theta, \varphi) = \left(\sum_{s=l}^{n-1} a_{l,n,s} r^s\right) e^{-\frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} r} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{2l+1}{4\pi}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (74-II)$$

## 7.II عبارة الطاقة لذرة الهيدروجين الحرة

القيم الخاصة للهاملتون H أي القيم الممكنة للطاقة الكلية للمجموعة إلكترون- نواة التي يتم الحصول عليها مما لدينا [26]:

$$-\frac{\beta e^2}{8\pi\epsilon_0 E_n} = n \rightarrow -\frac{e^2\sqrt{2\mu}}{8\pi\epsilon_0 E_n} = n \quad (75-II)$$

$$E_n = \frac{1}{n^2} \frac{\mu}{32\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\pi\epsilon_0} = \frac{1}{n^2} E_1 = \frac{E_1}{n^2} \quad (76-II)$$

إذن وجدنا عبارة الطاقة لذرة الهيدروجين الحرة التي تعطي كل السلاسل الطيفية له، قيم الطاقة هذه تعتمد على  $n$  ولا تدخل قيم  $l$  و  $m$  أي أنه هناك العديد من الحالات الكوانتية المميزة والمنفصلة والمطابقة لنفس قيمة الطاقة  $E$ ، نقول عن هذه المستويات من الطاقة بأنها متوالية ورتبة توالدها مساو إلى عدد هذه الحالات الكوانتية المنفصلة أي عدد التوافقيات الممكنة والتي يمكن أن تشكلها مع مختلف قيم  $l$  و  $m$ ، علما بأن نظرية المدارات الدائرية لا تدخل مفهوم التوالد [28].

## الخاتمة

لقد تم في هذا الفصل حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين الحرة في الفضاء المعتاد، وبالتالي الحصول على قيم الطاقة الممكنة لها في أي سوي كان، وذلك من خلال مؤثر الهاملتون  $\hat{H}$  المذكور آنفا.

## الفصل الثالث

حل معادلة شرودينجر  
لذرة الهيدروجين في  
N بعد

## III.1 مقدمة

إن التأثير الكمي على الخصائص الفيزيائية للنظام موضوع ذا أهمية كبيرة في الفيزياء [29]، لقد تم دراسة ذرة الهيدروجين الحرة في الفضاء المعتاد في الفصل السابق. وقد نوقشت مؤخراً ذرات الهيدروجين المقيدة بشكل مكافئ [30]، حيث استخدمت طرق مختلفة في دراسة ذرة الهيدروجين المقيدة على مدى العقدين الماضيين، من أجل تعميم مشاكل الكم ثلاثية الأبعاد إلى أبعاد أعلى لقيت تطوراً كبيراً في الفيزياء النظرية والرياضية [31]، ففي هذا الفصل نعتد على حل معادلة شرودينجر لـ N بعد من أجل الحصول على عبارة الطاقة العامة  $E_n$ ، التي تمكنا من معرفة موضع الإلكترون مهما تغير البعد الفضائي N وعدد الكم الرئيسي n ونصف قطر التجويف S، وذلك باعتبار ذرة الهيدروجين مقيدة داخل فجوة نصف قطرها S في N بعد.

## III.2 معنى فضاء متعدد الأبعاد (N بعد)

من أجل دراسة ذرة الهيدروجين في فضاء متعدد الأبعاد، وجب علينا أولاً أن نعطي مفهوم شامل يلخص معنى فضاء متعدد الأبعاد (فضاء ذو N بعد)، وذلك من خلال نظرية الأوتار الفائقة.

## III.2.1 مدخل لنظرية الأوتار الفائقة

إن النظريتان اللتان يعتمد عليهما الفيزيائيين في فهم سير الكون بما يحمل بشكل عام هما « النسبية العامة - ميكانيكا الكم ».

**فالنظرية الأولى وهي النسبية العامة لألبرت آينشتاين 1917م التي أكد صحة تنبأ كارتان (cartan) للفراغ ذي الأبعاد الثلاثة حسب غاليليو ونيوتن بعداً رابعاً وهو الزمن، وأصبح الفراغ رباعي الأبعاد يدعى بالزمكان [4، 32]، وهي تُقدم شرحاً نظرياً لفهم عالم الأحجام أو الأبعاد الكبرى في الكون مثل (الكواكب، النجوم، المجرات، عناقيد المجرات أيضاً، وحتى المدى وراء الكون نفسه، والقوى التي تُحرّكها)، أما النظرية الثانية وهي ميكانيكا الكم تقدم فهماً أكثر لعالم مُتناهي الصغر في المادة، وهو عالم الذرات والجسيمات والعالم دون الذري أيضاً [33، 34].**

فكلتا النظريتان تقدمان شرحاً مُفصلاً لعالمين مُختلفين تماماً، لذا ليس بمقدور أيّ من الفيزيائيين أن يدمجها سوياً، أو تطبيقهما معاً. فلكل نظرية طريقة سير وقوانين تختلف تماماً عن الأخرى، والأكثر من ذلك أن تطبيق إحداهما ينفي الأخرى بحيث تكون واحدة فقط هي الصحيحة [34]، هذا التوتر والتناقض في وصف المادة المُكوّنة جميعها من ذرات كان لا بد له أن ينتهي وأن تُوجد نظرية فيزيائية صحيحة مُوحدة تستطيع دمج هاتين النظريتين دون أخطاء.

فكانت نظرية الأوتار الفائقة «Superstring Theory» هي واحدة من أحدث النظريات العلمية التي يعتمد عليها العلماء لتفسير بعض الظواهر في المستقبل، لذا تعتبر من أهم النظريات في

علم الفيزياء والرياضيات لأنها ستحدث تغييرات جذرية فيها وخاصة علم الفلك، بالرغم من أنها لا تزال نظرية قيد الدراسة إلا أنها لفتت انتباه العديد من الفيزيائيين الباحثين في العالم، وهي النظرية التي أتت لتضع حلاً لذلك التناقض، بل تعتمد صحة قبولها وتطبيقها على تطبيق كل من ميكانيكا الكم والنسبية معاً [4].

وإذا ما نظرنا لطريقة سير الكون، فالأشياء سواءً أكانت في عالم الأحجام الكبيرة أو في العالم مُتناهي الصغر، فهناك قوى رئيسية تحكمها ومسؤولة عنها، تُعرَف بالقوى الطبيعية الأربع وهي «القوة النووية الشديدة، القوة الضعيفة، الجاذبية، والقوة الكهرومغناطيسية» [33، 35].

### 2.2.III سبب تسمية نظرية الأوتار

نظرية الأوتار الفائقة فكرتها الأساسية تركز على أننا لو فحصنا أي جسيمات بدقة تزيد أضعافاً مضاعفة عن فحوصاتنا المعهودة، فإننا سنرى أن هذه الجسيمات ليست مجرد نقطة، بل أصغر من ذلك بكثير ومكوّنة من أنشودة (خيوط رفيعة مغلقة) أحادية البعد.

أي أن الجسيمات هي أوتارٌ مُهتزة «vibrating strings» ويعود كل نمط من أنماط الاهتزاز إلى نوع مُعين من الجسيمات لذا أطلق على هذه الأنشودة اسم «الوتر - String» لهذا السبب سميت بنظرية الأوتار.

### 3.2.III مفهوم الأبعاد في نظرية الأوتار الفائقة

الأبعاد في نظرية الأوتار يتعدى مفهوم الأبعاد في الكون الذي نعرفه، ثلاث أبعاد رئيسية وهي (الطول، العرض، الارتفاع)، بالإضافة إلى البعد الرابع (الزمن) الذي بينه **كارتان** (cartan) [4]، وأكد اينشتاين وسماه بالزمكان [26]، حيث أن عدد الأبعاد في معظم نظرياتها هو 10 أبعاد 9 أبعاد مكانية وبعد واحد زمني؛ لاحظ العالم إدوارن ويتن (Edward witten) عام 1995م أن هناك نظرية مناسبة وشاملة لـ 5 نظريات وهي «M - theory» تتطلب وجود سبعة أبعاد إضافية افتراضية مثبتة رياضياً لتنتمك النظرية من تكوين هندسة موحدة للكون بأكمله، تخيل هذا الأمر كونٌ بإحدى عشر بُعداً زمكانياً «Space-time Dimensions»، أليس أمراً غريباً بالنسبة لنا؟ على الرغم من ذلك، يعتقد الكثير من الفيزيائيين أنّ هذه الأبعاد الإضافية مُمكنة الوجود وهناك سعيٌ حثيث لإيجاد طرقٍ ما لكشفها وإثبات وجودها، ولنتمكن من وصف الكون وصفاً صحيحاً وفقاً للنظرية التي تبرز وجود 6 أبعاد مكانية على أنها مضغوطة في حيزٍ صغير جداً من الفضاء على شكل كرية صغيرة قطرها حوالي  $10^{-33}$  سم، لدرجة أننا لا نلاحظها.

وفي نظرية الأوتار البوزونية تصل أبعاد الفضاء إلى 26 بُعداً زمكانياً باعتبارها منطوية على نفسها، كما تجزم أن كوننا ليس إلا بمساحة قليلة من فضاء واسع يضم أكواناً عدة و بأبعاد مختلفة و احتمال أن هذه الأكوان الأخرى تحكم بقوانين مماثلة لقوانيننا الفيزيائية أو مختلفة تماماً [4].

لتعيين عدد أبعاد الفضاء في نظرية الأوتار نكتب  $D_p$  brane حيث P هو عدد أبعاد الفضاء المكانية، وبالتالي عدد الأبعاد المكانية مع الزمان (P+1) ، D ترمز لأول حرف من اسم عالم الرياضيات (Dirichlet)، ومنه نكتب في حالة:

- ✓ نقطة أو جسيم  $D_0$  brane
- ✓ الخط أو الوتر  $D_1$  brane
- ✓ الصفحة أو الغشاء  $D_2$  brane
- ✓ الحجم  $D_3$  brane
- ✓ نظرية الاوتار البوزونية  $D_{25}$  brane

وفي دراستنا هذه نحن بحاجة الى فضاء متعدد الأبعاد، أي لانهاية الأبعاد والفضاء المناسب هو فضاء هيلبرت وهو عبارة عن توسيع ثلاث أبعاد الفضاء إلى فضاء لامتناهي الأبعاد [4].

### 3.III ذرة الهيدروجين في N بعد

تعتبر ذرة الهيدروجين محصورة وسط تجويف فضائي بعده N بنصف قطر S، تكتب معادلة شرودينجر كما يلي [19]:

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (1-III)$$

### 1.3.III حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين في N بعد

بافتراض أن جدران التجويف غير نفوذة فإن الطاقة الكامنة  $V(r)$  تكتب كما يلي [31، 37]:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} & 0 \leq r \leq S \\ \infty & \text{غير ذلك} \end{cases} \quad (2-III)$$

من أجل كتابة مؤثر لابلاس  $\nabla^2$  في N بعد بدلالة الإحداثيات الكروية يجب إيجاد العلاقة بين الإحداثيات الكروية في الفضاء الاقليدي لـ N بعد  $(r, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-2}, \varphi)$  حيث

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 \leq \theta_i \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ i = 1, \dots, N - 2 \end{array} \right.$$

والإحداثيات الديكارتية  $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$  حيث:

$$x_1 = r \cos \varphi \sin \theta_1 \sin \theta_2 \dots \dots \dots \sin \theta_{N-2}$$

$$x_2 = r \sin \varphi \sin \theta_1 \sin \theta_2 \dots \dots \dots \sin \theta_{N-2}$$

$$x_3 = r \cos \theta_1 \sin \theta_2 \dots \dots \dots \dots \dots \sin \theta_{N-2}$$

$$x_i = r \cos \theta_{i-2} \sin \theta_{i-1} \dots \dots \dots \dots \sin \theta_{N-2}$$

$$x_N = r \cos \theta_{N-2}$$

ومنه يكتب مؤثر لابلاس في N بعد كما يلي [2,31,37]:

$$\nabla^2 = r^{(1-N)} \frac{d}{dr} \left( r^{(N-1)} \frac{d}{dr} \right) \frac{1}{r^2} \Lambda^2 \quad (3-III)$$

حيث:

r : هو نصف قطر التجويف الفضائي.

$\Lambda^2$  : هو عامل لابلاس في وحدة النسبة الكروية  $S^{(N-1)}$  [2].

