

جامعة قاصدي مرباح ورقلة
كلية الرياضيات وعلوم المادة
قسم الفيزياء



مذكرة التخرج
ماستر أكاديمي

الميدان: علوم المادة
الشعبة: الفيزياء
التخصص: فيزياء النظرية
من إعداد الطالبة: شبيب فاطمة

الموضوع

الدراسة النسبية لذرة الهيدروجين في إطار مسألة
جسيمين

نوقشت يوم: 2020/09/29
أمام اللجنة المناقشة المكونة من:

الرئيس:	ثرية شهرة	أستاذ التعليم العالي	جامعة ورقلة 1
المؤطر:	بن الزائر هجيرة	أستاذ محاضر أ	جامعة ورقلة 1
الممتحن:	قريشي زينب	أستاذ محاضر ب	المدرسة العليا للأستاذ

السنة الجامعية 2020/2019

الإهداء

أهدي هذا العمل إلى:

نور حياتي، البسمة التي أستمد منها قوتي، النور الذي أضاء ظلمت الليالي
الحالكة، إلى اليد التي أستند عليها لأنفض و أحارب بها كل ضعف و يأس
مصدر أمل و الدي و والدتي الأعزاء عطاء و تقديمًا دائمًا دون مقابل حفظهما
الله.

رمز السند و العون أخوتي و أخواتي حبا متبادلا لايفنى، و لا أنس بالذكر روح
أخي أحمد و أختي صباح رحمهما الله و أسكنهم الفردوس الأعلى .

و إلى بنات و أولاد أخوتي و أخواتي .

إلى رمز الصداقة و السند زميلاتي رقايدة وريدة، غريب سعيدة، بكائر رقية و كل
زملائي ماستر نظرية دفعة 2020م .

إلى كل من ساعدني و لو بكلمة في إنجاز هذه المذكرة و إلى كل من نسيهم القلم
وهم في عمق القلب.

شعيب فاطمة





تشكرات

بسم الله الرحمن الرحيم اللهم صلي و سلم على سيدنا و رسولنا محمد خير البشرية و خاتم الأنبياء و المرسلين و على آله و صحبه و من اتبعه إلى يوم الدين تسليما كثيرا.

الحمد و الشكر أولا و أخرا لله فاطر السموات و الأرض رب كل شيء و مليكه الذي أوصلني لهذا المستوى المتقدم من العلم، الذي طالما دعوته فستجاب دعواتي و أستخرته فأرشدني إلى الدرب الصحيح، الذي كان معي في كل خطوة أتقدم بها في هذا العمل، أمدني بقوة الصبر و العزيمة لتغلب على حاجز اليأس و وفقت بفضلله العظيم في إتمام هذه المذكرة.

أتقدم و بكل معاني التقدير و الإحترام بالشكر للأستاذة بن الزائر هجيرة لتفضلها بالإشراف على هذا العمل، التي كانت معي و أعطتني من وقتها و رافقتني إلى آخر نقطة في إنجاز هاته المذكرة.

أتقدم بوافر الشكر والعرفان للأستاذة ثورية شهرة أستاذ التعليم العالي بجامعة قاصدي مرباح ورقلة بقبول ترؤس لجنة مناقشتي والأستاذة قريشي زينب أستاذ محاضر بالمدرسة العليا للأستاذ ورقلة عضوا ممتحنا في لجنة مناقشتي، الشكر لكل أساتذتي من الإبتدائي إلى الجامعة.

شكرا و بكل معنى تحمله هاته الكلمة بين طائيتها لعائلي من الكبير إلى الصغير. و أتقدم أيضا بالشكر و العرفان لكل زملائي رفيقات دربي و عملي، الشكر لكل من ساعدني و لو بمجرد السوؤل عن أحوالي في إنجاز هاته المذكرة أنتم في القلب.

شعيب فاطمة

الفهرس

6	مقدمة عامة	
7	I المعالجة الغير نسبية لذرة الهيدروجين	
7	1.I مدخل	
7	2.I نماذج التركيب الذري	
7	1.2.I نموذج دالتون 1803م	
8	2.2.I نموذج طومسون 1904م	
8	3.2.I نموذج رذرفورد 1911م	
9	4.2.I نموذج نيلز بور 1913م	
17	5.2.I نموذج بور-سمرفيلد	
17	6.2.I نموذج شرودينغر الكمي	
18	3.I الدراسة الغير نسبية لذرة الهيدروجين مع إنعدام حركة النواة	
21	1.3.I حل الجزء الزاوي	
27	2.3.I حل الجزء القطري	
33	4.I الدراسة الغير نسبية لذرة الهيدروجين بإدخال حركة النواة	
34	5.I إحداثيات مركز الكتل	
38	II المعالجة النسبية لذرة الهيدروجين	
38	1.II مدخل	
39	2.II معادلة ديراك	
42	3.II معادلة ديراك لذرة الهيدروجين	
42	1.3.II فصل المتغيرات في معادلة ديراك في حالة وجود كمون مركزي.	
49	2.3.II حل معادلات ديراك القطرية لجسيم في وجود كمون مركزي	

61	معادلة (Breit) لوصف تفاعل جسيمين	III
61	مدخل	1.III
62	نشأة معادلة (Breit)	2.III
63	إشتقاق داروين	3.III
66	هاملتون بریت (Breit)	4.III
68	خاتمة عامة	
69	ملحق	
77	قائمة المراجع	

قائمة الأشكال

14 مخطط مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين	1.I
16 نطاق بالمر الطيفي و الذي يوضح الخطوط المرئية بالأطوال الموجية	2.I

مقدمة عامة

إن ظهور النظرية الكمية في نهاية القرن التاسع عشر و بداية القرن العشرين كان بمثابة الثورة العلمية التي أقلعت جذور الغموض و الإبهام على كثير من الظواهر الفيزيائية على المستوى الذري و ما دونه و التي فشلت عن تفسيرها الميكانيك الكلاسيكية، و نذكر منها ظاهرة إشعاع الجسم الأسود، و من جهة أخرى ظهور النظرية النسبية الخاصة سنة 1905م على يد العالم ألبرت أنشتاين كان من الإنجازات العظيمة و الذكية، إذ أنها ساهمت بشكل أساسي و فعال في عدة تصميمات منها وحدات الوضع الشامل (GPS)، و بهذا كانت هاتين النظريتين المنبع الأساسي الذي إنبثقت و تطورت من خلاله مايعرف الآن بالفيزياء الذرية، إذ أنهما ساهمتا في التغلغل و التعمق داخل بنية الذرة من أجل تقديم دراسة واسعة و عميقة لتركيب الذري لتتيح بذلك فتح دراسات جديدة و بالتالي إبتكارات جديدة نستفيد منها في حياتنا العملية، و على إثر هذا سنتناول في مذكرتنا هاته دراسة لذرة الهيدروجين و ذلك في إطار مسألة جسيمين لأنها العنصر البسيط الذي يمهد و يفتح المجال في دراسة عناصر أعقد منها، و هذا في ظل ثلاثة فصول.

بحيث سنعرض في الفصل الأول نماذج التركييب الذري و التي من أهمها نموذج بور الذي ساهم في تفسير أطيايف ذرة الهيدروجين و الذرات الشبيهة بها، ثم نعالج ذرة الهيدروجين بواسطة النموذج الكمي لشرودينغر، و ذلك في حالة النواة ساكنة و الإلكترون يتحرك أي نعتبرها جسيم و احد، و في الحالة الثانية سنأخذ حركة النواة (البرتون) بعين الإعتبار و هذا كله في عدم وجود السبين.

أما الفصل الثاني سنتناول دراسة كمية نسبية لذرة الهيدروجين في حالة وجود السبين و ذلك بواسطة معادلة ديراك، و هذا بإعتبار ذرة الهيدروجين نظام واحد ألا و هو الإلكترون أي نهمل حركة النواة. و عندما نريد دراسة ذرة الهيدروجين كنظام مكون من جسيمين دراسة نسبية أي نأخذ حركة النوة بالحسبان فإننا لانستطيع تطبيق معادلة ديراك لأنها تختص فقط بدراسة الإلكترون أو مضاده البزيترون لهذا نلجأ لمعادلة أخرى تسمى بمعادلة بريت Breit و التي سنتطرق لها في الفصل الثالث و الأخير.

المعالجة الغير نسبية لذرة الهيدروجين

1.I مدخل

للفيزياء الذرية أهمية بالغة، إذ أنها فرع قائم بحد ذاته لدراسة الذرة و تركيبها، أغلفتها الإلكترونية (توزيع إلكتروناتها المدارية)، حالات الطاقة، التفاعلات مع المجالات المغناطيسية و الكهربائية و كذلك دراسة التفاعلات بين الذرات المتجاورة، و لقد حظي هذا الفرع بالتطور و ذلك بالإستناد إلى المفاهيم و المبادئ الأساسية المستعملة في النظرية الكمية، و التي توافقت بصورة مقبولة وواضحة مع الفيزياء الذرية، فكانت بداية التطور عبر الميكانيك الموجي الغير نسبي، الميكانيك النسبي لديراك ثم نظرية الحقول، و من هذا المنطلق الوجيز سنتطرق في الفصل الأول للمعالجة الغير نسبية لذرة الهيدروجين (الميكانيك الموجي الغير نسبي)، و لكن قبل الخوض في هذه الدراسة سنسلط الضوء على النماذج التي ساهمت في تطوير التركيب الذري، ثم نطبق نموذج بور على ذرة الهيدروجين و الذرات الشبيهة بها [1]. [2].

2.I نماذج التركيب الذري

1.2.I نموذج دالتون 1803م

لقد سعي الكيميائي دالتون لتطوير مفهوم علمي الذرة، و قد إعتمد في نمودجه على بقاء النسب و الكتل ثابتة و الذي تضمن ماييلي [1]:

- العناصر تتكون من جسيمات عديدة غير قابلة للإنقسام (ذرات ذات حجم صغير جدا).
- ذرات العنصر لها نفس الخصائص (الكتلة، الحجم و الشكل) و مختلفة كلياً عن ذرات العناصر الأخرى.
- الذرات مصممة متناهية الصغر، غير قابلة للإنقسام.
- يمكن تكوين المواد إنطلاقاً من اتحاد ذرات العناصر المختلفة مع بعضها البعض بنسب عددية بسيطة.
- الإتحاد الكيميائي هو عبارة عن تغيير في توزيع الذرات.

2.2.I نموذج طومسون 1904م

مع إكتشاف الكهرباء ظهرت تقنية الأشعة (المهبطية) و التي تظهر أثناء تمرير الكهرباء في أنبوبة مفرغة من الهواء، و عند تسليط مجال مغناطيسي أو كهربائي تنحرف و قد تصنع ظلال عند إصطدامها بأي جسم، لذا إعتقد الفيزيائيون أن هذه الأشعة تتكون من جسيمات ذات شحنة كهربائية سالبة، و في سنة 1896م أجرى جوزيف طومسون أبحاثاً حول خواص هذه الأشعة، و في سنة 1897م أعلن أن هذه الجسيمات تدعى الإلكترونات، و بالتالي أظهر أن مفهوم الذرة الغير قابل للإنقسام خاطئ، و لكن إكتشافه للإلكترون ذو الشحنة السالبة أثار الجدل في الوسط العلمي في ذلك الوقت لأنه من المعروف أن الذرة متعادلة كهربائياً فأين الشحنة الموجبة؟ هذا ما أدى بطومسون في الفترة ما بين (1903م-1907م) إلى وضع نموذج المعروف بكرة معجونة بها بعض حبوب الزبيب، و بالتالي تمحور نمودجه على النقاط [1]:

- الذرة كرة مصممة من الشحنات الموجبة تتخللها الإلكترونات السالبة.
- الذرة متعادلة كهربائياً.

