المعادلة القطريه   The Radial Equation

الجزء الزاوي من حل معادلة شرودنجر (الدالة الموجية الزاوية $Y(\vartheta,\varphi)$) هو واحد لكل انواع الجهود الكروية المتماثة . شكل الجهد $U(r)$ يؤثر فقط في الجزء القطري من الدالة الموجية $R(r)$ اي في المعادلة (8):

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(U(r)-E)R(r)=l(l+1)R(r) \qquad (20)$$

ولحل هذه المعادلة سنفترض مايلي

ليكن
$$R(r)=\frac{S(r)}{r}$$

$$\frac{dR}{dr}=\frac{r\frac{dS}{dr}-S}{r^2}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=r\frac{d^2S}{dr^2}$$

نعوض هذه العلاقات في المعادلة (20) نحصل على

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2S(r)}{dr^2}+\left[U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]S(r)=ES(r) \qquad (21)$$

هذه المعادلة متماثلة مع المعادلة ذات البعد الواحد ما عدا هنا لدينا اختلاف في الجهد والناتج من الحركه الدورانية اي هنا لدينا جهد مؤثر U_{eff} :

$$U_{eff}=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}+\frac{l(l+1)}{r^2} \qquad (22)$$

مثال

افترض ان جسيما تحت تأثير جهد على شكل بئر لامتناهي $U(r) = \begin{cases} 0 & if\ r < a \\ \infty & if\ r > a \end{cases}$

جد الدوال الموجية والطاقات المسموح بها لهذا الجسيم؟

الحل:

خارج البئر تكون الدالة الموجيه مساوية الى صفربينما داخل البئر تكون المعادلة القطرية كالتالي:

$$\frac{d^2S(r)}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - K^2\right] S(r) \qquad (23)$$

أذ ان $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

سنأخذ $l = 0$ وهي حالة سهله وبتطبيق حالات الحدود ومنها $S(a) = 0$ نحصل على

$$\frac{d^2S(r)}{dr^2} = -K^2S(r) \quad \rightarrow \quad \frac{d^2S(r)}{dr^2} + K^2S(r) = 0$$

حل هذه المعادلة بسيط ومن النوع

$$S(r) = A\,sin(Kr) + B\,cos(Kr)$$

$$R(r) = \frac{S(r)}{r} = A\,\frac{sin(Kr)}{r} + B\,\frac{cos(Kr)}{r}$$

في هذه المعادلة فان الثابت B يجب ان يكون مساوي للصفر لان الدالة تكون غير معرفة عندما $r = 0$ اي انها تؤول للمالانهايه وكذلك فان $\sin(Ka)$ يتطلب ان يذهب للصفر لكي نحصل على دالة تساوي صفر عند حالات الحدود

$$\sin(Ka) = 0$$

وهذا يتحقق عندما $Ka = n\pi$ (n عدد صحيح) وعليه نحصل على

$$R(r) = A\,\frac{\sin(\frac{n\pi}{a}r)}{r}$$

وبعد اجراء المعايرة على هذه الدالة نحصل على قيمة الثابت A

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$$

واخير حصلنا على الحل النهائي للدالة القطريه للجهد المسمى اعلاه

$$R_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a r^2}} \sin(\frac{n\pi r}{a}) \qquad (24)$$

اما الطاقات المسموح بها فيمكن الحصول عليها من $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ وكذلك $Ka = n\pi$

وبمساواة العلاقتين نحصل على $\frac{n\pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ومنها يمكن الحصول على الطاقة E_{nl}

$$E_{n0} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad , \qquad (n = 1,2,3, \ldots\ldots) \qquad (25)$$

وهذا كل ما مطلوب بالمثال اعلاه.

هناك حل عام مألوف للمعادلة (23) هو:

$$S(r) = Arj_l(Kr) + Brn_l(Kr) \qquad (26)$$

أذ ان $j_l(Kr)$ هي دالة بسل الكرويه من الرتبة l و $n_l(Kr)$ تمثل دالة نيومان الكرويه من الرتبة l وهذه الدوال تعطى بالعلاقات التالية:

$$j_l(x) = (-x)^l (\frac{1}{x}\frac{d}{dx})^l \frac{\sin(x)}{x}$$

$$n_l(x) = -(-x)^l (\frac{1}{x}\frac{d}{dx})^l \frac{\cos(x)}{x}$$

$$x = Kr$$

ذرة الهيدروجين The Hydrogen atom

تحتوي ذرة الهيدروجين على بروتون ثقيل غير متحرك (ونفترض انه يقع في نقطة الاصل) وله شحنه مقدارها (e) ويدور حول الالكترون جسيم خفيف جدا هو الالكترون وشحنته (e-) والطاقة التي تربط الالكترون بالبروتون (النواة) او ما يسمى بالجهد الكروي هي:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{r}$$

المعادلة القطرية (المعادلة 21) تأخذ الشكل التالي

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2S(r)}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]S(r) = ES(r) \qquad (27)$$

لنفرض ان $K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ نعوضه في المعادلة (27) ونقسمها على E ينتج لدينا

$$\frac{1}{K^2}\frac{d^2S(r)}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2 K} \frac{1}{Kr} + \frac{l(l+1)}{(Kr)^2}\right]S(r)$$