باستعمال فصل المتغيرات، تم تقسيم معادلة شرودينجر إلى معادلتين قطرية وتفاضلية زاوية

تكتب معادلة شرودينجر القطرية كما يلي:

$$r^{(1-N)} \frac{d}{dr} \left( r^{(N-1)} \frac{d}{dr} \right) - \frac{\beta}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) R = 0 \quad (4-III)$$

حيث:

$$\beta = l(l + N - 2), l = 0,1,2,3 \dots$$

باعتبار أن E سالبة في بعض الحالات المحدودة نحدد  $\lambda$  و  $\rho$  كالتالي:

$$\lambda = \sqrt{\frac{z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2 (-E)}} = \sqrt{\frac{Z^2 E_0}{E}} = \frac{\hbar}{a_0} \frac{1}{\sqrt{-2\mu E}} \quad (5-III)$$

$$\rho = q r = \frac{\sqrt{8\mu(-E)}}{\hbar} r$$

$$\rightarrow q = \frac{\sqrt{8\mu(-E)}}{\hbar}$$

$$\rho = \frac{2}{a_0 \lambda} r \quad (6-III)$$

مع  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} m$  وهو نصف قطر بور [37].

وباستعمال

$$\frac{dR}{dr} = \frac{dR}{d\rho} \frac{d\rho}{dr} = q \frac{dR}{d\rho} \rightarrow \frac{d^2 R}{dr^2} = q^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2} \quad (7\text{-III})$$

يصبح الجزء القطري لمعادلة شرودينجر في N بعد كما يلي:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \left( \frac{N-1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{l(l+N-2)}{\rho^2} R + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R = 0 \quad (8\text{-III})$$

إن حل هذه المعادلة عندما تكون  $\rho \rightarrow \infty$  نحصل على:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R = 0 \rightarrow R(\rho) \propto e^{\rho/2} \quad (9\text{-III})$$

نقرب إلى الحل عندما تكون  $\rho \rightarrow 0$  نحصل على:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{l(l+N-2)}{\rho^2} R = 0 \quad (10\text{-III})$$

حل هذه المعادلة يعطى بالشكل:

$$R(\rho) = \rho^l e^{\rho/2} S(\rho) \quad (11\text{-III})$$

نعوض المعادلة (11-III) في المعادلة (8-III) نجد [31، 37]:

$$\frac{d^2 S}{d\rho^2} + \left( \frac{2l+N-1}{\rho} - 1 \right) \frac{dS}{d\rho} + \left( \frac{\lambda-l-\frac{N-1}{2}}{\rho} \right) S = 0 \quad (12\text{-III})$$

نستطيع أن نكتب  $S(\rho)$  كما يلي [2، 37]:

$$S(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j \quad (13\text{-III})$$

بعد حساب المشتق الأول والثاني لـ (13-III) وتعويضهما في (12-III) نجد:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0} j(j-1)a_j\rho^{j-2} + \left(\frac{2l+N-1}{\rho}\right)\sum_{j=0} ja_j\rho^{j-1} - \sum_{j=0} ja_j\rho^{j-1} + \\ & \left(\frac{\lambda-l-\frac{N-1}{2}}{\rho}\right)\sum_{j=0} a_j\rho^j = 0 \end{aligned} \quad (14-III)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0} j(j-1)a_j\rho^{j-2} + (2l+N-1)\sum_{j=0} ja_j\rho^{j-2} - \sum_{j=0} ja_j\rho^{j-1} + \\ & \left(\lambda-l-\frac{N-1}{2}\right)\sum_{j=0} a_j\rho^{j-1} = 0 \end{aligned} \quad (15-III)$$

نضع  $z = j + 1$  في كل من الجزء الأول والثاني من العبارة (15-III) فنحصل على:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=-1} j(j+1)a_{j+1}\rho^{j-1} + (2l+N-1)\sum_{j=-1} (j+1)a_{j+1}\rho^{j-1} - \\ & \sum_{j=0} ja_j\rho^{j-1} + \left(\lambda-l-\frac{N-1}{2}\right)\sum_{j=0} a_j\rho^{j-1} = 0 \end{aligned} \quad (16-III)$$

بدلا من  $j = -1$  نكتب  $z = 0$  في العبارة (13-III) نجد:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0} j(j+1)a_{j+1}\rho^{j-1} + (2l+N-1)\sum_{j=0} (j+1)a_{j+1}\rho^{j-1} - \\ & \sum_{j=0} ja_j\rho^{j-1} + \left(\lambda-l-\frac{N-1}{2}\right)\sum_{j=0} a_j\rho^{j-1} = 0 \end{aligned} \quad (17-III)$$

من المعادلة (17-III) نحصل على مساواة ذات معاملات متساوية الأس كالتالي:

$$[j(j+1) + (2l+N-1)(j+1)] a_{j+1} = \left[j - \left(\lambda-l-\frac{N-1}{2}\right)\right] a_j \quad (18-III)$$

ومن ثم نحصل على العلاقة التالية:

$$\begin{aligned} a_{j+1} &= \frac{\left[j - \left(\lambda-l-\frac{N-1}{2}\right)\right]}{[j(j+1) + (2l+N-1)(j+1)]} a_j \\ &= \frac{\left[j+l+\frac{N-1}{2}-\lambda\right]}{(j+1)(j+2l+N-1)} a_j \end{aligned} \quad (19-III)$$

نضع  $J_{max} = z$  نجد:

$$J_{max} + l + \frac{N-1}{2} - \lambda = 0$$

بغية أن تكون الدالة في المعادلة (11-III) لها سلوك مقارب مقبول يجب أن ينتهي توسيع السلسلة في المعادلة (13-III)، مما يعني أن يجب أن يكون متعدد الحدود في  $\rho$  مع ملاحظة أن القوة  $\rho$  تظهر في  $S(\rho)$ ، بوضع  $n_r = J_{max}$  حيث  $n_r$  عدد الكم الشعاعي ويأخذ القيم

$n_r = 0, 1, 2, \dots$ ، ومنه يمكن أن نكتب:

$$n_r + l + \frac{N-1}{2} = \lambda$$

إذا قدمنا  $\acute{n}$  عدد الكم الرئيسي لـ  $N$  بعد حيث :

$$\acute{n} = \lambda = n_r + l + \frac{N-1}{2} \quad (20-III)$$

مقارنة بمعادلة (laguerre) المرتبطة بها التالية:

$$\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{P+1}{\rho} - 1\right) \frac{d}{d\rho} + \left(\frac{q-p}{\rho}\right) L_q^P(\rho) = 0 \quad (21-III)$$

مع المعادلة (21-III) يعطي [38,37,31]:

$$q = \acute{n} + l + \frac{N-3}{2}, \quad p = 2l + N - 2 \quad (22-III)$$

الطاقة الكامنة في  $N$  بعد تعطى كما يلي:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \left[ l(l + N - 2) + \frac{(N-1)(N-3)}{4} \right] \frac{1}{r^2} \quad (23-III)$$

إذا وضعنا:

$$l'(l' + 1) = l(l + N - 2) + \frac{(N-1)(N-3)}{4}$$

نحصل على:

$$l' = l + \frac{(N-3)}{2} \quad (24-III)$$

ولكن في فضاء ثلاثي الأبعاد يتم إعطاء العدد الكمي الرئيسي  $n$  كما يلي :

$$n = n_r + l + 1 \quad (25-III)$$

المعادلتين (24-III) و (25-III) تعني أن العدد الكمي الرئيسي  $\acute{n}$  في  $N$  بعد يرتبط ذلك مع  $n$  في ثلاث أبعاد ومنه [37]:

$$\acute{n} = n + \frac{(N-3)}{2} \quad (26-III)$$

من خلال المعادلتين (11-III) و (22-III) نستنتج حل قطري كما يلي [31]:

$$R_{\lambda,l}(\rho) = A\rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l+N-3}^{2l+N-2}(\rho) \quad (27-III)$$

أو

$$R_{\lambda,l}(\rho) = A'\rho^l e^{-\rho/2} (\rho) {}_1F_1(a, b, z) \quad (28-III)$$

وتدعى المعادلة (28-III) بـ Confluent Hyper geometric function ونكتب  
 ${}_1F_1(a, b, z)$  كما يلي :

$${}_1F_1(a, b, z) = \sum \frac{(a)_n z^n}{(b)_n (n)!}$$

حيث:

$$\begin{cases} a = l + \frac{N-1}{2} - \lambda \\ b = 2l + N - 1 \\ z = \rho \end{cases} \quad (29-III)$$

حيث يتم تعريف رمز pochhammer  $(a)_n$  بـ [38]:

$$(a)_n = a(a+1)(a+2)(a+3) \dots (a+n-1) \quad (30-III)$$

ومنه يمكننا كتابة (28-III) كما يلي:

$$R_{\lambda,l}(\rho) = A'\rho^l e^{-\rho/2} (\rho) {}_1F_1\left(l + \frac{N-1}{2} - \lambda, 2l + N - 1, \rho\right) \quad (31-III)$$

$$A' = A \frac{(\lambda + l + \frac{N-3}{2})!}{(\lambda - l - \frac{N-1}{2})! (2l + N - 2)!} \quad \text{حيث:}$$

حيث A: هو ثابت التنظيم الذي يتم تحديد قيمته من شرط التنظيم.

$$A^2 \int_0^\infty \left[ \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l+N-3}^{2l+N-2}(\rho) \right]^2 r^{N-1} dr = 1 \quad (32-III)$$

باستخدام تعريف كل من  $r$  و  $l$  ، ومع العلم أن  $\hbar = \lambda$  نحصل على:

$$\rho = \frac{2Z}{a_0(n+(N-3)/2)} r \quad (33-III)$$

ومنه تصبح المعادلة (33-III) كالتالي:

$$A^2 \left( \frac{a_0(n+(N-3)/2)}{2Z} \right)^N \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2(l+(N-3)/2)} [L_{n+l+N-3}^{2l+N-2}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = 1 \quad (34-III)$$

كما يمكننا القول أن هذا التكامل في المعادلة (34-III) هو الذي يمكن أن يحصل إذا تم استبدال  $n$  و  $l$  بـ  $l + (N - 3)/2$  و  $n + (N - 3)/2$  في التكامل المقابل للحالة الثلاثية الأبعاد على التوالي ومنه نستنتج ما يلي:

$$A = \left[ \left( \frac{2Z}{a_0(n+(N-3)/2)} \right)^N \frac{(n-l-1)}{2(n+(N-3)/2)[(n+l+N-3/2)!]^3} \right]^{1/2} \quad (35-III)$$

عند تطبيق الشروط الحدية في  $r = s$  حيث  $S$  هو نصف قطر التجويف. الطاقة الكامنة في جدران تجويف هي  $\infty$ ، فنقل دالة الموجة هناك، وبالتالي يمكننا كتابة:

$$R_{\lambda,l}(\rho)|_{r=s} = R(qS) = 0 \quad (36-III)$$

للإشارة إلى قيم  $\rho$  حيث دالة الموجة  $R_{\lambda,l}$  تتلاشى، هناك برنامج رياضي يدعى "MATLAB9" يرسم الدالة  ${}_1F_1$  ببيانها من أجل قيم  $N$  و  $S$  و  $l$  معطاة، حيث  $\rho$  هو جذر الدالة  ${}_1F_1$  وقد يكون هناك أكثر من جذر أي  $n^{\text{th}}$  جذر ومنه نرمز لـ  $\rho$  بـ  $X_n$ ، ومن خلال العبارة (6-III) وبتعويض  $S = r$  نجد [37,31]:

$$\lambda = \frac{2S}{a_0 X_n} \quad (37-III)$$

### III.4 طاقات ذرة الهيدروجين المقيدة والحررة

هدفنا هنا هو التحقيق في تأثير حجم التجويف والبعد الفضائي على طاقة ذرة الهيدروجين المحصورة داخل تجويف فضائي مغلق، وبما أن من المفترض أن يكون التجويف غير قابل للاختراق، ووظيفة الدالة يجب أن تتعدم على سطح التجويف أي  $S = r$ ، باستخدام المعادلة (37-III) ومن المعادلة (5-III) تعطي عبارة القيم الذاتية للطاقة:

$$E_n = \frac{-\hbar^2}{2\mu a_0^2} \frac{1}{\lambda^2} = \frac{-\hbar^2 X_n^2}{2\mu 4S^2} \quad (38-III)$$

عند استخدام قيمة الطاقة الاساسية في ثلاثة أبعاد تكون كالتالي:

$$E_0 = \frac{-\hbar^2}{2\mu a_0^2} = -13,6 \text{ eV} \quad (39-III)$$

ومنه

$$E_{n \text{ conf}} = \frac{Xn^2 a_0^2}{4S^2} E_0 \quad (40\text{-III})$$

وهي صيغة أخرى لحساب قيم الطاقة لذرة الهيدروجين المقيدة داخل تجويف كروي نصف قطره  $S$  [37,31].