3.2.I نموذج رذرفورد 1911م

لقد أدت محاولات العالم رذرفورد للكشف عن التركيب الدقيق لذرة إلى إبتكار التجربة المعروفة بتجربة الرقائق الذهبية و التي تتمثل في إطلاق جسيمات ألفا الموجبة من مصدر مشع نحو شريحة ذهبية رقيقة جداً، ثم إستقبل جسيمات ألفا كومضات ضوئية على شاشة الإستقبال و هي لوح من كبريتيد الخارصين موضوعة خلفها، فلاحظ مرور معظم الحزم مباشرة عبرى الشريحة، في حين إنحرف جزء من هذه الحزمة في الجهة المعاكسة، و قد تمكن رذرفورد من تفسير النتائج المتحصل عليها من خلال الإستنتاجات التالية [1] [3]:

- إنحراف معظم الجسيمات دليل وجود فراغ كبير في الذرة.
- تحتوي الذرة على جسيمات ثقيلة ذات شحنة موجبة، و بالتالي إنعكاس بسيط لبعض جسيمات ألفا عند إقترابها من هذه الجسيمات الموجبة.

- الإنحراف الكلي لجسيمات ألفا دليل على تركز الجسيمات الموجبة في وسط الذرة.
 - و من خلال هذا وضع العالم رذرفورد نموذج الذري الذي تضمن مايلي:
 - نواة مركزية يدور حولها على مسافة واسعة الإلكترونات السالبة الشحنة، فهذا النظام يشبه حركة الكواكب حول الشمس مع إستبدال قوى الجاذبية بين الكتل بتجاذب كولوم بين الشحنات.
 - معظم الذرة فراغ لأن الذرة ليست مصمتة و حجم النواة صغير جدا بالنسبة لحجم الذرة.
 - كتلة الذرة متمركزة في النواة لأن كتلة الإلكترون صغيرة جدا مقارنة مع كتلة النواة.
 - تحتوي الذرة على شحنة موجبة في النواة و شحنة سالبة تحملهاالإلكترونات.
 - الذرة متعادلة كهربائيا لأن عدد الشحنات الموجبة يساوي عدد الشحنات السالبة.
 - تدور الإلكترونات حول النواة في مدارات دائرية واقعة تحت تأثير قوتين متعاكستين في الإتجاه متساويتين في المقدار هما قوة الطرد المركزي الناشئة عن دوران الإلكترون حول النواة و قوة جذب النواة للإلكترون.
- إلا أن نموذج رذرفورد فشل في تفسير :

- النواة تجذب الإلكترون الذي يدور في مسار دائري فتنشأ قوة مركزية، و بالتالي يتحرك الإلكترون بتسارع مركزي و يكون هو و النواة زوج متذبذب، و نتيجة هذه الحركة المستمرة تشع الذرة أمواج كهرومغناطيسية مستمرة فيفقد الإلكترون طاقته تدريجيا و بالتالي يدور في مسار حلزوني إلى أن يسقط على النواة، و هذا لا يحدث.
- الإلكترون يدور حول النواة و بالتالي يشكل معها زوج متذبذب و منه فالذرة تشع طيف مستمر يعطي كل الترددات و الأطوال الموجية و هذا يناقض التجارب العلمية التي أثبتت أن كل نوع من الذرات تشع طيفا خطيا له طول موجي محدد و بدقة خاصة بها.

4.2.I نموذج نيلز بور 1913م

في سنة 1913م وضع نيلز بور نموذج الذري الذي جمع فيه أفكار نموذج رذرفورد و من النظرية الكمية لماكس بلانك (فكرة تكيم الطاقة) و من مفهوم أنشتاين للفوتون، و بالتالي تمكن بور من خلال تشكيل هذا المزيج من بناء نموذج الشبه كلاسيكي و الذي تضمن المسلمات التالية[4]:

- تدور الإلكترونات حول النواة في مدارات طاقة (مستويات طاقة) محددة و ثابتة، أي أنه يسمح لذرة أن تتواجد في حالات مستقرة معينة ذات طاقة E_1, E_2, \dots .

- بغية تجنب إستهلاك الطاقة أثناء الإشعاع إفترض بور أن الإلكترون يتواجد في مدارات مسموحة تتوافق مع تلك التي يكون فيها الزخم المداري (كمية الحركة الزاوية) للإلكترون عددا صحيحا مضاعفا \hbar :

$$L = m_e v r = n \hbar. \quad (1)$$

L الزخم الزاوي

m_e كتلة الإلكترون

v سرعة الإلكترون

r نصف قطر المدار

\hbar ثابت بلانك

و تعرف هذه العلاقة بتكميم بور لزمخ الزاوي، و هذا يعني أن كمية الحركة الزاوية تأخذ قيم متقطعة فقط و هذا ما يؤدي إلى أن تكون قيم الطاقة متقطعة.

- عند بقاء الإلكترون في مدار ثابت فإنه لا يشع الطاقة الكهرومغناطيسية، بحيث ينبعث الإشعاع من الذرة متى ما قفز الإلكترون من مدار ذو طاقة ابتدائي إلى مدار ذو طاقة أقل، بحيث لا يمكننا رؤية أو معالجة هذا الإنتقال و خصوصا أن تردد الفوتون المنبعث يرتبط بالتغير في طاقة الذرة و لا يعتمد على تردد حركة الإلكترون المدارية، و بالتالي نستطيع إيجاد الإشعاع المنبعث من خلال العلاقة التالية:

$$h\nu = E_n - E_m. \quad (2)$$

و تمتص طاقة الفوتون (الإشعاع) بواسطة الذرة إذ إمتلك الفوتون طاقة تتناسب تماما مع فرق الطاقة بين حالة مسموحة للذرة و حالتها المثيجة و بعد الإمتصاص يختفي الفوتون و ينتقل بذلك الإلكترون إلى مدار أعلى [1] [3] [4] [7].

تطبيق نموذج بور على ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة بها:

في هذه الحالة سنطبق مسلمات بور على ذرة الهيدروجين من أجل تقديم وصفا كمي لمستويات الطاقة الخاصة به و طيفه.

بتطبيق القانون الثاني لنيوتن على الإلكترون نجد أن القوة الكهربائية يجب أن تساوي حاصل ضرب الكتلة في التسارع المركزي:

$$\sum \vec{F} = m_e \vec{a}. \quad (3)$$

يعطى قانون كولوم لقوة التجاذب بين الإلكترون و البروتون:

$$F = \frac{KZe^2}{r^2}. \quad (4)$$

يعطى التسارع المركزي للإلكترون

$$a = \frac{v^2}{r}. \quad (5)$$

بالربط بين العلاقة (3) ، (4) و (5) نحصل:

$$\frac{KZe^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r}, \quad (6)$$

$$K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,99 \times 10^9 N.m^2.C^{-2}$$

Z العدد الذري

بتبسيط المعادلة (6) نجد:

$$\frac{KZe^2}{r} = m_e v^2, \quad (7)$$

$$\implies r = \frac{KZe^2}{m_e v^2}. \quad (8)$$

تدل العلاقة (8) أن r يأخذ كل القيم الممكنة لأنه يتعلق بسرعة الإلكترون المتحرك .
و بضرب العلاقة (7) في $\frac{1}{2}$ نجد أن الطاقة الحركية للإلكترون تكتب:

$$E_c = \frac{1}{2} \frac{KZe^2}{r} = \frac{1}{2} m_e v^2. \quad (9)$$

و كما ذكرنا سابقا أن r يأخذ كل القيم الممكنة لذ نميز حالتين لطاقة الكامنة:

الحالة الأولى: الطاقة الكامنة تساوي الصفر لما r يؤول إلى المالانهاية.

الحالة الثانية: الطاقة الكامنة على بعد r :

$$E_p = - \int_{\infty}^r \frac{KZe^2}{r^2} dr = -KZe^2 \int_{\infty}^r \frac{1}{r^2} dr = -\frac{KZe^2}{r}. \quad (10)$$

بجمع العلاقتين (9) و(10) نجد الطاقة الكلية لنظام إلكترون-بروتون:

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2} \frac{KZe^2}{r} - \frac{KZe^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{KZe^2}{r}. \quad (11)$$

الإشارة السالبة لطاقة تدل على أن النظام إلكترون-بروتون مرتبط. من خلال المسلمة الثانية لبور و التي تفرض وجود مدارات مسموحة نحصل على أنصاف أقطار هذه المدارات المسموحة:

من العلاقة (1) نجد :

$$v = \frac{n\hbar}{m_e r}, \quad (12)$$

و من العبارة (8) لدينا:

$$v^2 = \frac{KZe^2}{m_e r}, \quad (13)$$

بتربيع العلاقة (12) و مساوتها مع العلاقة (13) نجد:

$$\frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r^2} = \frac{KZe^2}{m_e r}, \implies r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e KZe^2}. \quad (14)$$

بحيث $n = 1, 2, 3, \dots$.

يتبين من هذه العلاقة أن أنصاف أقطار المدارات المسموحة تمتلك قيم مكممة، و قد توصلنا لهذه النتيجة بالإستناد إلى أن الإلكترون يمكن أن يتواجد فقط في مدارات مسموحة معينة فقط يتم تحديدها بواسطة عدد صحيح n .

في حالة ذرة الهيدروجين نعوض $Z = 1$ فنحصل:

$$r_n = \left(\frac{\hbar^2}{m_e K e^2} \right) n^2 = a_0 n^2. \quad (15)$$

و هذه علاقة عامة لنصف قطر أي مدار في ذرة الهيدروجين، بحيث:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e K e^2} = 0,0529 \text{ nm}. \quad (16)$$

و يسمى نصف قطر المدار الأصغر لبور و يعود ل $n = 1$.