لنعرف القيم التالية

$$Kr = \rho \quad \text{و} \quad \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2 K} = \rho_0 \qquad (28)$$

عليه تصبح المعادلة كالتالي

$$\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]S(\rho) \qquad (29)$$

لايمكن حل هذه المعادلة بسهولة وبصورة مباشرة وانما سنلجأ الى حلها في ثلاث مناطق الاولى المنطقة البعية جدا والثانية المنطقة القريبة من نقطة الاصل ثم المنطقة الوسطى والتي سنأخذها على شكل متعدد حدود يربطين الحلين الاول والثاني معا بشكل يعطي الدالة القطرية الصحيحه

الحل في المنطقة البعيدة جدا $\rho \to \infty$ وهنا تؤول المعادلة 29 الى:

$$\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2} = S(\rho)$$

والحل لهذه المعادلة هو

$$S(\rho) = A\, e^{-\rho} + B\, e^{\rho} \qquad (30)$$

الحد الثاني في الطرف الايمن تصبح قيمته غير معرفة عندما تكون $\rho \to \infty$ لذلك يجب وضع قيمة $B = 0$ لذلك

$$U(\rho) \sim Ae^{-\rho} \qquad (31)$$

الحل في المنطقة القريبة من نقطة الاصل, $\rho \to 0$ وهنا تؤول المعادلة 29 الى:

$$\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} S(\rho)$$

والحل لهذه المعادلة هو :

$$S(\rho) = C\ \rho^{l+1} + D\ \rho^{-l}$$

وهنا ρ^{-l} تذهب للمالانهاية عندما $\rho \to 0$ لذلك يجب ان يكون $D = 0$ لذلك

$$S(\rho) \sim C\ \rho^{l+1} \qquad (32)$$

الحل الاخير المتمثل بمتعدد الحدود في المنطقة التي تربط الحلين الاول والثاني معا

ليكن $\gamma(\rho)$ هو الحل الذي يربط الحلين في المعادلتين (31) و (32) وسيتم امتصاص الثوابت A,C ضمن $\gamma(\rho)$ وبذلك يكون الحل الكلي

$$S(\rho) = \rho^{l+1}\, e^{-\rho}\gamma(\rho) \qquad (33)$$

$\gamma(\rho)$ هو متعدد حدود يعرف بالصيغة التالية:

$$\gamma(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$$

لنضع $n + l = q$ وكذلك $2l + 1 = p$ فيكون لدينا

$$L_{q-p}^{p}(x) = (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \qquad (34)$$

$L_{q-p}^{p}(x)$ متعد حدود يسمى متعدد لاكوري المرافق (المقابل) اما متعدد حدود لاكوري $L_q(x)$ من الرتبة q فيعطى بالعلاقة:

$$L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x})x^q \qquad (35)$$

$$\psi_{nlm(r,\vartheta,\varphi)} = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\vartheta,\varphi)$$

واخيرا فان الدالة الموجية المعايرة لذرة الهيدروجين تكون بالشكل التالي:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)\right] \qquad (36)$$

$$\psi_{nlm(r,\vartheta,\varphi)} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)\right] Y_l^m(\vartheta,\varphi) \qquad (37)$$

مثال

جد الدالة القطرية $R_{21}(r)$ لذرة الهيدروجين ؟

الحل:

نستخدم العلاقة (36) لايجاد الدالة المطلوبة وهنا لدينا $n = 2$ و $l = 1$

$$\sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} = \sqrt{\left(\frac{1}{a}\right)^3 \frac{1}{4(6)^3}} = \sqrt{\left(\frac{1}{2a}\right)^3 \frac{1}{108}}$$

$$\left(\frac{2r}{na}\right)^l = \frac{r}{a}$$

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{1}{2a}\right)^3 \frac{1}{108}}\ \left(\frac{r}{a}\right)\ e^{-r/2a} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{2a}\right)$$

$$L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{r}{a}\right) \rightarrow \ q = n + l = 3,\ \ p = 2l + 1 = 3$$

$$L_0^3\left(\frac{r}{a}\right) = \ ? \ = \ L_{q-p}^{p}(x)\,, \quad x = \frac{r}{a}$$

$$L_{q-p}^{p}(x) = (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x)$$

$$L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x}x^q)$$

$$L_3(x) = e^x \frac{d^3}{dx^3}(e^{-x}x^3)$$

$$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$$

$$L_{q-p}^{p}(x) = L_0^3(x) = (-1)^3 \left(\frac{d}{dx}\right)^3 L_3(x)$$

$$= (-1)^3 \frac{d^3}{dx^3}[-x^3 + 9x^2 - 18x + 6]$$

$$= 6$$

$$R_{21}(r) = \sqrt{\left(\frac{1}{2a}\right)^3 \frac{1}{108}} \ \left(\frac{r}{a}\right) \ e^{-r/2a} \ * 6$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} \ \ a^{-3/2} \ \left(\frac{r}{a}\right) \ e^{-r/2a}$$