للمقارنة لاحقا بين طاقة كل من ذرة الهيدروجين المقيدة و ذرة الهيدروجين الحرة، يمكننا كتابة عبارة الطاقة لذرة الهيدروجين الحرة في  $N$  بعد من خلال المعادلتين (20-III) و (26-III) كما يلي [2]:

$$E_{n \text{ free}} = \frac{E_0}{\left(n_r + l + \frac{N-1}{2}\right)^2} \quad (41\text{-III})$$

$$E_{n \text{ free}} = \frac{E_0}{\left(n + \frac{N-3}{2}\right)^2} \quad (42\text{-III})$$

### خاتمة

في هذا الفصل اعتبرنا ذرة الهيدروجين محصورة داخل تجويف كروي نصف قطره  $S$ ، وأخرى حرة في  $N$  بعد، تم ايجاد عبارة الطاقة النهائية  $E_n$ ، وذلك من خلال حل معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن في  $N$  بعد، في حين أن قيم الطاقة في حالة ذرة الهيدروجين المحصورة في فجوة كروية مغلقة تتغير بتغير نصف قطر الفجوة  $S$  وبعد الفضاء  $N$ . أما عن ذرة الهيدروجين الحرة فإن قيم الطاقة تعتمد على بعد الفضاء  $N$  وعدد الكم الرئيسي  $n$ .

## الفصل الرابع

تحليل ومناقشة نتائج  
حالات الطاقة لذرة  
الهيدروجين

## 1.VI مقدمة

لإحصاء الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة والحررة في فضاء ذو  $N$  بعد، قمنا باستخدام برنامج حساب عددي بلغة MATLAB لتلبية هذا الغرض، وذلك بالاعتماد على حل معادلة شرودينجر في فضاء ذو  $N$  بعد التي نتج عنها صيغة للحل  $R_{\lambda,l}(\rho)$  تدعى Confluent Hyper geometric function، ويتحقق الحل عند حدود الفجوة، ولتحقيق هذا يجب أن نجد النقاط التي تنعدم عندها المعادلة  ${}_1F_1$  المتضمنة في صيغة الحل  $R_{\lambda,l}(\rho)$ ، في هذا الفصل سوف نقوم بإعطاء ومناقشة النتائج المتمثلة في قيم الطاقة.

## 2.VI نتائج حساب الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين الحررة والمقيدة

من أجل الحصول على قيم الطاقة المتاحة لذرة الهيدروجين سواء كانت مقيدة أم حررة نستخدم برنامج عددي بلغة "MATLAB 9" لإيجاد الجذور  $Xn$  للمعادلة  ${}_1F_1$  التي تعد صيغة الحل لمعادلة شرودينجر في  $N$  بعد وذلك عند حدود الفجوة حيث:

$${}_1F_1 \left( l + \frac{N-1}{2} - \lambda, 2l + N - 1, \rho \right) = \sum \frac{\left( l + \frac{N-1}{2} - \lambda \right)_n \rho^n}{(2l + N - 1)_n (n)!} \quad (1-VI)$$

$$\lambda = \frac{2S}{a_0 Xn} \quad \text{حيث:}$$

$$Xn = \rho$$

والتي يتحقق عندها الحل لتحديد قيم الطاقة لذرة الهيدروجين المقيدة حسب العلاقة:

$$E_{n \text{ conf}} = \frac{Xn^2 a_0^2}{4S^2} E_0 \quad (2-VI)$$

أما عن ذرة الهيدروجين الحررة فقيم الطاقة المتاحة لها في أي مستوي كان حسب العلاقة:

$$E_{n \text{ free}} = \frac{E_0}{\left( n + \frac{N-3}{2} \right)^2} \quad (3-VI)$$

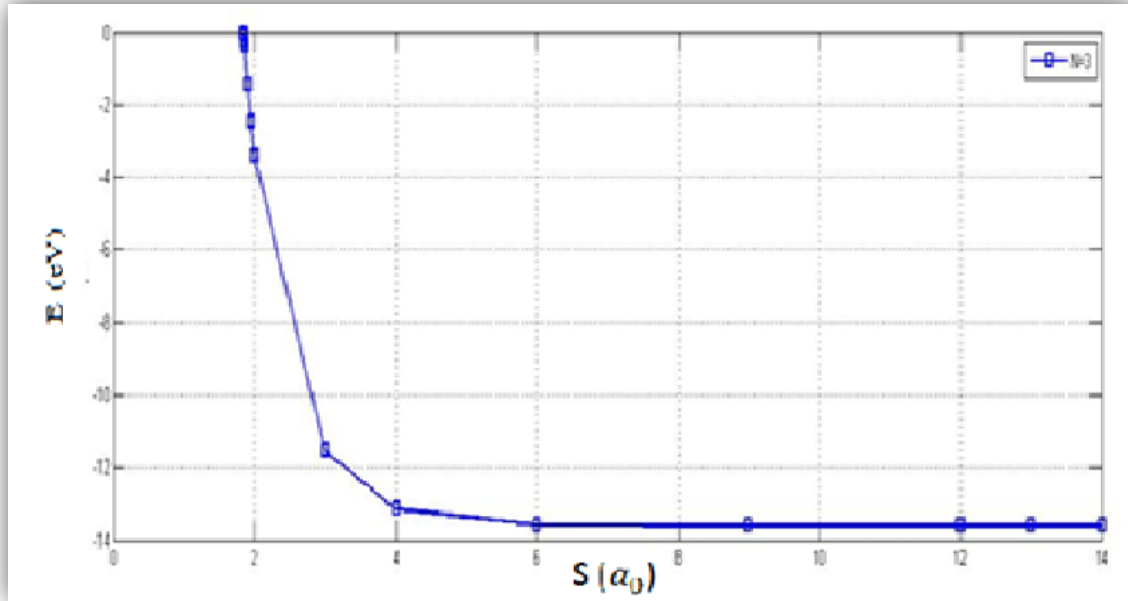
## 1.2.VI مناقشة قيم الطاقة لذرة الهيدروجين المقيدة

لحساب أي طاقة معينة لذرة الهيدروجين عندما تكون مقيدة، علينا أولاً أن نقترح قيم مختلفة لنصف قطر التجويف  $S$  الذي يعطي أنيا حصر ذرة الهيدروجين ضمن التجويف الكروي.

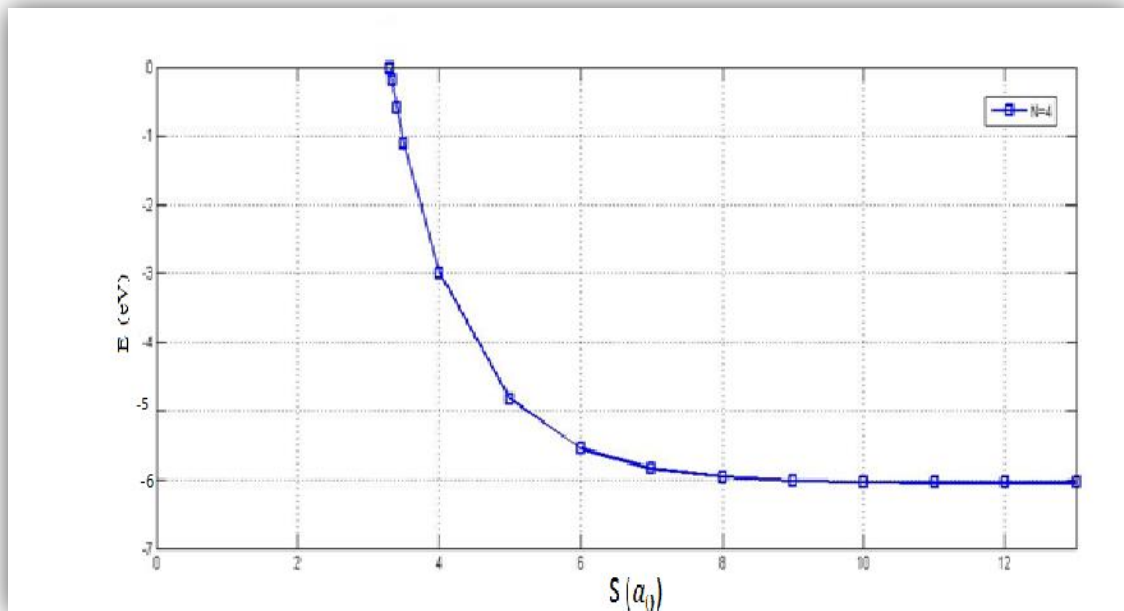
الجدول (VI-1): الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة، لقيم مختلفة من S عند N=3

وN=4 في حالة  $l=0$ .

N=3			N=4		
S ( $a_0$ ) m	Xn	E(eV)	S ( $a_0$ ) m	Xn	E(eV)
14	28.0000	-13.600	13	17.3326	-6.04390
	13.9447	-3.3732		9.4881	-1.81110
	5.0190	-0.4370			
13	26.0000	-13.6000	12	15.9980	-6.04300
	12.9010	-3.3484		8.2715	-1.61540
	1.2250	-0.0302			
12	24.0000	-13.6000	11	14.6616	-6.04020
	11.8267	-3.3025		6.8434	-1.31590
9	17.9999	-13.5999	10	13.3205	-6.03280
	8.1631	- 2.7971		5.0121	-0.85410
6	11.9913	-13.5803	9	11.9689	-6.01320
				1.7826	-0.13340
4	7.8650	-13.1448	8	10.5948	-5.96330
3	5.5250	-11.5319	7	9.1745	-5.84050
2	2.0000	-3.4000	6	7.6613	-5.54350
1.95	1.6662	-2.4824	5	5.9547	-4.82230
1.9	1.2494	-1.4703	4	3.7537	-2.99420



الشكل (1-VI): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف S عندما N=3.



الشكل (2-VI): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف S عند N=4.

1.85	0.5954	-0.3521	3.5	2.0000	-1.11020
1.845	0.4840	-0.2340	3.4	1.4228	-0.59540
1.84	0.3378	-0.1146			
1.8375	0.2326	-0.0545	3.33	0.8058	-0.19910
1.8365	0.1735	-0.0303	3.3	0.2491	-0.01940
1.8355	0.0780	-0.0061	3.2995	0.2286	-0.01630
1.83525	0.0094	-0.0001	3.2985	0.1809	-0.01020
1.835247	0.0040	-0.000016	3.2975	0.1147	-0.00410
			3.2970	0.0582	-0.00110
			3.2969	0.0378	-0.00040
			3.29685	0.0212	-0.00010
			3.29683	0.0076	-0.000018

يوضح الجدول (1- VI) القيم المقترحة لنصف قطر التجويف S وكذلك قيم الطاقة المتاحة المحسوبة بالنسبة لأبعاد الفضاء  $N=3$  و  $N=4$ ، حيث تظهر النتائج أن لـ N معين كلما قل نصف قطر التجويف تزداد قيم الطاقة فتصبح أقل سلبية، وهذا هو الحال لأنه مع انخفاض حجم الكرة سوف تحدث المزيد من الاصطدامات بين الإلكترون و سطح التجويف وبالتالي زيادة في الطاقة الحركية للإلكترون مما يجعل الجسيمات أكثر تقيداً، و الشكل (1- VI) (2- VI) يوضح تغيرات قيم الطاقة بدلالة نصف قطر التجويف S لـ  $N=3$  و  $N=4$  على التوالي.

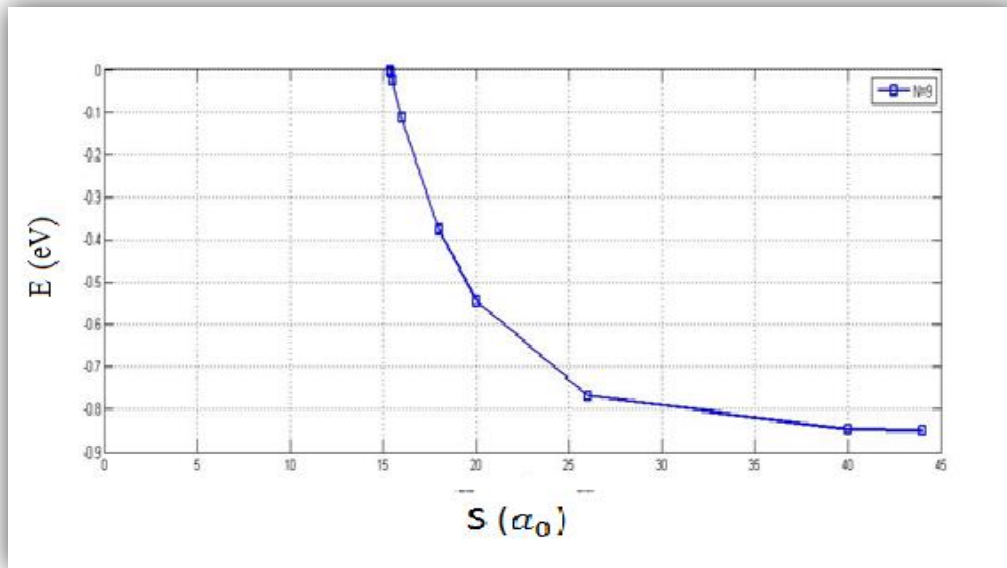
الجدول (VI-2): الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة، لقيم مختلفة من S عند N=9

و N=10 في حالة l=0.