و لإيجاد السرعة في المدار المسموح نعوض العلاقة (14) في (12):

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e} \left(\frac{m_e K Z e^2}{n^2 \hbar^2} \right) = \frac{K Z e^2}{n\hbar}. \quad (17)$$

نعوض $Z = 1$

$$v_n = \frac{K e^2}{n\hbar}. \quad (18)$$

و هي عبارة سرعة الإلكترون لذرة الهيدروجين في المدارات المسموحة.
إن النسبة بين سرعة الإلكترون في المدار v_1 و سرعة الضوء تساوي ثابت يسمى بثابت البنية الدقيقة:

$$v_1 = \frac{K e^2}{\hbar}, \quad (19)$$

بحيث $n = 1$

$$\frac{v_1}{c} = \frac{K e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} = \alpha, \quad (20)$$

$$v_1 = \alpha c = \frac{3 \times 10^8}{137} m.s^{-1} \simeq 2,19 \times 10^6 m.s^{-1}. \quad (21)$$

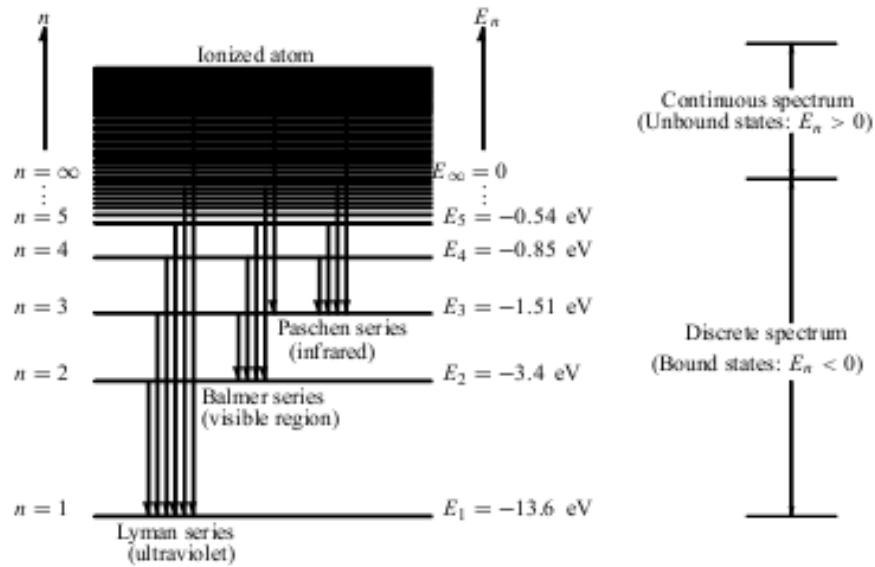
و هي سرعة الإلكترون في المدار الأول.

طاقة الإلكترون في ذرة الهيدروجين نعوض $Z = 1$ في العلاقة (11):

$$E = -\frac{1}{2} \frac{K e^2}{r}. \quad (22)$$

إن هذه العلاقة تمثل الطاقة الكلية للإلكترون، لأننا إفترضنا أن النواة (البرتون) ثقيلة بشكل لانهائي مقارنة بالإلكترون، و بالتالي نعتبرها ساكنة و منه فطاقة النظام (إلكترون - برتون) هي طاقة الإلكترون الكلية.
إن تكميم أنصاف أقطار المدار يؤدي إلى تكميم الطاقة، و بتعويض العلاقة (14) في العلاقة (22) نحصل:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{K e^2}{r_n} = -\frac{K e^2}{2} \frac{m_e K e^2}{n^2 \hbar^2} = -\frac{m_e}{2} \left(\frac{K e^2}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2} = -\frac{K e^2}{2 a_0} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,606}{n^2} eV. \quad (23)$$



شكل 1.I: مخطط مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين

بتعويض $n = 1$ نحصل على طاقة المستوي الأول:

$$E_1 = -13,606eV. \quad (24)$$

الإشارة السالبة لطاقة تعود إلى طبيعة الحالة المقيدة، أي أن الحالات ذات الطاقة السالبة $E_n < 0$ تتوافق مع الحالات المقيدة، و من خلال مخطط مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين نجد أن مستويات الطاقة ممثلة بخطوط أفقية، و أنه كلما زادت قيمة n تقاربت مستويات الطاقة بسرعة، و لأن n يأخذ كل القيم الممكنة من $n = 1$ إلى $n = \infty$ هذا يعني أن طيف الطاقة لذرة الهيدروجين يحتوي على عدد لانهائي لمستويات الطاقة المنفصلة، ففي الحالة الأرضية لذرة الهيدروجين $n = 1$ تكون $E_1 = -13,606eV$ و نصف القطر هو $a_0 = 0,0529nm$ ، أما في الحالات $n = 2, 3, 4, \dots$ فتتوافق مع الحالات المثارة لذرة لأن طاقتها أكبر من طاقة الحالة الأرضية، و من الطبيعي أنه عندما يؤول n إلى المالا نهاية فإن نصف قطر المدار لذرة يكون كبير جدا و منه فقيم الطاقة تساوي الصفر و هذا ما يوضحه مخطط مستويات الطاقة.

طيف ذرة الهيدروجين:

من خلال المسلمة الثالثة لبور يمكننا حساب تردد الفوتون المنبعث عند قفز الإلكترون من مدار طاقة أعلى إلى مدار طاقة أقل.

$$h\nu = E_n - E_m \implies \nu = \frac{E_n - E_m}{h},$$

بتعويض عبارة الطاقة نجد:

$$\nu = \frac{m_e(Ke^2)^2}{2h\hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{Ke^2}{2a_0h} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (25)$$

و لأن الكمية المقاسة عمليا هي الطول (العدد) الموجي، لدينا:

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \quad (26)$$

$$\Rightarrow \bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{Ke^2}{2a_0hc} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (27)$$

بحيث $R_H = 1,0973732 \times 10^7 m^{-1}$ يسمى بثابت ريدبارغ، $\bar{\nu}$ العدد الموجي.

إن العلاقة (27) مشابهة للعلاقات التجريبية التي إكتشفها بالمر و ريدبارغ فالمعادلات التي سنقدمها تمثل السلاسل الطيفية لذرة الهيدروجين على الترتيب:
-1 سلسلة ليمان :

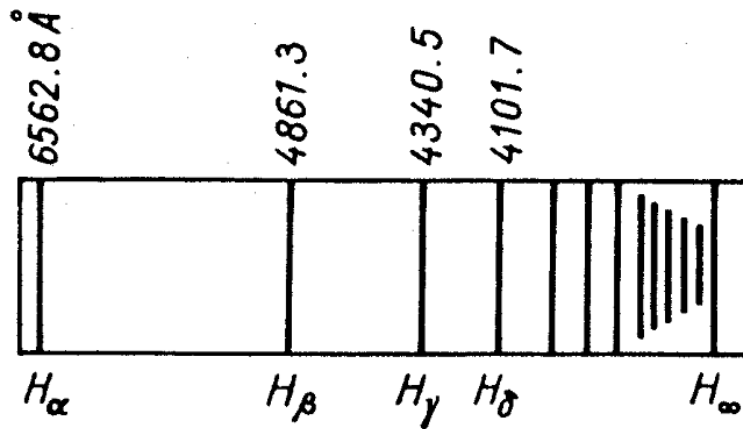
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (28)$$

و هي جميع الإنتقالات من $m = 1$ إلى $n = 2, 3, 4, \dots$ فهذه العلاقة تعطي الخطوط المختلفة لسلسلة ليمان عند قفز الإلكترون من مستوي متهيج إلى الحالة الأرضية.
-2 سلسلة بالمر:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (29)$$

جميع الانتقالات من $m = 2$ إلى $n = 3, 4, \dots$ نحصل على الخطوط المرئية لسلسلة بالمر عندما ينتقل الإلكترون من مدارات خارجية إلى المدار الثاني و الخطوط الأربعة المرئية هي:

- لما $m = 2$ و $n = 3$ نحصل على H_α (أحمر) بطول موجي $656,3nm$.
- لما $m = 2$ و $n = 4$ نحصل على H_β (أخضر) بطول موجي $486,1nm$.
- لما $m = 2$ و $n = 5$ نحصل على H_γ (أزرق) بطول موجي $434,1nm$.
- لما $m = 2$ و $n = 6$ نحصل على H_δ (بنفسجي) بطول موجي $410,2nm$.



شكل I.2: نطاق بالمر الطيفي و الذي يوضح الخطوط المرئية بالأطوال الموجية

3- سلسلة باشن:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (30)$$

جميع الإنتقالات من $m = 3$ إلى $n = 4, 5, \dots$

4- سلسلة براكيت:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (31)$$

جميع الإنتقالات من $m = 4$ إلى $n = 5, 6, \dots$

5- سلسلة بافند:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (32)$$

جميع الإنتقالات من $m = 5$ إلى $n = 6, 7, \dots$

مزيا نموذج بور

- نجح في تفسير أطياف ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة بها.
- ساهم في إعطاء تفسير لتفادي سقوط الإلكترون على النواة، و هو أن دوران الإلكترون حول النواة في الحالة المستقرة لا يشع الطاقة.
- تنبأت نظرية بور بإعطاء قيمة نصف قطر ذرة الهيدروجين بمرتبة المقدار الصحيحة بالإستناد على القياسات العملية، و قد توجت هذه النظرية بالنصر بفضل هذه النتيجة.

عيوب نظرية بور

- عجزت عن تفسير أطياف ذرات أثقل (أعقد) من ذرة الهيدروجين و الذرات الشبيهة بها.
- فشل في تفسير ظهور التركيب الدقيق أي إنشطار خطوط الطيف إلى العديد من المركبات.
- لم تتمكن من تفسير إنشطار خطوط الطيف بوجود مجال كهربائي (ظاهرة ستارك)، و وجود مجال مغناطيسي (مفعول زيمان).
- لم يتطرق إلى توزيع الإلكترونات في الذرات.
- لم يتمكن من حساب الطاقات للحالات الساكنة لذرات التي تحتوي إلكترونين أو أكثر.
- لقد عمل هذا النموذج بإعتبار سلوك الإلكترون دقائق (جسيم) و لم يأخذ بعين الإعتبار السلوك الموجي له [1] [3] [4] [7].

5.2.I نموذج بور-سمرفيلد

لقد بني نموذج بور على أساس المدارات (المسارات) الدائرية للإلكترون، و لكن عندما تم تفحص الأطياف بجهاز المطياف وجد أن كل خط يتكون من عدة خطوط متقاربة من بعضها البعض و هذا ما عجز عن تفسيره نموذج بور، و من خلال هذا قام العالم سمر فيلد بتطوير نظرية بور و ذلك بإفترضه أن الإلكترون يدور في مسارات بيضوية أي عبارة عن قطع ناقص، بحيث تقع النواة في إحدى بؤرتيه و بهذا تكون مدارات بور حالة خاصة، و قد توصل لعبارة الطاقة المكتملة للإلكترون في كل مدار بإدخال العددين الكميين (n_r, n_θ) (البرهان الرياضي لهذا النموذج أنظر الملحق [1]).

6.2.I نموذج شرودينغر الكمي

إن النظرية الموجية استطاعت أن تعطي تفسيراً مقبولاً لتركيب الذري، و لقد بنيت على تصور بور مع الأخذ بعين الإعتبار الإكتشافات الحديثة و التطورات في الميكانيك الكمي، ففي عام 1926م وضع العالم شرودينغر معادلته الموجية، و عندما طبقها على ذرة الهيدروجين تبين أن حركة الإلكترون تشبه السحابة و بهذا إستبدل مفهوم المدار الإلكتروني بالأوربيتال، و بالتالي تمكن شرودينغر من وضع نموذج لتركيب الذري الذي جاء بمايلي [1]:

- معظم فراغ الذرة تشغله الأوربيتالات و التي تحتوي على الإلكترونات في شكل إلكتروني محدد.
- يتسع كل أوربيتال لإلكترونين محددتين بالأعداد الكمية الأربعة و هي: عدد الكم الرئيسي، المداري، المغناطيسي، و عدد الكم المغزلي بحيث يكون لكل إلكترون منهم في أي من الأوربيتالات قيمة واحدة للعدد الكمي المغزلي.