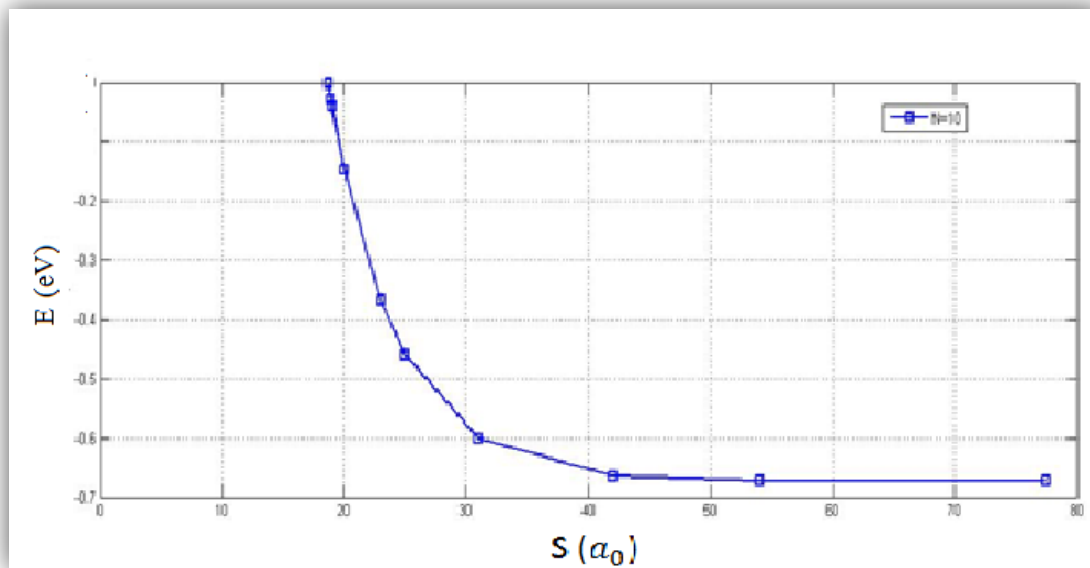
N=9			N=10		
S ( $a_0$ ) m	Xn	E (eV)	S ( $a_0$ ) m	Xn	E (eV)
44	21.9899	-0.8492	77.500	34.4444	-6.0671
	16.7582	-0.4932		28.1635	-0.4490
	6.3975	-0.0719		23.0530	-0.3008
				14.9986	-0.1273
40	19.9702	-0.8475	54.000	23.9921	-0.6712
	14.5649	-0.4508		18.9736	-0.4197
				10.5827	-0.1306
26	12.3471	-0.7668	42.000	18.5552	-0.6636
				12.6671	-0.3093
20	8.0000	-0.5440	31.000	13.0215	-0.5999
18	6.0000	-0.3778	25.000	9.1887	-0.4593
16	2.9333	0.1143	23.000	7.5634	-0.3677
15.5000	1.3569	-0.0261	20.000	4.1538	-0.1467
15.4000	0.7019	-0.0071	19.000	2.0374	-0.0391
15.3800	0.4723	-0.0032	18.900	1.6870	-0.0271
15.3750	0.3945	-0.0022	18.700	0.4894	-0.0023
15.3740	0.3771	-0.0020	18.685	0.2101	-0.0004

15.3700	0.2971	-0.0013	18.684	0.1764	-0.0003
15.3690	0.2735	0.0011	18.682	0.0713	-0.00004
15.3650	0.1445	-0.0003			
15.3640	0.0861	-0.0001			
15.3635	0.0260	-0.000009			

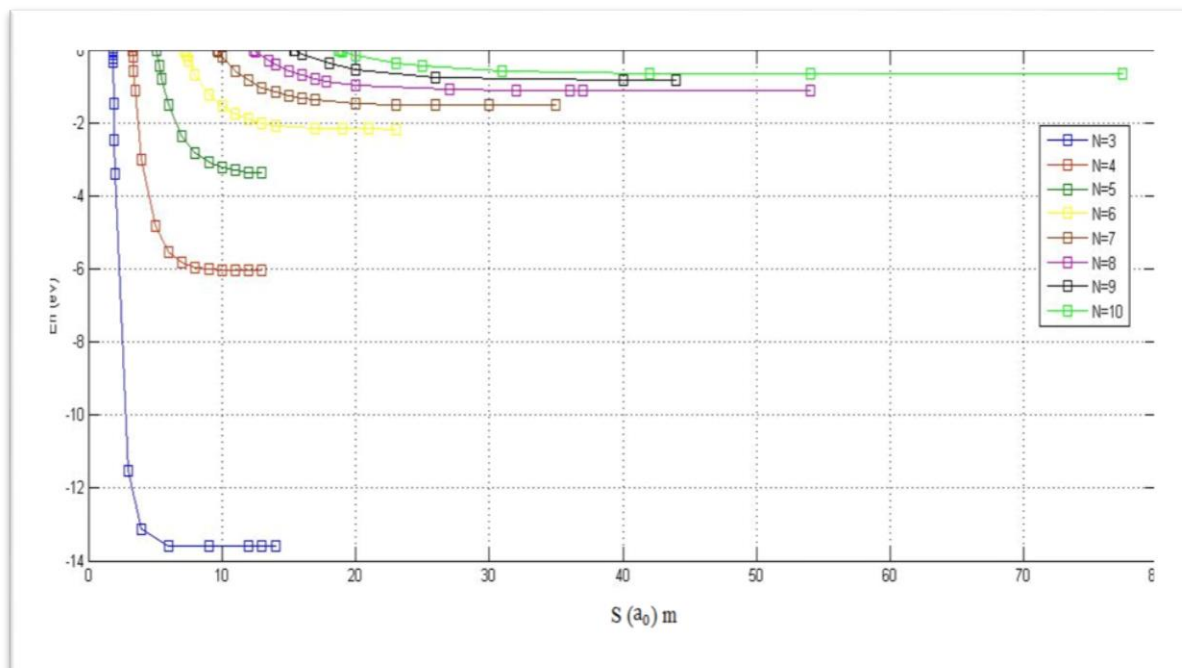
يوضح الجدول (2- VI) القيم المقترحة لنصف قطر التجويف  $S$  وكذلك قيم الطاقة المتاحة المحسوبة بالنسبة لأبعاد الفضاء  $N=9$  و  $N=10$ ، حيث تظهر لنا نفس النتائج السابقة، حيث أن  $N$  معين كلما قل نصف قطر التجويف تزداد قيم الطاقة فتصبح أقل سلبية، وهذا هو الحال لأنه مع انخفاض حجم الكرة سوف تحدث المزيد من الاصطدامات بين الإلكترون و سطح التجويف وبالتالي زيادة في الطاقة الحركية للإلكترون مما يجعل الجسيمات أكثر تقيداً، والشكلين (3- VI) و (4- VI) يوضحان تغيرات قيم الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف  $S$  لـ  $N=9$  و  $N=10$  على الترتيب (نشير إلى أن بقية النتائج لـ  $8, 7, 6, 5$  موضحة في الملحق B).



الشكل (3- VI): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف لـ  $N=9$ .



الشكل (VI-4): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف  $S-N=10$ .



الشكل (VI-5): منحنى تغيرات قيم الطاقة المتاحة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف  $S-N=3-10$ .

يبين الشكل (VI-5) مجمل تغيرات قيم الطاقات للحالة الأساسية ( $l=0, n=1$ ) لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف  $S$  لـ ( $N=3,4,5,6,7,8,9, 10$ ) حيث أن هناك علاقة عكسية بين نصف قطر التجويف وقيم الطاقة المتاحة لها، كما نلاحظ أيضا أن كلما زاد البعد الفضائي  $N$  تزداد قيم الطاقة بشكل أكثر وهذا بالاعتماد على قيمة الجهد الفعال الذي يعطى بالعلاقة [37]:

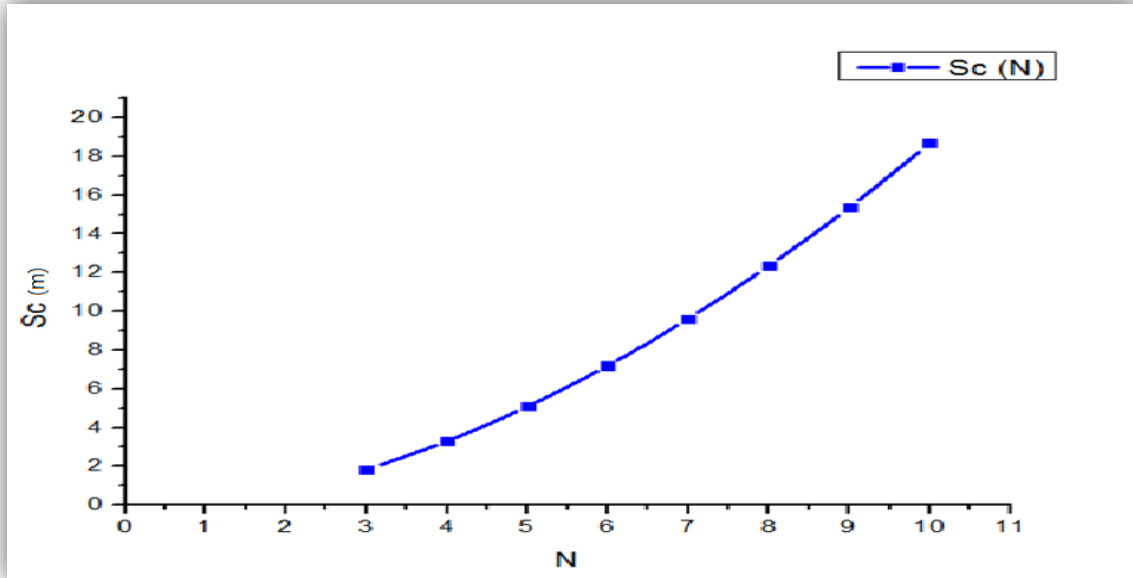
$$V_{eff}(r) = V(r) + \left[ l(l + N - 2) + \frac{(N-1)(N-3)}{4} \right] \frac{1}{r^2} \quad (4-VI)$$

التي منها نستطيع أن نستنتج أن قيمته تزداد بزيادة  $N$  وقيمة الطاقة الحركية للإلكترون تصبح أقل سلبية وتؤول إلى الصفر.

الجدول (VI-3): قيم نصف قطر التجويف الحرج  $S_c$  لقيم مختلفة من  $N$  مع  $l = 0$ .

N	$S_c (a_0) m$
3	1.835247
4	3.296850
5	5.088327
6	7.200250
7	9.617367
8	12.35000
9	15.36350
10	18.68200

يوضح الجدول (VI-3) قيم نصف قطر التجويف الحرج  $S_c$  لقيم مختلفة من البعد الفضائي  $N$  حيث تظهر النتائج المتحصل عليها أنه عندما يتغير البعد الفضائي من ( $N=3 - 10$ ) يوافقها تغير في  $S_c$  من القيمة 1.835247 إلى 18.68200 ، أي أن نصف قطر التجويف الحرج  $S_c$  يزداد بزيادة البعد الفضائي  $N$  وهذا راجع لكون الجسيمات تم صدها بعيدا عن النواة. والشكل (VI-6) يوضح هذا التناسب الطردي بين بعد الفضاء  $N$  و نصف قطر التجويف الحرج  $S_c$ .



الشكل (VI-6): منحنى تغيرات نصف قطر التجويف الحرج  $S_c$  بدلالة البعد الفضائي  $N$ .

## 2.2.VI مقارنة الحالات المقيدة والحررة

في هذا الجانب سوف ندرس تأثير الحصر وأبعاد الفضاء على عدد من حالات ذرة الهيدروجين المحصورة ، حيث يتم تحديد الحالات الطاقية المتاحة لها من قبل عدد من الجذور  $X_n$  الدالة التوافقية الهندسية المتموجة  $F_1$  التي نبحث عنها باستخدام برنامج "MATLAB 9"، بمجرد انعدام الدالة نحسب الطاقات المتاحة لها أدنى طاقة هي طاقة الحالة الأساسية عند  $(n=1)$ ، والتالية الحالات المثيجة عند  $(n=2,3\dots)$  ويتم إجراء هذه الحسابات للأبعاد  $(N=3 - 10)$ .