- الأوربيتالات ليست ثابتة و محددة في الإتجاه، بل تمثل إحصائية تواجد إلكترونين لهم نفس الأعداد الكمية الثلاثة (العدد الكمي الرئيسي، المداري و العدد الكمي المغناطيسي)، بحيث المنطقة التي يقل فيها تواجد الإلكترون تمثل آخر حدود الأوربيتال.
 - تميل الإلكترونات إلى شغل أقل مستوى طاقة في الذرة (المستوي الطاقوي الأول)، بحيث الإلكترونات الموجودة في مدار التكافؤ هي المسؤولة عن الروابط الكيميائية المختلفة بين الذرات.
- و بالإضافة إلى ذلك تعد دراسة حركة جسيم في حقل القوى المركزي المتناظر من المسائل الأساسية في الميكانيك الكمية، و على إثرها تبني النظرية الكمية لذرة الهيدروجين و الذرات المتعددة الإلكترونات، و منه نقول أن القوى المؤثرة في الجسيم هي قوى مركزية و هي القوى التي تكون فيها الطاقة الكامنة دالة تابعة فقط للمسافة الشعاعية ما بين الجسيم و بداية الإحداثيات، و لهذا يكون إرتباط الدالة الموجية للجسيم بالزاويا الكروية في الحقل المركزي المتناظر لايتعلق بشكل التابع الكموني، و بالتالي تكون دراسة الجزء الزاوي (الكروي) من التابع الموجي تنطبق على أي حركة في الحقل المركزي [5][6].

3.I الدراسة الغير نسبية لذرة الهيدروجين مع إنعدام حركة النواة

في هذه الحالة سندرس مسألة الإلكترون ذو شحنة e يتحرك ضمن حقل كهربائي ساكن (كمون كولومي) لنواة، ففي حالة بروتون واحد أي ذرة الهيدروجين $Z = 1$ ، أما في حالة نواة مكونة من بروتونين أو أكثر أي الذرات الشبيهة بالهيدروجين نأخذ بصورة عامة شحنة النواة مساوية إلى Ze ، بحيث Z هو العدد الذري، و كما جاء في الميكانيك الكمي الطاقة الكلية لنظام نعتبر عنها بمؤثر الهاملتون \hat{H} كما يلي [1][2][3][4][7]:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(r). \quad (33)$$

وتكتب معادلة القيمة الذاتية و التي تعطي مستويات الطاقة:

$$\hat{H}\Psi(r, t) = E\Psi(r, t). \quad (34)$$

بتعويض العبارة (33) في المعادلة (34) نحصل على معادلة شرودينغر:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r, t). \quad (35)$$

بحيث:

m_e كتلة الإلكترون

E الطاقة الكلية لنظام

$\Psi(r, t)$ الدالة الموجية

∇ لابلاسيان

تعطى الطاقة الكامنة لذرة الهيدروجين (الطاقة الكمونية للإلكترون ضمن حقل كولوم) والذرات الشبيهة بها:

$$V(r) = -\frac{KZe^2}{r}. \quad (36)$$

وبما أن الطاقة الكامنة لا تعتمد على الزمن (نظام مستقر) نقوم بفصل المتغيرات:

$$\Psi(r, t) = \psi(r)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}. \quad (37)$$

بتعويض العبارة (37) في المعادلة (35) نحصل على معادلة شرودينغر في الحالة المستقرة:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (38)$$

في هذه الحالة سنواجه مشكلة تعرقل حل هذه المعادلة و هي أنه لا يمكننا فصل المتغيرات (x, y, z) عن بعضهم لأن الطاقة الكامنة تعتمد على r ، لهذا نقوم بتحويل الإحداثيات الكارتيزية (x, y, z) إلى الإحداثيات الكروية (r, θ, ϕ) .

بحيث يعطى مؤثر لابلاسيان في الإحداثيات الكروية :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (39)$$

بتعويض العبارة (36) و (39) في المعادلة (38) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{KZe^2}{r} \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi), \quad (40)$$

بترتيب هذه المعادلة نجد :

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(r, \theta, \phi)$$

$$+\frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\frac{KZe^2}{r} + E \right] \psi(r, \theta, \phi) = 0. \quad (41)$$

لحل هذه المعادلة نقوم بفصل الدالة الموجية إلى دالتين فرعيتين كمايلي :

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (42)$$

نعوض العبارة (42) في (41):

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] R(r)Y(\theta, \phi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\frac{KZe^2}{r} + E \right] R(r)Y(\theta, \phi) = 0, \quad (43)$$

بفك الأقواس :

$$\frac{Y(\theta, \phi)}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{R(r)}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{R(r)}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\frac{KZe^2}{r} + E \right] R(r)Y(\theta, \phi) = 0, \quad (44)$$

نضرب في r^2 ونقسم على $R(r)Y(\theta, \phi)$ فنجد:

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left[\frac{KZe^2}{r} + E \right] = 0, \quad (45)$$

و منه

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left[\frac{KZe^2}{r} + E \right]$$

$$= -\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right]. \quad (46)$$

نلاحظ أن الطرف الأيسر للمعادلة يعتمد فقط على المتغير r بينما الطرف الأيمن للمعادلة فيعتمد على المتغيرين θ و ϕ فقط، و منه إذا غيرنا في r يبقى الطرف الأيمن للمعادلة ثابت، أما إذا غيرنا في θ أو ϕ يبقى الطرف الأيسر للمعادلة ثابت أي مجموع الحدين في الطرف الأيسر للمعادلة تساوي ثابت ، ولتساوي طرفي المعادلة يجب أن تكون مساوية إلى الثابت وليكن λ :

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left[\frac{KZe^2}{r} + E \right] = \lambda, \quad (47)$$

$$-\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right] = \lambda, \quad (48)$$

نقسم المعادلة (47) على r^2 ونرتب المعادلتين (47) و (48) :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(\frac{KZe^2}{r} + E \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R(r) = 0. \quad (49)$$

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right] + \lambda Y(\theta, \phi) = 0. \quad (50)$$

نلاحظ أن المعادلة (50) لا تتعلق بـ r ولا بالتابع الكموني، و منه فإن حلها ينطبق على كل حركة في أي حقل مركزي و هذا ما ذكرناه سابقا.

1.3.I حل الجزء الزاوي

نضرب طرفي (50) في \hbar^2 فنحصل :

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right] = \hbar^2 \lambda Y(\theta, \phi), \quad (51)$$

نلاحظ أن هذه المعادلة متلائمة مع المتوافقة الكروية (معادلة القيم الذاتية) المميزة لمربع مؤثر كمية الحركة الزاوية \hat{L}^2 و التي تعطى :

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (52)$$

بجيث $Y_{lm}(\theta, \phi)$ هي دالة الحالة المناسبة، بحيث يعطى مؤثر مربع كمية الحركة الزاوية \hat{L}^2 كما يلي:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (53)$$

و يعطى أيضا:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (54)$$

تعطى معادلة القيم المميزة له كمايلي :

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (55)$$

و بمطابقة المعادلة (52) بالمعادلة (51) نجد $\lambda = l(l+1)$ ، و بالتالي تكون دالة الحالة المناسبة للمعادلة (51) هي $Y_{lm}(\theta, \phi)$ و منه يمكننا القول أن القيم المميزة (الذاتية) لهذه المعادلة هي نفسها القيم المميزة لمربع كمية الحركة \hat{L}^2 ، و منه نكتب :

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_{lm}(\theta, \phi) + l(l+1)Y_{lm}(\theta, \phi) = 0. \quad (56)$$

– حل معادلة فاي:

نفصل المتغيرات بوضع :

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi). \quad (57)$$

نعوض في المعادلة (56)

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) + l(l+1)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) = 0, \quad (58)$$

بفك الاقواس :

$$\frac{\Phi_m(\phi)}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{\Theta_{lm}(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi_m(\phi)}{d\phi^2} + l(l+1)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) = 0, \quad (59)$$

بالقسمة على $\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$ نجد:

$$\frac{1}{\Theta_{lm}(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi_m(\phi) \sin^2 \theta} \frac{d^2\Phi_m(\phi)}{d\phi^2} + l(l+1) = 0, \quad (60)$$

نضرب هذه المعادلة في $\sin^2 \theta$:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta_{lm}(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi_m(\phi)} \frac{d^2\Phi_m(\phi)}{d\phi^2} + l(l+1) = 0, \quad (61)$$

و منه نجد:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta_{lm}(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + l(l+1) = -\frac{1}{\Phi_m(\phi)} \frac{d^2\Phi_m(\phi)}{d\phi^2}, \quad (62)$$

نلاحظ أن الحد الأيمن يعتمد فقط على ϕ ، فإذا قمنا بتغيير ϕ يبقى الحد الأيسر للمعادلة ثابت، هذا يعني أن مجموع الطرفين يسار المعادلة بالضرورة يبقى ثابت و ليكن m^2 :

$$-\frac{1}{\Phi_m(\phi)} \frac{d^2\Phi_m(\phi)}{d\phi^2} = m^2 \implies \frac{d^2\Phi_m(\phi)}{d\phi^2} = -m^2\Phi_m(\phi). \quad (63)$$

إن هذه المعادلة هي معادلة القيم الذاتية و بالتالي نستطيع إيجاد مايلي:

$$\Phi_m(\phi) = Ae^{\pm im\phi} \implies \Phi_m(\phi) = Ae^{im\phi}. \quad (64)$$

في هذه الحالة نأخذ الحل الموجب لكي لا يغير الإلكترون إتجاه حركته، لأنه عندما يغير إتجاه حركته سيسقط على النواة وهذا لا يحدث.

و لمعرفة الثابت A نستعمل شرط التنظيم لتكون الدالة $\Phi_m(\phi)$ منظمة، و بما أن الزاوية ϕ تتحرك في المجال $[0, 2\pi]$ يكون التكامل على على حدود هذا المجال:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi)\Phi_m(\phi)d\phi = 1, \quad (65)$$

$$\int_0^{2\pi} A^2 e^{-im\phi} e^{im\phi} d\phi = 1, \quad (66)$$

$$\implies A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (67)$$

بتعويض العبارة (67) في (64) نجد:

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (68)$$

و لكي تكون الدالة الموجية أحادية القيمة يجب أن تكون قيمة الدالة $\Phi_m(\phi)$ عند الزاوية ϕ مساوية لقيمتها عند الزاوية $\phi + 2\pi$:

$$\Phi_{lm}(\phi) = \Phi_m(\phi + 2\pi), \quad (69)$$

$$Ae^{im\phi} = Ae^{im(\phi+2\pi)} = Ae^{im\phi} e^{im2\pi}, \quad (70)$$

$$e^{im2\pi} = 1, \quad (71)$$

و لدينا من جهة أخرى:

$$\cos(m2\pi) + i \sin(m2\pi) = 1. \quad (72)$$

و من أجل تحقق أحادية القيمة يجب وضع شرط على القيم المسموحة التي تأخذها m و بذلك يصبح عدد كم يسمى بعدد الكم المغناطيسي و يأخذ القيم $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$.

- حل معادلة ثيتا

بتعويض العبارة (63) في المعادلة (60) نجد:

$$\frac{1}{\Theta_{lm}(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) = 0, \quad (73)$$

بتبسيط هذه المعادلة:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta_{lm}(\theta) = 0. \quad (74)$$

يمكن حل هذه المعادلة و المرتبطة بشرط الحدود الفيزيائي و هو أن تبقى $\Theta_{lm}(\theta)$ محدودة في المجال الفيزيائي $0 \leq \theta \leq \pi$ ، و بوضع $w = \cos \theta$ ، و $P(w) = P(\cos \theta) = \Theta_{lm}(\theta)$ ، و لإعادة صياغة المعادلة بالمتغيرات w

$P(w)$, نجري الحسابات التالية:

$$\frac{d \cos \theta}{d\theta} = -\sin \theta, \quad (75)$$

$$d \cos \theta = -\sin \theta d\theta, \quad (76)$$

$$\frac{d}{d \cos \theta} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}, \quad (77)$$

$$\Rightarrow -\frac{d}{dw} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}. \quad (78)$$

نضرب طرفي المعادلة (77) من اليسار في $\sin \theta$ نجد:

$$\sin^2 \theta \frac{d}{d \cos \theta} = -\sin \theta \frac{d}{d\theta}, \quad (79)$$

وبما أن

$$\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1, \quad (80)$$

$$-\frac{(1 - w^2)d}{dw} = \sin \theta \frac{d}{d\theta}. \quad (81)$$

بإدخال المتغيرات نجد:

$$-\frac{d}{dw} \left[-\frac{(1 - w^2)}{dw} dP(w) \right] + \left[l(l + 1) - \frac{m^2}{w^2} \right] P(w) = 0. \quad (82)$$

تعرف هذه المعادلة بالمعادلة التفاضلية لليجنדר وحلها يعطى بدلالة دوال ليجنדר المعممة $P_l^m(\cos \theta)$ و هي دوال ل $\cos \theta$ ، بحيث تعطي دوال ليجنדר بالشكل التالي :

$$P_l^m(w) = (1 - w^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dw^{|m|}} P_l(w). \quad (83)$$

$$P_l^{-m}(w) = P_l^m(w). \quad (84)$$

كما نعرف أيضا كثير حدود ليجنדר بالشكل التالي:

$$P_l(w) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dw^l} (w^2 - 1)^l. \quad (85)$$

و الحل يكون كما يلي:

$$\Theta_{lm}(\theta) = C_{lm}P_l^m(w). \quad (86)$$

و بهذا نكون قد تحصلنا حل الجزء الزاوي و الذي يعطى كما يلي:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = C_{lm}P_l^m(w) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad (87)$$

و لتحديد الثابت C_{lm} و الذي يعتمد على الأعداد الكمية m و l نستخدم شرط التنظيم لدالة الموجية الزاوية $Y_{lm}(\theta, \phi)$

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta, \phi) \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta \left(\frac{C_{lm}}{\sqrt{2\pi}} \right)^2 e^{im\phi} e^{-im\phi} |P_l^m(w)|^2 = 1, \end{aligned} \quad (88)$$

بحيث يعطى:

$$\int_0^\pi \sin \theta P_l^m(w) P_l^m(w) d\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{l'w}. \quad (89)$$

بالتعويض في التكامل أعلاه نجد :

$$2\pi \frac{C_{lm}^2}{2\pi} \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{l'w} = 1, \quad (90)$$

$$C_{lm} = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2} \right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}. \quad (91)$$

بحيث $m \geq 0$

بالتعويض في عبارة الدالة الموجية $\Theta_{lm}(\theta)$:

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2} \right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(w). \quad (92)$$

وبتعويض العبارة (91) في العبارة (87) نجد:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2}\right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(w) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

$$= (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(w) e^{im\phi}. \quad (93)$$

2.3.I حل الجزء القطري

نضرب المعادلة (49) في $-\frac{\hbar^2}{2m_e}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) - \frac{KZe^2}{r} \right] R(r) = ER(r), \quad (94)$$

بحيث :

$$V_{eff} = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) - \frac{KZe^2}{r}. \quad (95)$$

و يسمى بالجهد الفعال.

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V_{eff}] R(r) = 0. \quad (96)$$

بتغيير الدالة $R(r)$:

$$R(r) = \frac{X(r)}{r}, \quad (97)$$

نعوض في المعادلة (96):

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \left(\frac{X(r)}{r} \right) \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V_{eff}] \frac{X(r)}{r} \\
 = & \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \left(\frac{1}{r} \frac{dX(r)}{dr} - \frac{1}{r^2} X(r) \right) \right] + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V_{eff}] \frac{X(r)}{r} \\
 = & \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dX(r)}{dr} - X(r) \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V_{eff}] \frac{X(r)}{r} \\
 = & \frac{1}{r^2} \left(\frac{dX(r)}{dr} + r \frac{d^2X(r)}{dr^2} - \frac{dX(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V_{eff}] \frac{X(r)}{r} \\
 = & \frac{1}{r} \frac{d^2X(r)}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V_{eff}] \frac{X(r)}{r}, \tag{98}
 \end{aligned}$$

نضرب هذه المعادلة في r :

$$\frac{d^2X(r)}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V_{eff}] X(r) = 0. \tag{99}$$

و هي معادلة شرودينغر الموجية للإلكترون كتلته m_e يتحرك تحت تأثير جهد فعال V_{eff} و بتعويض عبارته في المعادلة (99) نجد:

$$\frac{d^2X(r)}{dr^2} + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} E + \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{KZe^2}{r} - \frac{\lambda}{r^2} \right] X(r) = 0, \tag{100}$$

بوضع $A = -\frac{2m_e E}{\hbar^2}$, $B = \frac{2m_e KZe^2}{\hbar^2}$, $\lambda = l(l+1)$ بإدخال هذه الثوابت نجد:

$$\frac{d^2X(r)}{dr^2} - \left(A - \frac{B}{r} + \frac{\lambda}{r^2} \right) X(r) = 0. \tag{101}$$

لإيجاد حلول هذه المعادلة نتبع الخطوات التالية:

نبحث عن السلوك المقارب ل $X(r)$ لما $r \rightarrow \infty$ و منه نحمل الحدين $\frac{B}{r}$ و $\frac{\lambda}{r^2}$ ، و بالتالي تؤول المعادلة (101):

$$\frac{d^2X(r)}{dr^2} - AX(r) = 0, \tag{102}$$

وحلها يكون من الشكل الجيبي:

$$X(r) = \alpha e^{+r\sqrt{A}} + \beta e^{-r\sqrt{A}}, \quad (103)$$

نأخذ الحل السالب، لأنه عند أخذ الحل الموجب تؤول الدالة الموجية إلى المالاخاية (تتباعد)، و هذا غير مقبول فيزيائيا، و منه نكتب:

$$X(r) = \beta e^{-r\sqrt{A}}. \quad (104)$$

نبحث عن السلوك المقارب ل $X(r)$ لما $r \rightarrow 0$ و منه نجد:

$$r^2 \frac{d^2 X(r)}{dr^2} - \lambda X(r) = 0, \quad (105)$$

و حلها يعطى بالعارة التالية :

$$X(r) = r^s \quad (106)$$

بالإشتقاق و التعويض في المعادلة (105):

$$s(s-1)r^{s-2} - \lambda r^{s-2} = 0, \quad (107)$$

$$s(s-1) = \lambda = l(l+1). \quad (108)$$

و منه فالقيم الممكنة هي : $s = (l+1), -l$ و من أجل تحقق شرط محدودية الدالة الموجية نأخذ الحل $s = (l+1)$ ، لأنه عند الحل $s = -l$ تؤول الدالة الموجية إلى المالاخاية و هذا غير مقبول، و منه نكتب الحل كمايلي:

$$X(r) = r^{l+1}. \quad (109)$$

نكتب الصيغة الكلية للحل بالشكل:

$$X(r) = r^{l+1} e^{-r\sqrt{A}} U(r). \quad (110)$$

بحيث $U(r)$ دالة متغيرة بالنسبة r .

ياشتقاق العبارة (110) و التعويض في المعادلة التفاضلية (101) نجد:

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + 2\sqrt{A} \left(\frac{l+1}{r\sqrt{A}} - 1 \right) \frac{dU(r)}{dr} + \frac{B - 2\sqrt{A}(l+1)}{r} U(r) = 0. \quad (111)$$

بتغيير متغير:

$$2\sqrt{A}r = \rho \implies \frac{d}{dr} = 2\sqrt{A} \frac{d}{d\rho} \implies \frac{d^2}{dr^2} = 4A \frac{d^2}{d\rho^2}, \quad (112)$$

بإدخال هذه المتغيرات نجد:

$$\frac{d^2U(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2(l+1)}{\rho} - 1 \right) \frac{dU(\rho)}{d\rho} - \frac{\left((l+1) - \frac{B}{2\sqrt{A}} \right)}{\rho} U(\rho) = 0. \quad (113)$$

نضع الثوابت التالية $a = (l+1) - \frac{B}{2\sqrt{A}}$, $c = 2(l+1)$ نعيد صياغة هذه المعادلة كمايلي:

$$\frac{d^2U(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{c}{\rho} - 1 \right) \frac{dU(\rho)}{d\rho} - \frac{a}{\rho} U(\rho) = 0. \quad (114)$$

نحصل على حل هذه المعادلة التفاضلية على شكل سلسلة ذات أسس متزايدة تكتب كمايلي:

$$U(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k. \quad (115)$$

نشتقها مرتين بالنسبة ρ

$$\frac{dU(\rho)}{d\rho} = \sum_{k=1}^{\infty} C_k k \rho^{k-1}, \quad (116)$$

$$\frac{d^2U(\rho)}{d\rho^2} = \sum_{k=2}^{\infty} C_k k(k-1) \rho^{k-2}, \quad (117)$$

بالتعويض قي المعادلة أعلاه نجد:

$$\sum_{k=2}^{\infty} C_k k(k-1)\rho^{k-2} + \left(\frac{c}{\rho} - 1\right) \sum_{k=1}^{\infty} C_k k \rho^{k-1} - \frac{a}{\rho} \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k = 0, \quad (118)$$

و بالتالي نجد:

$$\sum_{k=2}^{\infty} C_k k(k-1)\rho^{k-2} + c \sum_{k=1}^{\infty} C_k k \rho^{k-2} - \sum_{k=1}^{\infty} C_k k \rho^{k-1} - a \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^{k-1} = 0. \quad (119)$$

و هذه بعض معاملات السلسلة:

$$c_1 = c_0 \frac{a}{c}, c_2 = \frac{c_1}{2} \frac{a+1}{c+1}, c_3 = \frac{c_2}{3} \frac{a+2}{c+2} \dots \dots \dots c_m = \frac{c_{m-1}}{m} \frac{a+m-1}{c+m-1}, \quad (120)$$