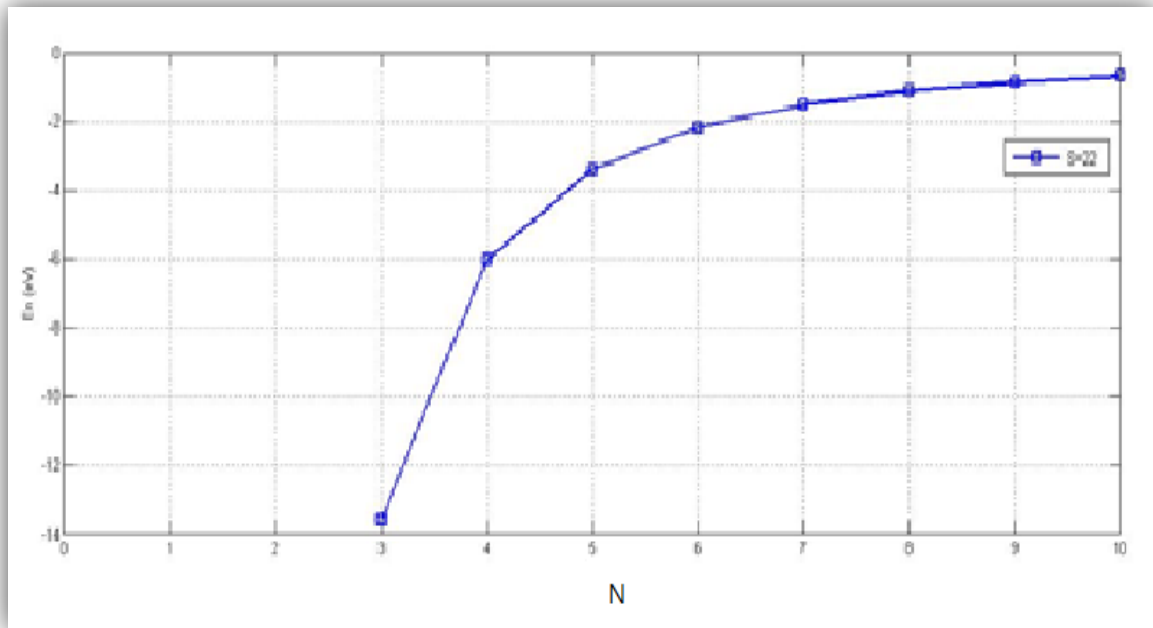
فمن الجدير بالذكر مقارنة قيم هذه الطاقة مع الأبعاد المختلفة لذرة الهيدروجين، وترد نتائجنا في الجدول رقم (4-VI) و (5- VI) عند القيمة  $S = 22a_0$  و  $S=44a_0$  على التوالي.

الجدول (4- VI):الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة والحررة في أبعاد مختلفة، في حالة  $l = 0$  و  $S = 22a_0$ .

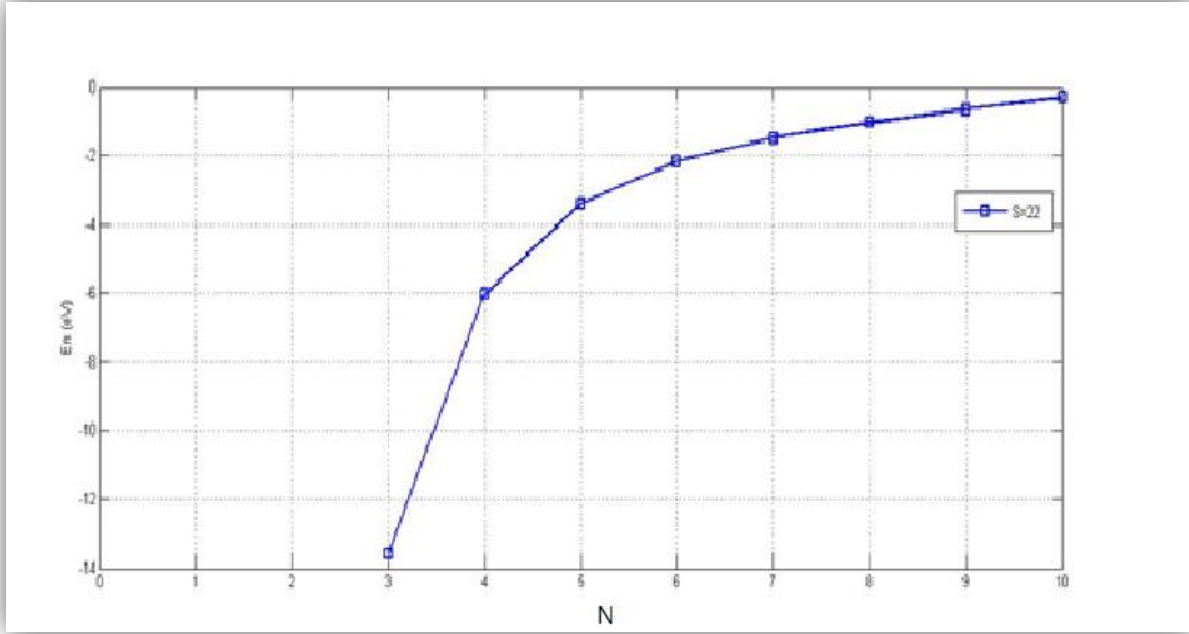
N	N	$E_{n \text{ conf}} \text{ (eV)}$	$E_{n \text{ free}} \text{ (eV)}$
3	1	-13.6000	-13.6000
3	2	-3.3999	-3.4000
3	3	-1.4337	-1.5111
4	1	-6.0444	-6.0444
4	2	-2.1709	-2.1760
4	3	-0.7987	-1.1102

5	1	-3.4000	-3.4000
5	2	-1.4578	-1.5111
5	3	-0.1267	-0.8500
6	1	-2.1741	-2.1760
6	2	-0.9051	-1.1102
7	1	-1.4905	-1.5111
7	2	-0.3815	-0.8500
8	1	-1.0274	-1.1102
9	1	-0.6511	-0.8500
10	1	-0.3075	-0.6716

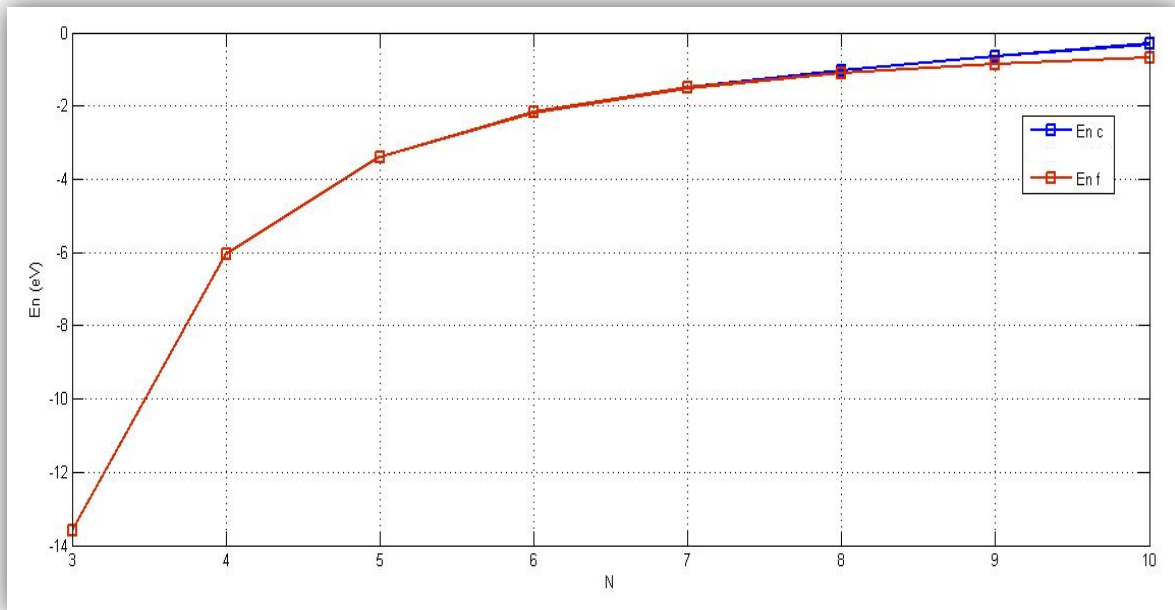
النتائج في الجدول (VI - 4) تظهر ميزات مثيرة للاهتمام، بالنسبة لعدد معين من  $S$  تتناقص قيم الطاقات المتاحة مع زيادة  $N$ ، وذلك راجع الى المدى الإضافي في القدرة الفعلية للأبعاد العليا.



الشكل (VI - 7): منحنى تغيرات قيم الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة البعد الفضائي  $N$  عند نصف قطر التجويف  $S=22a_0$ .



الشكل (VI - 8): منحنى تغيرات قيم الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين الحرة بدلالة البعد الفضائي  $N$  عند نصف قطر التجويف  $S=22a_0$ .



الشكل (VI - 9): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة و الحرة بدلالة البعد الفضائي  $N$  عند نصف قطر التجويف  $S=22a_0$ .

من خلال الشكل (VI- 9) نلاحظ أن قيم الطاقة لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة في حالة  $S=22a_0$  تكون متطابقة عند أبعاد الفضاء ( $N=3,4,5,6,7$ ) أي أن نسبة الاختلاف في قيم الطاقة شبه معدومة التي تحسب بالعلاقة التالية [37]:

$$Pd = \frac{E_{free} + E_{conf}}{E_{free}} \times 100\% \quad (5-VI)$$

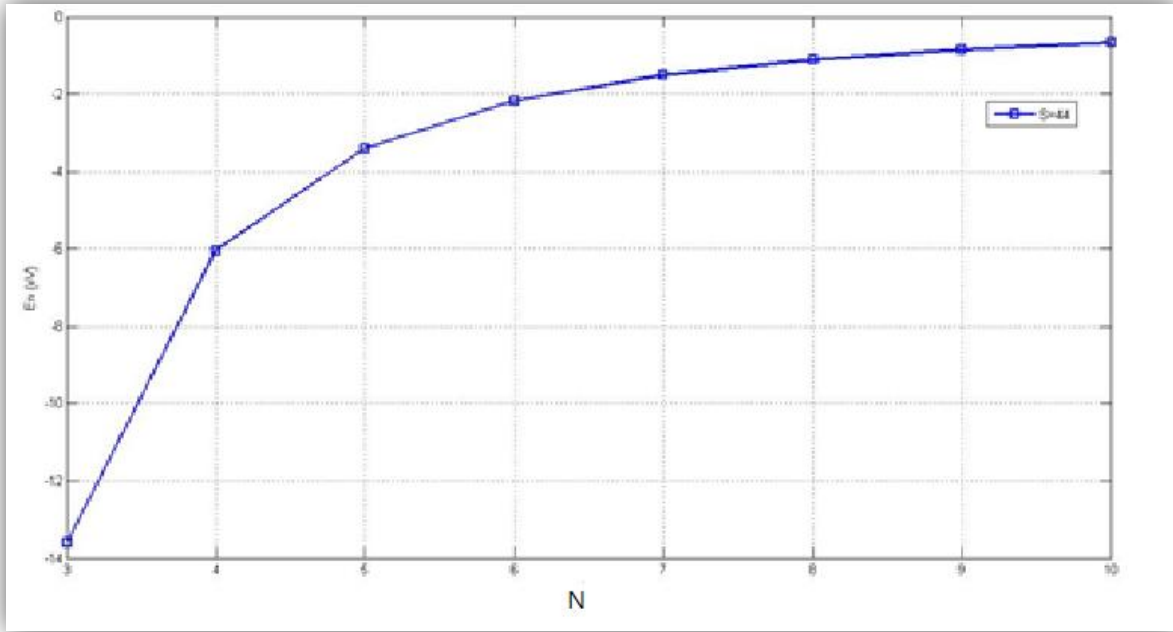
$Pd$ : النسبة المئوية للفارق الطاقى.

أما عند أبعاد الفضاء ( $N=8,9,10$ ) تكون نسب الاختلاف في قيم الطاقة معتبرة وتزايد بالنسب التالية: ( $Pd = 7.46\%, 23.4\%, 54.12\%$ ) على التوالي.