و منه نكتب:

$$U(\rho) = c_0 \left[1 + \frac{a}{c} \rho + \frac{a}{c} \frac{a+1}{c+1} \frac{\rho^2}{2} + \frac{a}{c} \frac{a+1}{c+1} \frac{a+2}{c+2} \frac{\rho^3}{2 \times 3} \dots + \frac{(a+m-1)! \rho^m}{(c+m-1)! m!} \right]. \quad (121)$$

و منه فإن هذه السلسلة تؤول إلى الملائحية ، ولأن الدالة يجب أن تكون معرفة (محدودة) من الضروري التوقف عند m_{max} ، و بالتالي نحصل على المعادلة التالية:

$$a + m_{max} = 0 \implies l + 1 - \frac{B}{2\sqrt{A}} + m_{max} = 0, \quad (122)$$

$$2\sqrt{A}(m_{max} + l + 1) = B, \quad (123)$$

بتعويض الثوابت نجد:

$$2\sqrt{-\frac{2m_e E}{\hbar^2}} (m_{max} + l + 1) = \frac{2m_e K Z e^2}{\hbar^2}, \quad (124)$$

بتربيع الطرفين نحصل:

$$-\frac{8m_e E}{\hbar^2} (m_{max} + l + 1)^2 = \frac{4m_e^2 K^2 Z^2 e^4}{\hbar^4}, \quad (125)$$

$$\Rightarrow E = -\frac{m_e K^2 Z^2 e^4}{2\hbar(m_{max} + l + 1)^2} = -\frac{m_e}{2(m_{max} + l + 1)^2} \left(\frac{KZe^2}{\hbar} \right)^2,$$

بوضع $n = m_{max} + l + 1$ نجد:

$$E_n = -\frac{m_e}{2n^2} \left(\frac{KZe^2}{\hbar} \right)^2. \quad (126)$$

و منه عبارة الطاقة المكتمة لذرة الهيدروجين $Z = 1$ كمايلي:

$$E_n = -\frac{Ke^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}. \quad (127)$$

و بهذا نكون قد وجدنا قيمة الطاقة لذرة الهيدروجين و التي تعطي كل السلاسل الطيفية له، بحيث أن قيم الطاقة تعتمد على العدد n ، و لاتعتمد على قيم m ، l ، هذا يعني أن هناك العديد من الحالات الكمية المميزة و المنفصلة و التي تكون لها نفس قيمة الطاقة E ، و بالتالي نقول أن مستويات الطاقة متوالدة و رتبة توالدها مساوية إلى عدد الحالات المنفصلة، أي عدد التوافقيات الممكنة و التي يمكن أن نشكلها مع مختلف قيم l و m .

بمطابقة المعادلة (114) المتحصل عليها مع معادلة كثير حدود *Laguerre* المعمم التالية:

$$r \frac{d^2 L_k^N(r)}{dr^2} + (N + 1 - r) \frac{dL_k^N(r)}{dr} - (k - N)L_k^N(r) = 0. \quad (128)$$

نجد أن الدالة $U(\rho)$ هي كثير حدود *Laguerre* المعمم L_{n+l}^{2l+1} ، بتعويض الثوابت و التبسيط نجد:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Z}{na_0} r \right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Z}{na_0} r \right), \quad (129)$$

و لتحديد الثابت N_{nl} نستعمل شرط التنظيم لدالة القطرية $R_{nl}(r)$:

$$\int_0^\infty R_{nl}(r) R_{nl}^*(r) r^2 dr = 1, \quad (130)$$

و بإدخال المتغير ρ نجد:

$$\int_0^\infty (\rho^{2l}) e^{-\rho} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}. \quad (131)$$

بحيث $\rho = \frac{2Z}{na_0}r$ و منه فقيمة ثابت التنظيم هي:

$$N_{nl} = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}. \quad (132)$$

نكتب الدالة القطرية كما يلي:

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2Z}{na_0}r\right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Z}{na_0}r\right). \quad (133)$$

بتعويض $Z = 1$ تكون الدالة القطرية لذرة الهيدروجين كما يلي:

$$R(r)_{nl} = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2}{na_0}r\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2}{na_0}r\right). \quad (134)$$

4.I الدراسة الغير نسبية لذرة الهيدروجين بإدخال حركة النواة

لقد إعتبرنا في دراستنا السابقة أن ذرة الهيدروجين عبارة عن نظام وحيد الجسيم، و ذلك لأن الإلكترون يتحرك حول مركز مقاعلة مثبت، أي أهملنا حركة النواة (البرتون) لأن كتلتها أكبر بكثير من كتلة الإلكترون، و في هذه الحالة سندرس ذرة الهيدروجين بأخذ حركة النواة بالحسبان إذ أنها لم تعد مجرد مركز للقوي يتحرك حوله الإلكترون بل سنعتبره عنصرا في نظام حركي من جسيمين.

و كما نعلم تتكون ذرة الهيدروجين من جسيمين إلكترون و برتون إحداثياتها على التوالي $\vec{r}_e(x_e, y_e, z_e), \vec{r}_p(x_p, y_p, z_p)$ يتحركان تحت تأثير طاقة وضع تتعلق فقط بالمسافة بينهما، و منه نكتب مؤثر الهاملتون لهذا النظام \hat{H} كما يلي [5][6]:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 + V(r). \quad (135)$$

و منه نكتب معادلة شرودينغر لذرة الهيدروجين في الحالة المستقرة كما يلي:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 + V(r)\right) \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p) = E\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p). \quad (136)$$

بحيث:

- كتلة البرتون m_p
- كتلة الإلكترون m_e
- الطاقة الكلية لنظام E
- الدالة الموجية $\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p)$
- لابلاسيان البرتون ∇_p
- لابلاسيان الإلكترون ∇_e

$$\nabla_p^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_p^2}. \quad (137)$$

$$\nabla_e^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2}. \quad (138)$$

$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$ يمثل المسافة الشعاعية بين الإلكترون و بروتون (النواة) [3][7].

5.I إحداثيات مركز الكتلة

نتيجة لوجود تفاعل متبادل بين بروتون (النواة) و الإلكترون يتحرك النظام ككل بحرية، و لهذا يمكننا أن نختصر حركة النظام $(e-p)$ إلى الحركة الحرة للكتلة الكلية للنظام، و الممركزة عند مركز الكتلة، بالإضافة إلى الحركة النسبية المكافئة لحركة الجسيم بكتلة مختزلة [5][7].

بوضع المتغيرات التالية :

$$M = m_e + m_p \text{ هي الكتلة الإجمالية للنظام } (e-p).$$

$$\vec{R} = X\vec{i} + Y\vec{j} + Z\vec{k} \text{ إحداثيات مركز الكتلة .}$$

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \text{ الإحداثيات النسبية .}$$

بحيث:

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_e + m_p \vec{r}_p}{m_e + m_p}. \quad (139)$$

$$\nabla_R^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}. \quad (140)$$

$$\nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (141)$$

و منه نكتب:

$$\frac{1}{m_e} \nabla_e^2 + \frac{1}{m_p} \nabla_p^2 = \frac{1}{M} \nabla_R^2 + \frac{1}{\mu} \nabla_r^2. \quad (142)$$

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}. \quad (143)$$

و هي تمثل الكتلة المختزلة.
و بوضع:

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p) = \psi(\vec{R}, \vec{r}), \quad (144)$$

بإدخال المتغيرات السابقة تؤول معادلة شرودينغر (136) إلى:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right) \psi(\vec{R}, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}, \vec{r}), \quad (145)$$

ما بين الأقواس في الحد الأيسر لا يوجد حد يعتمد على R و r معا، و بالتالي نستطيع فصل الدالة الموجية $\psi(\vec{R}, \vec{r})$ إلى دالتين فرعيتين:

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \psi_1(\vec{R}) \psi_2(\vec{r}), \quad (146)$$

$\psi_1(\vec{R})$ الدالة الموجية التي تصف الحركة الحرة لمركز الكتلة.

$\psi_2(\vec{r})$ الدالة الموجية التي تصف الحركة النسبية.

بالتعويض نحد:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right) \psi_1(\vec{R}) \psi_2(\vec{r}) = E \psi_1(\vec{R}) \psi_2(\vec{r}). \quad (147)$$

بفك الأقواس:

$$-\psi_2(\vec{r}) \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi_1(\vec{R}) - \psi_1(\vec{R}) \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi_2(\vec{r}) + V(r) \psi_1(\vec{R}) \psi_2(\vec{r}) = E \psi_1(\vec{R}) \psi_2(\vec{r}), \quad (148)$$

بالقسمة على $\psi_1(\vec{R})\psi_2(\vec{r})$ و ترتيب المعادلة نجد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\psi_1(\vec{R})} \nabla_{\vec{R}}^2 \psi_1(\vec{R}) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\psi_2(\vec{r})} \nabla_{\vec{r}}^2 \psi_2(\vec{r}) + V(r) \right] = E. \quad (149)$$

و بما أن القوس الأول يعتمد فقط على المتغير R ، و القوس الثاني يعتمد فقط على r نكتب:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\psi_1(\vec{R})} \nabla_{\vec{R}}^2 \psi_1(\vec{R}) = E_R \quad (150)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\psi_2(\vec{r})} \nabla_{\vec{r}}^2 \psi_2(\vec{r}) + V(r) = E_r. \quad (151)$$

بحيث:

$$E = E_r + E_R. \quad (152)$$

المعادلة (150) تمثل معادلة القيم المميزة لطاقة جسيم كتلته M يتحرك بحرية، بحيث يعطى حل هذه المعادلة على موجة مستوية (حل جيبي):

$$\psi_1(\vec{R}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}. \quad (153)$$

\vec{k} هو شعاع الموجة الذي يتعلق بمركز الكتلة، بحيث تعطى:

$$E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \quad (154)$$

و المعادلة (151) و التي تمثل معادلة القيم المميزة لطاقة و الخاصة بالحركة النسبية، بحيث أن الاختلاف بين المعادلة التي تصف ذرة الهيدروجين (حالة النواة ساكنة) يكمن في إستبدال كتلة الإلكترون m_e بالكتلة المختزلة و بالتالي نستطيع كتابة [6].

$$E_n = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{ke^2}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}. \quad (155)$$

و في الأخير رغم النجاح الذي حققه نموذج بور الشبه كلاسيكي و من ثم نموذج شرودينغر الكمي في الحصول على مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين و الذرات الشبيهة بها و ذلك في ظل دراسة كمية غير نسبية إلا أن هناك نقائص لم تطرق لها هاتين النظرتين، و لقد أدت إلى ظهور مايعرف بالبنية الدقيقة

لذرة و التي من ضمنها التصحيحات التي أضيفت لبنية الذرة و التي نذكر منها التصحيح النسبوي، تصحيح سبين مدار، تصحيح داروين، و كذلك الذرات المتعددة الإلكترونات و التي تحتوي في مدارها الخارجي أكثر من إلكترون هنا تكون الدراسة تقريبية (علم الأطياف)، لهذا سنعرض في الفصل الموالي تعديل لمعادلة شرودينغر للتعويض مع مبادئ النسبية الخاصة، و هي معادلة نسبية صاغها العالم ديراك في سنة 1928م و التي تختص بدراسة الإلكترون و مضاده البزيترون.

المعالجة النسبية لذرة الهيدروجين

1.II مدخل

رغم النجاح الذي حققته معادلة شرودينغر في دراسة حركة الجسيمات الميكروسكوبية و التي سرعتها أقل بكثير من سرعة الضوء ، إلا أن هذه المعادلة تتغير عندما نطبق عليها تحويلات النظرية النسبية (تحويلات لورنتز) لأنها تحوي المشتقة الأولى بالنسبة لزمان و المشتقة الثانية بالنسبة للموضع، و بالتالي لا يوجد تجانس بين الزمان و الموضع، فكانت أول محاولة لإيجاد نسخة نسبية للمعادلة الموجية لشرودينغر مع العالم كلين غوردن و الذي قام بتربيع عبارة الطاقة النسبية لتخلص من الجذر التربيعي بحيث جعل كل من مشتقة الزمان و مشتقة الموضع من الدرجة الثانية و بهذا توصل إلى معادلته النسبية و التي تصف الجسيمات ذات السبين صفر، و بمجرد وضعه لرتبة الإشتقاق من الدرجة الثانية بالنسبة للموضع و الزمان واجهت العالم كلين غوردن مشاكل منها ظهور الطاقات السالبة و هذا مادفع بالعالم ديراك سنة 1928م لإيجاد نسخة نسبية جديدة بإقتراح طريقة أخرى لتخلص من الجذر التربيعي، و بهذا إستطاع إكتشاف معادلة موجية نسبية للإلكترون ذو السبين نصف، بحيث سنستهل بداية هذا الفصل بالتعرف على هذه المعادلة ثم نطبقها على ذرة الهيدروجين [6].

2.II معادلة ديراك

لتعرف أكثر على معادلة ديراك نتبع التسلسل الزمني لها، ففي سنة 1928م قام العالم ديراك بالبحث عن نسخة نسبية لشكل المتغاير لمعادلة شرودينغر و التي تكتب كما يلي [8]:

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi. \quad (1)$$

بالتكميم أي بإرفاق كل ملحوظ بمؤثر :

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \hat{p} = -i\hbar \nabla, \quad (2)$$

بالتعويض نجد :

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (3)$$

و هي معادلة القيم الذاتية التي رأيناها في الفصل الأول.
بحيث تعطى عبارة الطاقة النسبية لأنشتاين و التي تربط بين الطاقة E ، كمية الحركة p و الكتلة m و هي علاقة أساسية في الميكانيك الكمية النسبية:

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4. \quad (4)$$

و لتكون الدراسة واضحة سنبدأ بحالة الجسيم الحر أي $V(r) = 0$ ، و منه نكتب مؤثر الهاملتون لطاقة كمايلي:

$$\hat{H} = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}. \quad (5)$$

بالتعويض في العبارة (1):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = (\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4})\psi, \quad (6)$$

و منه نجد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = mc^2 \left(1 + \frac{p^2}{2m^2c^2} - \frac{p^4}{8m^4c^4} + \dots \right) \psi. \quad (7)$$

إن هذه المعادلة التي تحصلنا عليها لاتفيدنا و غير مرغوب فيها إذ أنها تعامل كل من الزمن و الموضع بشكل غير متشابه، و أيضا الجذر التربيعي يتم توسيعه إلى سلسلة، و ما نريده هو معادلة من نفس درجة الإشتقاق بالنسبة لزمنا و الموضع، لهذا قام العالم كلين غوردن بالتأثير مرة أخرى بالهاملتون على معادلة شرودينغر [9]:

$$\hat{H}\hat{H}\phi = \hat{H}^2\phi = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi \quad (8)$$

في هذه الحالة إستبدلنا الدالة الموجية ψ ب ϕ بالنسبة لمعادلة كلين غوردن:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi = (p^2c^2 + m^2c^4)\phi, \quad (9)$$

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\right)\phi = 0. \quad (10)$$

وهي معادلة كلين غوردن و هي معادلة من الدرجة الثانية لزمنا و الموضع، و الهاملتون فيها مربع، لهذا إعتقد ديراك أن هذا التربيع هو سبب ظهور الطاقات السالبة و بالتالي كثافة الإحتمال سالبة، لهذا إقترح ديراك طريقة أخرى لتخلص من الجذر التربيعي و ذلك بإنشاء معادلة من الرتبة الأولى لزمنا و الموضع، بحيث و ضع [9][10]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(\frac{\hbar c}{i}\sum_i\alpha_i\partial_i + \beta mc^2\right)\psi. \quad (11)$$

لمعرفة طبيعة المقادير α_i و β أعداد، مصفوفات ...، و التي يجب أن تكون هرميتية أي تحقق المعادلة التالية:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\hbar c}{i}\sum_i\alpha_i\partial_i + \beta mc^2\right)\psi = \left(\frac{\hbar c}{i}\sum_i\alpha_i\partial_i + \beta mc^2\right)\left(\frac{\hbar c}{i}\sum_j\alpha_j\partial_j + \beta mc^2\right)\psi \quad (12)$$

$$= \frac{\hbar c}{i}\sum_j\alpha_j\partial_j\left(\frac{\hbar c}{i}\sum_i\alpha_i\partial_i + \beta mc^2\right) + \beta mc^2\left(\frac{\hbar c}{i}\sum_i\alpha_i\partial_i + \beta mc^2\right) \quad (13)$$

$$= -\hbar^2c^2\sum_{i,j}\frac{\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i}{2}\partial_i\partial_j\psi + \frac{\hbar mc^2}{i}\sum_i(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i)\partial_i\psi + \beta^2m^2c^4. \quad (14)$$

لتتحقق هذه المعادلة يجب تحقق الشروط التالية:

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1. \quad (15)$$

$$\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0. \quad (16)$$

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}. \quad (17)$$

و بهذا نستنتج أن هذه المقادير هي مصفوفات و تتميز بالخصائص التالية:

- هذه المصفوفات هرميتية لكي يكون الهاملتون هرميتي $\alpha^+ = \alpha$ و $\beta^+ = \beta$.
- قيمتها الذاتية ± 1 من العبارة (15):

$$\alpha_i^2 = 1, \quad (18)$$

$$\alpha_i\psi = \lambda\psi, \quad (19)$$

$$\alpha_i^2\psi = \lambda^2\psi \implies 1\psi = \lambda^2\psi \implies \lambda = \pm 1, \quad (20)$$

$$\beta^2\psi = \lambda^2\psi \implies \lambda = \pm 1. \quad (21)$$

- هذه المصفوفات عديمة الأثر و الذي يعطى :

$$tr(\beta) = 0. \quad (22)$$

$$tr(\alpha_i) = 0. \quad (23)$$

- بعدها عدد زوجي و تكون ضد متبادلة .

و المصفوفات التي تحقق الشروط و الخصائص السابقة تعطى كما يلي:
بحيث :

$$\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (24)$$

$\hat{\sigma}_i$ مصفوفات باولي

بحيث:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (25)$$

I مصفوفات الوحدة

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

و منه نكتب هاملتون ديراك في هذه الحالة:

$$\hat{H} = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}mc^2. \quad (27)$$

و بالتالي تعطى معادلة ديراك في الحالة الحرة:

$$\hat{H}\psi = (c\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}mc^2)\psi. \quad (28)$$

3.II معادلة ديراك لذرة الهيدروجين

في هذا الفصل سوف نتطرق الى طريقة حل معادلة ديراك في حالة كمون كولوم (مركزي) لجسيم نسبي يملك سبين نصف (الإلكترون) كتلته m_e و التي تصف أيضا الجسيم المضاد (البوزيترون)، ولتوضوح الصورة أكثر سوف نقسم هذا الفصل إلى جزئين رئيسيين هما على التوالي:

1.3.II فصل المتغيرات في معادلة ديراك في حالة وجود كمون مركزي.

نكتب هاملتون ديراك في حالة وجود كمون كروي متناظر كما يلي:

$$\hat{H}_D = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}m_e c^2 + V(r). \quad (29)$$

كما هو معلوم ان مؤثر العزم الكلي \hat{J} ومؤثر إنعكاس الفضاء \hat{P} تتبادل مع مؤثر الطاقة \hat{H}_D مما يوحي أن هناك دوال مشتركة بين المؤثرات التالية:

$$\hat{P}, \hat{J}^2, \hat{J}_z. \quad (30)$$

من الممكن التأكد من صحة ما قدم من خلال حساب المبدلات التالية:

$$[\hat{P}, \hat{H}_D] = [\hat{J}_i, \hat{H}_D] = [\hat{J}^2, \hat{H}_D] = 0, i = 1,2,3. \quad (31)$$

كما يمكن إستخراج مؤثر إنعكاس الفضاء بالمصفوفة التالية:

$$\hat{P} = e^{i\varphi} \hat{B}(x \rightarrow -x) = e^{i\varphi} \gamma^0 \hat{P}_0. \quad (32)$$

بحيث تعطى دالة الموجة على شكل سبينور كمايلي :

$$\psi_{jm} = \begin{pmatrix} \varphi_{jlm}(x, t) \\ \chi_{jl'm}(x, t) \end{pmatrix} \quad (33)$$

بحيث φ_{jlm} و $\chi_{jl'm}$ هما سبينور كل واحد منهم يتكون من مركبتين نستطيع تحديدهم، لدينا :

$$\hat{P}\psi_{jm} = \lambda \begin{pmatrix} \varphi_{jlm}(x, t) \\ \chi_{jl'm}(x, t) \end{pmatrix} \quad (34)$$

و منه نكتب معادلة ديراك في حالة كمون كروي :

$$\hat{H}\psi = (c\hat{\alpha}.\hat{p} + \hat{\beta}m_e c^2 + V(r))\psi. \quad (35)$$

بتعويض المصفوفات (24) :

$$\left[c \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \hat{p} + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} m_e c^2 + V \right] \begin{pmatrix} \varphi_{jlm} \\ \chi_{jl'm} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_{jlm} \\ \chi_{jl'm} \end{pmatrix} \quad (36)$$

$$\left[c \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}.\hat{p} \\ \hat{\sigma}.\hat{p} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_e c^2 & 0 \\ 0 & -m_e c^2 \end{pmatrix} + V \right] \begin{pmatrix} \varphi_{jlm} \\ \chi_{jl'm} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_{jlm} \\ \chi_{jl'm} \end{pmatrix} \quad (37)$$

ومنه نجد:

$$c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})\chi_{jl'm} + m_e c^2 \varphi_{jlm} + V \varphi_{jlm} = E \varphi_{jlm}, \quad (38)$$

$$c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})\varphi_{jlm} - m_e c^2 \chi_{jl'm} + V \chi_{jl'm} = E \chi_{jl'm}, \quad (39)$$

بالتبسيط نجد:

$$(E - m_e c^2 - V)\varphi_{jlm} = c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})\chi_{jl'm}. \quad (40)$$

$$(E + m_e c^2 - V)\chi_{jl'm} = c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})\varphi_{jlm}. \quad (41)$$

نعرف الدالة الذاتية لكل من مؤثر العزم الكلي \vec{J} و \hat{P} و التي هي عبارة عن سبينورات ذات بعدين كما يلي:

$$\Omega_{jlm} = \sum_{m', m_s} (l \frac{1}{2} j | m' m_m m) Y_{lm'} \chi_{\frac{1}{2} m_s}. \quad (42)$$

بحيث السبينور $\chi_{\frac{1}{2} m_s}$ هي الدالة الذاتية لمؤثر السبين.