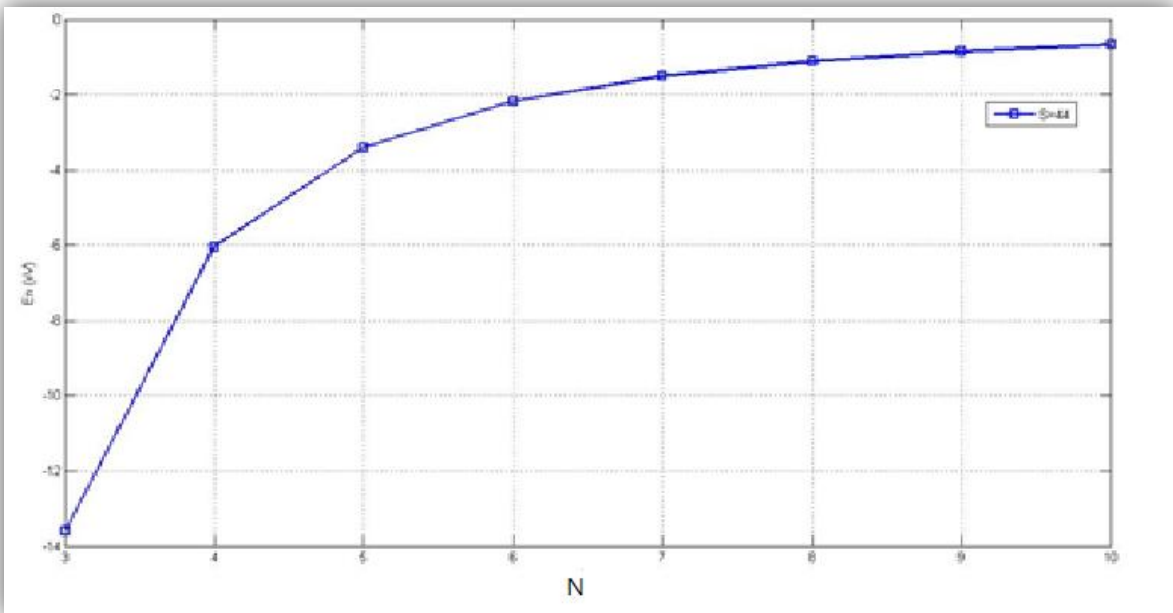
**الجدول (5- VI):** قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة، لقيم مختلفة من  $N$ ، في حالة و  $S = 44a_0$

و  $l = 0$ .

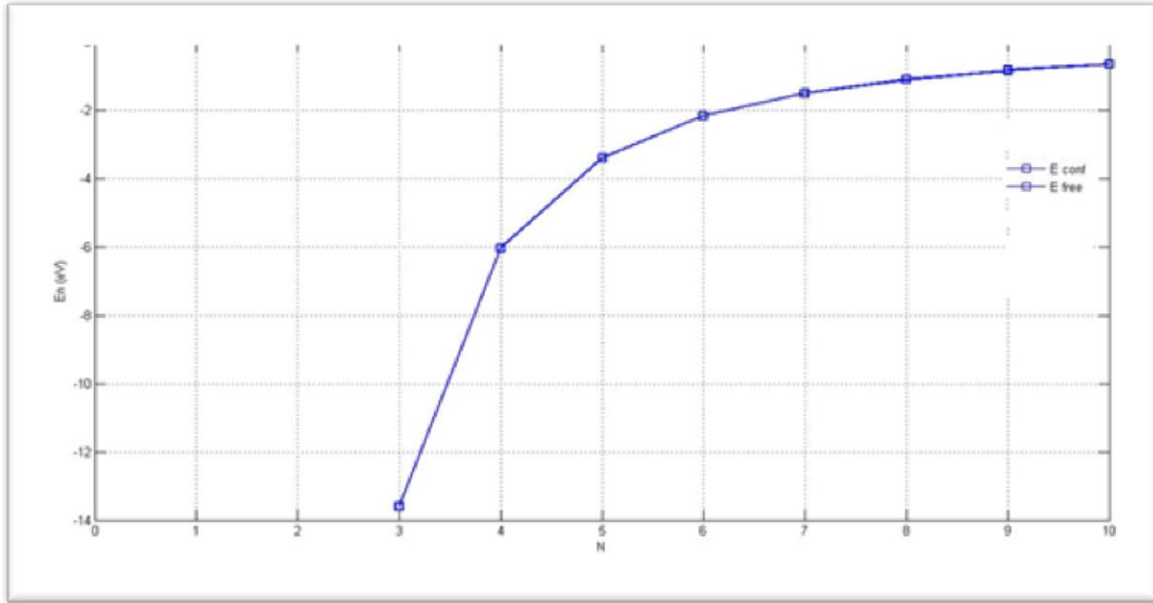
N	$E_{free}(eV)$	$E_{conf}(eV)$
3	-13.6000	-13.6000
4	-6.0444	-6.0444
5	-3.4000	-3.4000
6	-2.1760	-2.1760
7	-1.5111	-1.5111
8	-1.1102	-1.1102
9	-0.8500	-0.8492
10	-0.6716	-0.6665



الشكل (VI - 10): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة البعد الفضائي  $N$  عند نصف قطر التجويف  $S=44a_0$ .



الشكل (VI - 11): منحنى تغيرات قيم الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين الحرة بدلالة البعد الفضائي  $N$  عند نصف قطر التجويف  $S=44a_0$ .



الشكل (VI- 12): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة و الحرة بدلالة البعد الفضائي N عند نصف قطر التجويف  $S=44a_0$ .

من خلال الشكل (VI- 12) نلاحظ أن المنحنيين منطبقين تماما أي ان النسب المئوية للفرق في قيم الطاقة لذرة الهيدروجين سواء كانت حرة أم مقيدة تكون معدومة عندما يكون نصف قطر التجويف كبير جدا وفي حالتنا هذه مساوي الى  $S=44a_0$  وبالتالي نستنتج أن الذرة المحصورة في تجويف كبير تسلك سلوك الذرة الحرة.

## خاتمة

أخيرا لقد توصلنا في هذا الفصل إلى نتائج قيمة حول ما ينتج عن ذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة من طاقات متاحة لها في هذا الفضاء ووجدنا نتائج هذه الذرة عندما تكون محصورة في تجويف كبير تؤول لنتائج وكأنها حرة.

خاتمة عامة

### خاتمة عامة

تمت وبحمد الله هذه المذكرة التي هي بعنوان دراسة ذرة الهيدروجين في فضاء متعدد الأبعاد, حيث عرفنا ما ينتج عن ذرة الهيدروجين في هذا الفضاء سواء كانت حرة أم مقيدة في تجويف كروي.

مهدنا لموضوعنا بتقديم لمحة تاريخية حول تطور مفهوم ذرة الهيدروجين إبتداء من عصر العالم نيلز بور والتطورات الجديدة التي واكبت هذا العصر, وصولاً إلى نموذج حديث يسمى بالنموذج الكمي الذي يدرس احتمال وجود الجسيم في موضع ما, وقد اعتمدنا في دراستنا هذه على هذا النموذج في حلنا لمعادلة شرودينجر في الفضاء المعتاد وفضاء متعدد الأبعاد, ولقد قمنا بإعطاء مفهوم موجز لنظرية الأوتار التي أوضحت لنا معنى فضاء متعدد الأبعاد.

إن حلنا لمعادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين حالة كونها حرة في الفضاء المعتاد أعطى لنا عبارة الطاقة للإلكترون التي تتغير وفق مقلوب مربع العدد الكمي الرئيسي  $n^2$ .

وقمنا كذلك بإيجاد صيغة لمعادلة شرودينجر في  $N$  بعد وهي تأخذ نفس الشكل سواء كانت ذرة الهيدروجين حرة أو مقيدة, ولذلك كان لها نفس صيغة الحل عند حدود التجويف في حين وجدنا عبارتين مختلفتين للطاقة, حيث أن أحدهما تعتمد على عدد الكم الرئيسي  $n$  و البعد الفضائي  $N$  ومن خلالها نجد قيم الطاقة في حالة ذرة الهيدروجين الحرة, وأخرى تعتمد على البعد الفضائي  $N$  و نصف قطر التجويف المقيدة بداخله الذرة, صيغة الحل عبارة عن دالة هندسية تدعى  $\text{Confluent Hyper geometric function}$ .

من أجل تحديد قيم النقاط  $X_n$  التي تعد صيغة دالة الحل يجب تحقيق الشروط الحدودية  $(r = S)$ , لقد قمنا باستخدام برنامج عددي بلغة "MATLAB9" لإيجاد الجذور  $X_n$  للدالة  ${}_1F_1$ , وذلك بإعطاء كل من البعد  $N$  ونصف قطر الفجوة  $S$  وقيمة العزم الزاوي المداري  $l$ , ومن ثم نجد قيم الطاقة لذرة الهيدروجين.

لقد بينت لنا النتائج أن قيم الطاقة لذرة الهيدروجين المحصورة في تجويف كروي في  $N$  بعد تزداد بنقصان نصف قطر التجويف  $S$ , وتؤول إلى الصفر بزيادة البعد الفضائي  $N$ , وهذا بالاعتماد على قيمة الجهد الفعال الذي يزداد بزيادة  $N$ , وتصبح الطاقة الكلية للإلكترون أقل سلبية, أما عن قيم الطاقة في حالة كونها حرة فهي تزداد بزيادة البعد الفضائي  $N$  وعدد الكم الرئيسي  $n$ .

إن هذه النتائج التي توصلنا إليها تفتح مسارات أخرى في هذا المجال قصد معرفة سلوك الذرات الأخرى التي عددها الذري يفوق الواحد.

# قائمة المراجع



الملاحق

الملحق A

في هذا الملحق سوف نتطرق للحسابات التالية:

• حساب مؤثر لابلاس في بعد واحد  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

مع العلم أن:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (1-A)$$

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \cos^{-1}(z / \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}) \\ \varphi = \tan^{-1}(y/x) \end{cases} \quad (2-A)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3-A)$$

لحساب  $\frac{\partial}{\partial x}$  نستعمل العبارة (3-A) وذلك بالاعتماد على الجملتين (1-A) و (2-A) نجد:

$$\begin{cases} \frac{\partial r}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-\sin \varphi}{r \sin \theta} \end{cases} \quad (4-A)$$

نعوض جملة المشتقات (4-A) في العبارة (3-A) نجد:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (5-A)$$

نشتق العبارة (5-A) نجد:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (6-A)$$

• حساب  $E_0$

نستطيع حساب  $E_0 = \frac{-\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$  من خلال المعطيات التالية:

$$e = 1.60217635 \cdot 10^{-19} \text{c}$$

$$\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{Fm}^{-1}$$

$$\hbar = 1.05457148 \cdot 10^{-34} \text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$$

$$m_e = 9.10093826 \cdot 10^{-31} \text{kg}$$

$$m_p = 1.67262171 \cdot 10^{-27} \text{kg}$$

$$\mu = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} = 9.095989022 \cdot 10^{-31} \text{kg}$$

$$\pi = 3.14159256$$

$$E_0 = \frac{-\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = -13,598292 \approx -13,6 \quad (7-A)$$

• إيجاد مؤثر لابلاس  $\nabla^2$  بدلالة الاحداثيات الكروية في ثلاث أبعاد

كل ما علينا فعله هو إيجاد المشتقات الثانية بالنسبة لـ  $(x, y, z)$  بدلالة  $(r, \theta, \varphi)$  وذلك بعد حساب المشتقات

الأولى  $\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$  والثانية  $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$  كما يلي :

نستعمل الجملتين (1-A) و (2-A) لحساب الجملة التالية:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{array} \right. \quad (8-A)$$

بعد الحساب نحصل على الجمل التالية:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial r}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \\ \frac{\partial r}{\partial z} = \cos \theta \end{array} \right. \quad (9-A)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \theta \\ \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{1}{r} \sin \theta \end{array} \right. \quad (10-A)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-\sin \varphi}{r \sin \theta} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \end{array} \right. \quad (11-A)$$

ومنه

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{-\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{array} \right. \quad (12-A)$$

بعد الاشتقاق للجملته أعلاه والجمع نحصل على مؤثر لابلاس في الإحداثيات الكروية التالي:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{1}{r^2 \sin \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (13-A)$$

• الانتقال من العلاقة (61-II) إلى (62-II)

$$\frac{d^2}{dr^2} \left( f(r) e^{-\beta r} \right) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left( f(r) e^{-\beta r} \right) + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{\mu e^2}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) f(r) e^{-\beta r} = 0 \quad (14-A)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left[ \frac{d}{dr} f(r) e^{-\beta r} \right] \frac{d^2}{dr^2} \left( f(r) e^{-\beta r} \right) &= \frac{d}{dr} \left[ e^{-\beta r} \frac{df(r)}{dr} - e^{-\beta r} \cdot f(r) \right] \\ &= -\beta e^{-\beta r} \frac{df(r)}{dr} + e^{-\beta r} \frac{d^2 f(r)}{dr^2} + \beta^2 f(r) - \beta e^{-\beta r} \frac{df(r)}{dr} \end{aligned}$$

$$= -2 \beta e^{-\beta r} \frac{df(r)}{dr} + e^{-\beta r} \frac{d^2f(r)}{dr^2} + \beta^2 e^{-\beta r} f(r) \quad (15-A)$$

نعوض (15-A) في المعادلة (14-A) نجد:

$$\left[ -2 \beta e^{-\beta r} \frac{df(r)}{dr} + e^{-\beta r} \frac{d^2f(r)}{dr^2} + \beta^2 e^{-\beta r} f(r) \right] + \frac{2}{r} \left[ e^{-\beta r} \frac{df(r)}{dr} - e^{-\beta r} f(r) \right] + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{\mu e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) e^{-\beta r} f(r) = 0 \quad (16-A)$$

بالجمع والترتيب والقسمة على  $e^{-\beta r}$  وتعويض  $\beta = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$  نجد:  $\beta^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$

$$\frac{d^2f(r)}{dr^2} + \left( \frac{2}{r} - 2\beta \right) \frac{df(r)}{dr} - \left( \frac{2\beta}{r} + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) f(r) = 0 \quad (17-A)$$

نعلم أن  $f(r)$  كثير حدود لـ  $r$  ومنه نكتب:

$$f(r) = r^k \quad (18-A)$$

$$\frac{d^2f(r)}{dr^2} = \frac{d}{dr} \left( \frac{d}{dr} r^k \right) = \frac{d}{dr} (k r^{k-1}) = k(k-1)r^{k-2} \quad (19-A)$$

نعوض (19-A) في المعادلة (17-A) نجد:

$$k(k-1)r^{k-2} + \left( \frac{2}{r} - 2\beta \right) k r^{k-1} - \left( \frac{2\beta}{r} + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) r^k = 0 \quad (20-A)$$

نوزع المعادلة (20-A) نحصل على:

$$k(k-1)r^{k-2} + \frac{2}{r} k r^{k-1} - 2\beta k r^{k-1} - \frac{2\beta}{r} r^k - \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E r} r^k - \frac{l(l+1)}{r^2} r^k = 0 \quad (21-A)$$

نعوض  $\frac{1}{r} = r^{-1}$  نجد:

$$k(k-1)r^{k-2} + 2k r^{k-2} - 2\beta k r^{k-1} - 2\beta r^{k-1} - \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E} r^{k-1} - l(l+1)r^{k-2} = 0 \quad (22-A)$$

بعدها نرتب نجد:

$$[k(k-1) + 2k - l(l+1)]r^{k-2} - \left( 2\beta k + 2\beta + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right) r^{k-1} = 0 \quad (23-A)$$

$$[k(k + 1) - l(l + 1)]r^{k-2} - \left(2\beta k + 2\beta + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E}\right)r^{k-1} = 0 \quad (24-A)$$

$$[k(k + 1) - l(l + 1)]r^{k-2} - \left(2\beta k + 2\beta + \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E}\right)r^{k-1} = 0 \quad (25-A)$$

الملحق B

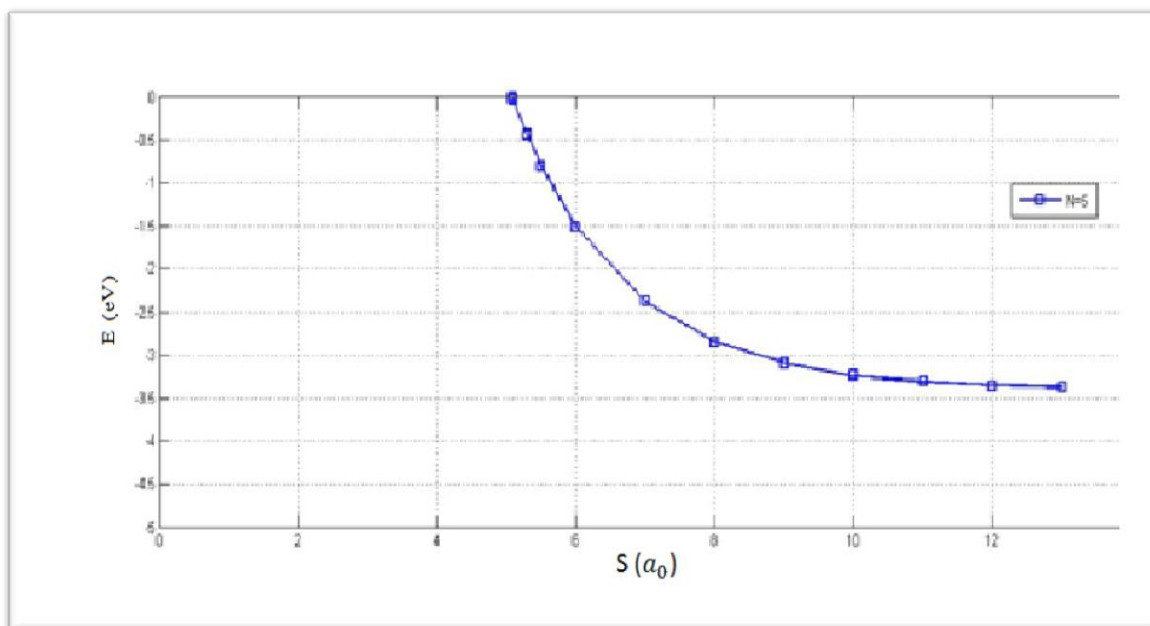
في هذا الملحق سوف نعرض بقية الجداول والمنحنيات الناتجة من البرنامج العددي بلغة "MATLAB9".

- الجداول والمنحنيات الموافقة للطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة، لقيم مختلفة من  $S$  في حالة  $l = 0$  و  $N=5, 6, 7, 8$ .

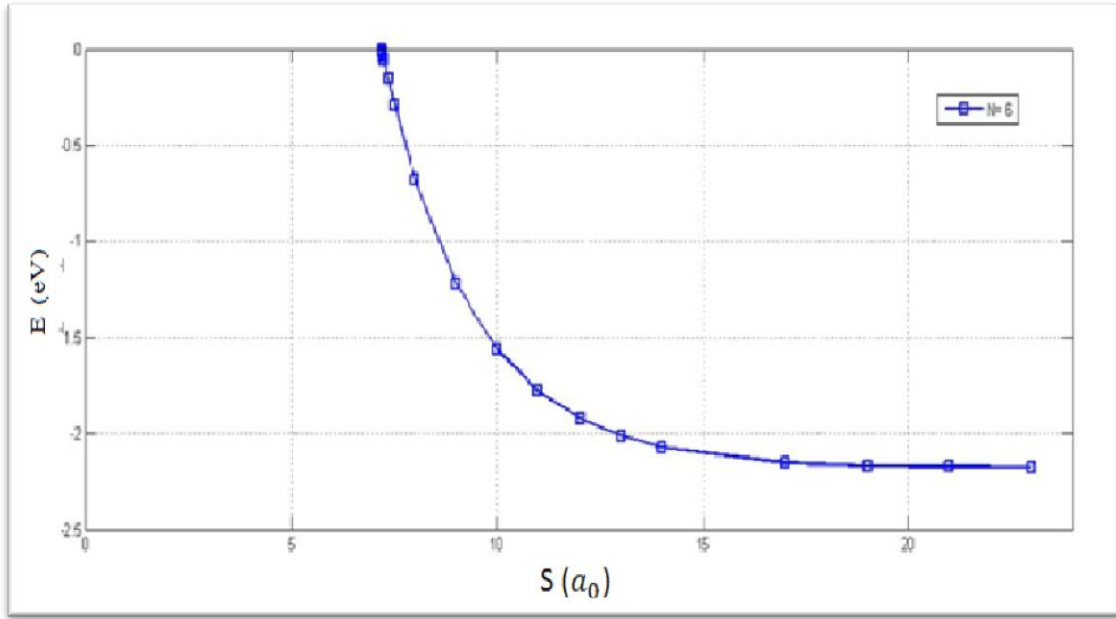
**الجدول (B-1):** الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة، لقيم مختلفة من  $S$  و  $N=5,6$ ، عندما  $l = 0$ .

N=5			N=6		
S ( $a_0$ ) m	Xn	E(eV)	S ( $a_0$ ) m	Xn	E(eV)
13	12.9529	-3.375400	23	18.3953	-2.1749
	04.7279	-0.449700		12.1706	-0.9520
12	11.9159	-3.352500	21	16.7872	2.1727
	01.3621	-0.043800		10.4691	0.8450
11	10.8538	-3.310200	19	15.1667	-2.1665
				8.4366	-0.6704
10	9.7513	-3.233000	17	13.5189	-2.1501
				5.7180	-0.3847
9	8.5846	-3.093400	14	10.925	-2.0706
8	7.3129	-2.841000	13	9.9981	-2.0111
7	5.8559	-2.379400	12	9.0171	-1.9198
6	4.0000	-1.511100	11	7.9579	-1.7795
5.500000	2.6741	-0.803800	10	6.7791	-1.5625
			9	5.3971	-1.2227
5.300000	1.9137	-0.443300	8	3.5762	-0.6794
5.100000	0.4489	-0.026300	7.50000	2.1876	-0.2893

5.090000	0.1707	-0.003800	7.35000	1.5509	-0.1514
5.088500	0.0575	-0.000400	7.25000	0.9073	-0.0532
5.088350	0.0268	-0.000100	7.23500	0.7656	-0.0381
5.088340	0.0234	-0.000100	7.22500	0.6544	-0.0279
5.088330	0.0194	-0.000049	7.21500	0.5200	-0.0177
5.088329	0.0189	-0.000046	7.20500	0.3355	-0.0074
5.088328	0.0185	-0.000044	7.20250	0.2704	-0.0048
5.088327	0.0180	-0.000042	7.20125	0.2310	-0.0035
			7.20050	0.2038	-0.0027
			7.20025	0.1939	-0.0025



الشكل (1-B): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف S لـ N=5.

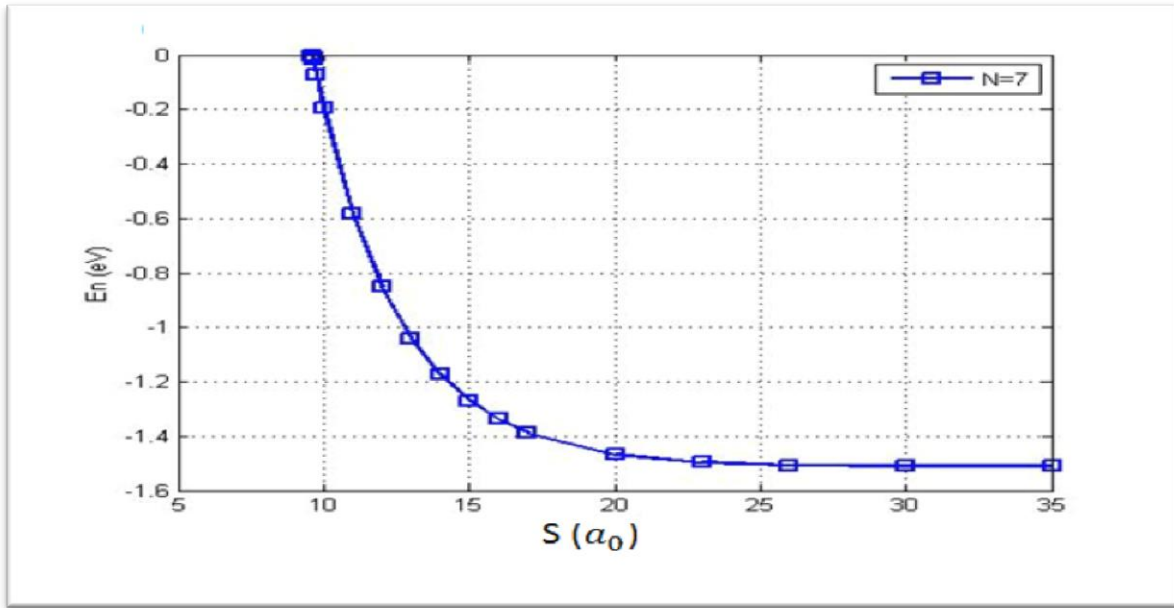


الشكل (2-B): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف S لـ N=6.

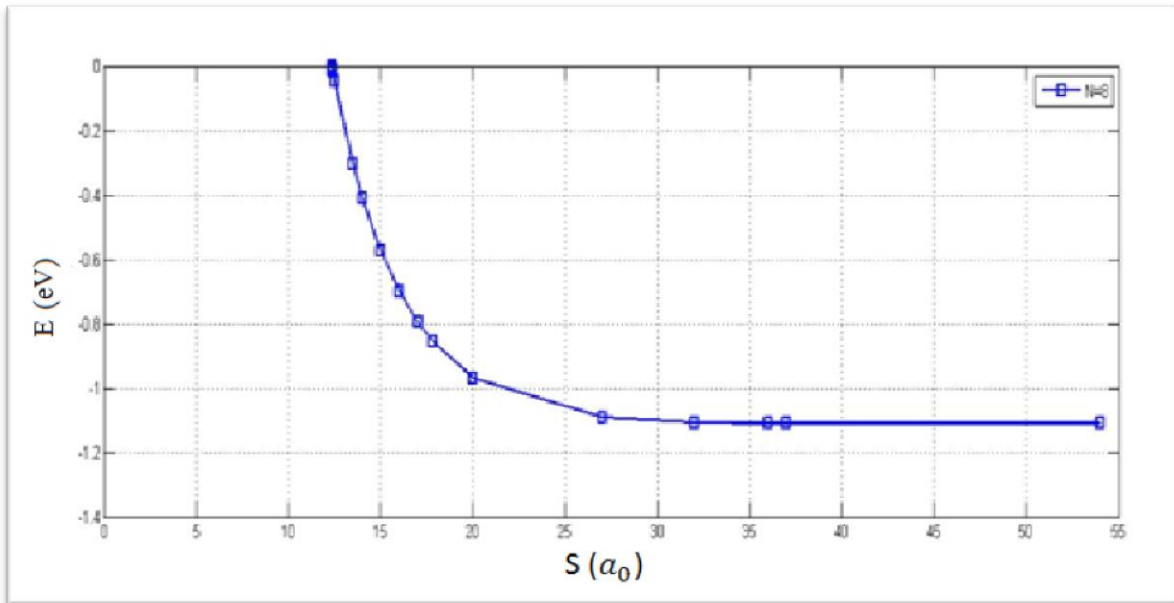
الجدول (2- B): الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين المقيدة، لقيم مختلفة من S و N=7,8، عندما  $l = 0$ .

N=7			N=8		
S (a <sub>0</sub> ) m	X <sub>n</sub>	E(eV)	S (a <sub>0</sub> ) m	X <sub>n</sub>	E (eV)
35	23.3328	-1.5110000	54	30.8571	-1.1102
	17.2030	-0.8214000		23.9704	-0.6699
	9.1456	-0.2321000		18.4127	-0.3953
6.9839				-0.0569	
30	19.9951	-1.5104000	37	21.1362	-1.1095
	14.1907	-0.7608000		15.6567	-0.608
				4.0725	-0.0412
26	17.3091	-1.5069000	36	20.5621	-1.1092
	11.2970	-0.6419000		15.0758	-0.5963

23	15.2617	-1.4970000	32	18.2523	-1.1062
	8.5218	-0.4667000		12.5060	-0.5193
20	13.1414	-1.4679000	27	15.2904	-1.0904
	4.2086	-0.1506000		8.2734	-0.3192
17	10.8603	-1.3876000	20	10.6718	-0.9680
16	10.0362	-1.3378000	17.800	8.9275	-0.8553
15	9.1628	-1.2687000	17.000	8.2217	-0.7953
14	8.2220	-1.1727000	16.000	7.2588	-0.6998
13	7.1852	-1.0387000	15.000	6.1656	-0.5744
12	6.0000	-0.8500000	14.000	4.8534	-0.4086
11	4.5488	-0.5814000	13.500	4.0499	-0.3060
10	2.3821	-0.1929000	12.500	1.4960	-0.0487
9.75	1.4009	-0.0702000	12.400	0.9121	-0.0184
9.6500000	0.6946	-0.0176000	12.385	0.7881	-0.0138
9.6350000	0.5105	-0.0095000	12.380	0.7422	-0.0122
9.6250000	0.3359	-0.0041000	12.370	0.6406	-0.0091
9.6200000	0.1973	-0.0014000	12.355	0.4468	-0.0044
9.6175000	0.0445	-0.0001000	12.351	0.3788	-0.0032
9.6174000	0.0224	-0.0000184	12.350	0.3598	-0.0029
9.6173750	0.0115	-0.0000048			
9.6173700	0.0076	-0.0000021			
9.6173680	0.0054	-0.0000010			
9.6173670	0.0038	-0.0000005			



الشكل (3-B): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف  $S$  لـ  $N=7$ .

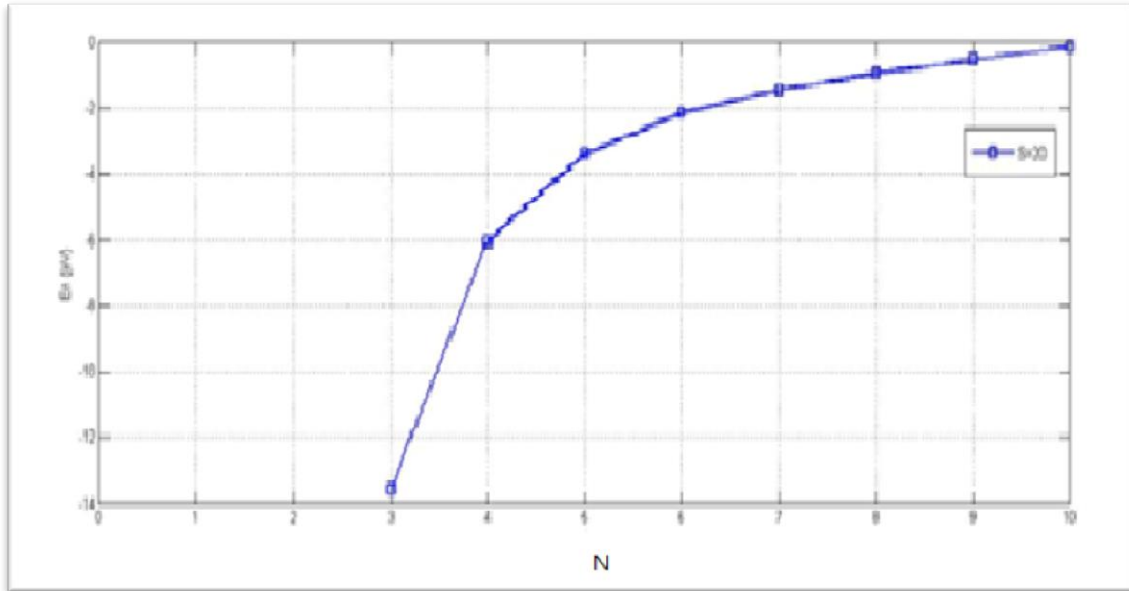


الشكل (4-B): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة نصف قطر التجويف  $S$  لـ  $N=8$ .

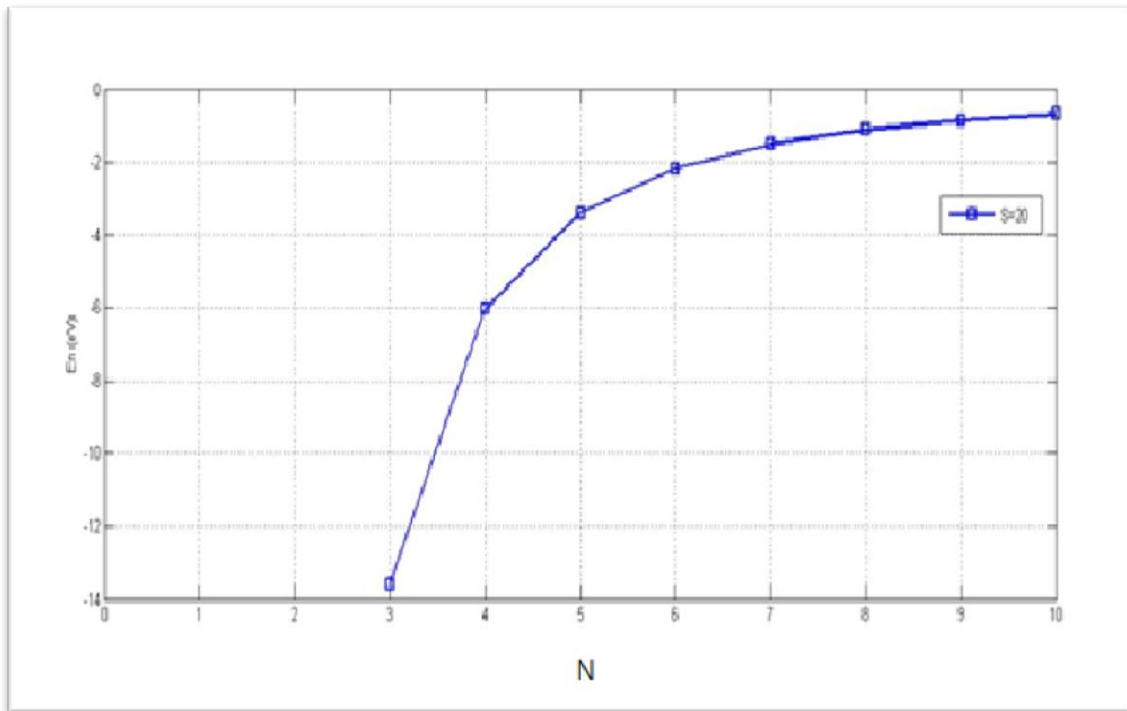
■ جدول ومنحنيات تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة بدلالة البعد الفضائي  $N$  لـ  $S=20 a_0$ .

الجدول (3-B): الطاقات المتاحة لذرة الهيدروجين الحرة والمقيدة، لقيم مختلفة من  $N$ ، عند  $S = 20a_0$  و  $l = 0$ .

N	Xn	$E_C$ (eV)	$E_f$ (eV)
3	40.0000	-13.6000	-13.600
	19.9990	-3.3996	-3.4000
	12.6387	-1.3578	-1.5111
4	26.6667	-6.0444	-6.0444
	15.9471	-2.1616	-2.1760
	08.3780	-0.5966	-1.1102
5	19.9996	-3.3999	-3.4000
	12.8513	-1.4038	-1.5111
6	15.9792	-2.1703	-2.1760
	09.5073	-0.7683	-1.1102
7	13.1414	-1.4679	-1.5111
	04.2086	-0.1506	-0.8500
8	10.6718	-1.1102	-0.9680
9	08.0000	-0.5440	-0.8500
10	04.1538	-0.1467	-0.6716



الشكل (5-B): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين المقيدة بدلالة البعد الفضائي  $N$  عند نصف قطر التجويف  $S=20a_0$ .



الشكل (6-B): منحنى تغيرات قيم الطاقة للحالة الأساسية لذرة الهيدروجين الحرة بدلالة البعد الفضائي  $N$  عند نصف قطر التجويف  $S=20 a_0$ .

- بطاقة المعلومات الخاصة بالبرنامج العددي "MATLAB9".

-----  
Bound energies of Confined hydrogen atom in N-dimensional spherical cavity.  
-----

By Zoubir Becer

University of Northampton UK/ El-oued University Algeria

2017/04/24  
-----

[En]=H\_Atom\_N dim(N,S,l,ro0,Tol,method)

Inputs:

N : number of dimensions.

S : Radius of the cavity given in unites of a0 Bohr radius.

l : angular momentum quantum number.

ro0: starting search point.

Tol: Specified tolerance.

method: 'NR', 'BS' or 'fzero.'

NR: Newton-Raphsen.

BS: Bisection.

fzero: fzeroMatlab root finding function.

Outputs:

En(:,1): confined bound energies.

En(:,2): free energies.

En(:,3)=Xn: roots of  $1F1(N,\lambda,ro)=0$  for the confined case

## ملخص

يهدف هذا البحث إلى حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين الحرة و المقيدة داخل تجويف كروي غير قابل للاختراق في فضاء متعدد الأبعاد  $N \geq 3$  , حيث تم إيجاد الحلول الموجية التي تمثل هذه الذرة, كما تم إيجاد صيغة لحساب قيم الطاقة التي يمكن لها أن تمتلكها. ومن اللافت للنظر في حل هذه المسألة أن معادلة شرودينجر تحت هذه الظروف لها نفس صيغة معادلة شرودينجر في حالة ذرة الهيدروجين الحرة في فضاء متعدد الأبعاد, والتي تنطبق عندها شروط تحقيق الحل. ولقد تم استنتاج أن قيم الطاقة لذرة الهيدروجين تحت هذه الظروف تعتمد على الأبعاد التي تمثل الفضاء الذي يحتوي ذرة الهيدروجين, كما وتعتمد على نصف قطر التجويف S.

**الكلمات المفتاحية:** ذرة الهيدروجين, معادلة شرودينجر, فضاء متعدد الأبعاد, تجويف كروي.

## Résumé

Cette recherche a pour but de résoudre l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène libre et limitée dans une cavité sphérique poreuse dans un espace multidimensionnel  $N \geq 3$  où trouver des solution qui représentent la vague de ce mais a également été de trouver une formule pour calculer les valeurs d'énergie qui peuvent être détenus.

Et la suppressions dans la résolution de ce problème que l'équation de Schrödinger dans ces conditions ont la même formule de l'équation de Schrödinger dans le cas d'un atome d'hydrogène libre dans un espace multidimensionnel qui applique alors les condition pour parvenir à une solution il a été déduit que d'énergie des valeurs l'atomes d'hydrogène dans ces conditions dépend des dimensions qui représentent l'espace qui contient un atome d'hydrogène, aussi il dépend du rayon de la cavité S.

**Mots-clés:** atome d'hydrogène, l'équation de Schrödinger, un espace multidimensionnel, la cavité sphérique.