بحيث نعرف:

$$\chi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (43)$$

بحيث:

$$\hat{P}_0 \varphi_{jlm} = (-1)^l \varphi_{jlm}. \quad (44)$$

من جهة أخرى نعرف:

$$\varphi_{jlm} = ig(r) \Omega_{jlm} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ r \end{pmatrix}. \quad (45)$$

$$\chi_{jl'm} = -f(r) \Omega_{jl'm} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ r \end{pmatrix}. \quad (46)$$

لنحسب :

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{p} \varphi_{jlm} = \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \left[ig(r) \Omega_{jlm} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ r \end{pmatrix} \right] = (\hat{\sigma} \cdot \hat{p} ig(r)) \Omega_{jlm} + ig(r) \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \Omega_{jlm}$$

$$= \hbar \frac{dg(r)}{dr} \left(\hat{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \Omega_{jlm} + ig(r) \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \Omega_{jlm} \quad (47)$$

بحيث أن Ω_{jlm} هي دوال ذاتية مشتركة للمؤثرات \hat{L}^2 , \hat{J}^2 و $\hat{S}^2 = \left(\frac{1}{2} \sigma \right)^2$ ، والقيم الذاتية لكل منها على التوالي $j(j+1)\hbar^2$, $l(l+1)\hbar^2$, $\frac{3}{4}\hbar^2$ ، والتي هي عبارة عن سبينورات ذات بعدين والتي تعطى من أجل $j = l + \frac{1}{2}$ ،
 $:j = l - \frac{1}{2}$ ،

$$\Omega_{l+\frac{1}{2},l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2j}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j-m}{2j}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \Omega_{l-\frac{1}{2},l,m} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (48)$$

المعاملات الجذرية في العبارات (48) تسمى بمعاملات كليش غوردن. لتكن العلاقة بين السبينورات الكروية كما يلي:

$$\left(\hat{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \Omega_{jlm} = -\Omega_{jl'm}. \quad (49)$$

$$-(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \Omega_{jlm} = (\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \left(\hat{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \Omega_{jl'm}. \quad (50)$$

من خلال العلاقة التالية:

$$(\hat{\sigma} \cdot A)(\hat{\sigma} \cdot B) = A \cdot B + i \hat{\sigma} \cdot (A \times B). \quad (51)$$

نطبق العبارة (51) على العبارة (50)

$$-(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \Omega_{jlm} = \left(\hat{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} + i \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{p} \times \frac{\vec{r}}{r} \right) \right) \Omega_{jl'm}, \quad (52)$$

وبما أن

$$\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p}, \quad (53)$$

بالتعويض نجد:

$$\left(\hat{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} + i \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{p} \times \frac{\vec{r}}{r} \right) \right) \frac{1}{r} \Omega_{jl'm} = \left(-i \hbar (\nabla \cdot \vec{r}) - i \hbar \vec{r} \cdot \nabla - i \hat{\sigma} \cdot (\vec{r} \times \hat{p}) \right) \frac{1}{r} \Omega_{jl'm}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(-i\hbar \frac{3}{r} - i\hbar r \left(-\frac{1}{r^2} \right) - i \frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{L}}{r} \right) \Omega_{j'l'm} \\
 &= -i \left(2\hbar + \hat{L} \cdot \hat{\sigma} \right) \frac{1}{r} \Omega_{j'l'm}, \tag{54}
 \end{aligned}$$

بتعويض العبارة (54) في العبارة (52) نحصل:

$$-(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \Omega_{jlm} = i \left(2\hbar + \hat{L} \cdot \hat{\sigma} \right) \frac{1}{r} \Omega_{j'l'm}, \tag{55}$$

وكما نعلم:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}, \tag{56}$$

$$\hat{J}^2 = \left(\hat{L} + \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \right)^2 = \hat{L}^2 + \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \right)^2 + \hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L}, \tag{57}$$

من العبارة (57) نجد:

$$\begin{aligned}
 \hbar \hat{L} \cdot \hat{\sigma} \Omega_{j'l'm} &= \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \right)^2 \right) \Omega_{j'l'm} \\
 &= \left(j(j+1) - l'(l'+1) - \frac{3}{4} \right) \hbar^2 \Omega_{j,l',m}, \tag{58}
 \end{aligned}$$

$$\implies \hat{L} \cdot \hat{\sigma} \Omega_{j'l'm} = \left(j(j+1) - l'(l'+1) - \frac{3}{4} \right) \hbar \Omega_{j'l'm}. \tag{59}$$

نعرف عدد كم جديد و ليكن k بحيث :

$$k = \mp \left(j + \frac{1}{2} \right), \tag{60}$$

$$|k| = j + \frac{1}{2} \implies j = |k| - \frac{1}{2}. \tag{61}$$

بأخذ $l' = 2j - l$ ، وتعويض $j = l + \frac{1}{2}$ والحساب نجد:

$$j(j+1) - l'(l'+1) - \frac{3}{4} = k - 1, \quad (62)$$

وفي حالة $j = l - \frac{1}{2}$ نجد نفس النتيجة :

$$j(j+1) - l'(l'+1) - \frac{3}{4} = k - 1, \quad (63)$$

بالربط بين العبارات (62) و (63) نجد (59):

$$\hat{L} \cdot \hat{\sigma} = (k - 1)\hbar, \quad (64)$$

نضيف إلى الطرفين $2\hbar$

$$2\hbar + \hat{L} \cdot \hat{\sigma} = (k - 1)\hbar + 2\hbar = (1 + k)\hbar, \quad (65)$$

$$\implies (2\hbar + \hat{L} \cdot \hat{\sigma})\Omega_{jl'm} = (1 + k)\hbar\Omega_{jl'm}. \quad (66)$$

بتعويض العبارة (66) في (55) نجد:

$$-(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})\Omega_{jlm} = \frac{1+k}{r}\hbar\Omega_{jl'm}. \quad (67)$$

ونكتب أيضا :

$$(2\hbar + \hat{L} \cdot \hat{\sigma})\Omega_{jlm} = (1 - k)\hbar\Omega_{jlm}. \quad (68)$$

ومنه نكتب:

$$\chi_{k,m} = \Omega_{jlm}. \quad (69)$$

$$\chi_{-k,m} = \Omega_{jl'm}. \quad (70)$$

وبهذا نعرف المؤثر k كمايلي:

$$\hat{k} = \hbar + \hat{\sigma} \hat{L}. \quad (71)$$

وتكتب معادلة القيم الذاتية له كما يلي:

$$\hat{k}\chi_{k,m} = -\hbar k\chi_{k,m}. \quad (72)$$

$$\hat{k}\chi_{-k,m} = \hbar k\chi_{-k,m}. \quad (73)$$

وبالتالي نعيد صياغة السبينور الكروي كما يلي :

$$\psi_{jm} = \begin{pmatrix} \varphi_{jlm} \\ \chi_{j'l'm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ig(r)\Omega_{jlm} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ r \end{pmatrix} \\ -f(r)\Omega_{j'l'm} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ r \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ig(r)\chi_{k,m} \\ -f(r)\chi_{-k,m} \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} g(r)\chi_{k,m} \\ if(r)\chi_{-k,m} \end{pmatrix} \quad (74)$$

بتعويض العبارتين (49) و (67) في العبارة (47) نحصل :

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \varphi_{jlm} &= -\hbar \frac{dg(r)}{dr} \Omega_{j'l'm} - \frac{k+1}{r} \hbar g(r) \Omega_{j'l'm} \\ &= -\Omega_{j'l'm} \left(\hbar \frac{dg(r)}{dr} + \frac{k+1}{r} \hbar g(r) \right). \end{aligned} \quad (75)$$

يأتباع نفس طريقة الحساب نجد :

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{p} \chi_{j'l'm} = -i \Omega_{jlm} \left(\hbar \frac{df(r)}{dr} - \frac{k-1}{r} \hbar f(r) \right). \quad (76)$$

بتعويض العبارتين (46) و (75) في المعادلة (41) نحصل :

$$\hbar c \frac{dg}{dr} + \hbar c(1+k) \frac{g}{r} - (E + m_e c^2 - V) f = 0. \quad (77)$$

وبتعويض العبارتين (45) و (76) في المعادلة (40) نحصل:

$$\hbar c \frac{df}{dr} + \hbar c(1-k) \frac{f}{r} + (E - m_e c^2 - V) g = 0. \quad (78)$$

بوضع $F = rf, G = rg$ والإشتقاق بالنسبة للمتغير r :

$$\frac{dG}{dr} = g + r \frac{dg}{dr}, \quad (79)$$

$$\frac{dF}{dr} = f + r \frac{df}{dr}, \quad (80)$$

نضرب طرفي المعادلة (77) في r نحصل :

$$\hbar c \left(r \frac{dg}{dr} + g + kg \right) - (E + m_e c^2 - V) fr = 0 \quad (81)$$

بالتعويض بعبارة G و F والعبارة (79) في المعادلة (81) نحصل على المعادلة التفاضلية لدالة القطرية G :

$$\hbar c \frac{dG}{dr} + \hbar c \frac{k}{r} G - (E + m_e c^2 - V) F = 0. \quad (82)$$

نضرب طرفي المعادلة (78) في r نحصل :

$$\hbar c \left(r \frac{df}{dr} + f - kf \right) + (E - m_e c^2 - V) gr = 0, \quad (83)$$

بالتعويض بعبارة G و F والعبارة (80) في المعادلة (83) نحصل على المعادلة التفاضلية لدالة القطرية F :

$$\hbar c \frac{dF}{dr} - \hbar c \frac{k}{r} F + (E - m_e c^2 - V) G = 0. \quad (84)$$

2.3.II حل معادلات ديراك القطرية لجسيم في وجود كمون مركزي

من خلال حل معادلات ديراك القطرية لجسيم في وجود كمون كولوم نحدد القيم الذاتية لطاقة و بالتالي الحالات الذاتية، بحيث تعطى طاقة التفاعل الكولومية بين النواة و جسيم مشحون $(-e)$:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (85)$$

بالتعويض في المعادلات التفاضلية القطرية (82) و (84) لديراك و القسمة على $\hbar c$ فنجد:

$$\frac{dG}{dr} + \frac{k}{r} G - \left(\frac{E + m_e c^2}{\hbar c} + \frac{Ze^2}{\hbar cr} \right) F = 0, \quad (86)$$

$$\frac{dF}{dr} - \frac{k}{r} F + \left(\frac{E - m_e c^2}{\hbar c} + \frac{Ze^2}{\hbar cr} \right) G = 0. \quad (87)$$

بتعويض $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ والذي يسمى بثابت البنية الدقيقة.

$$\frac{dG}{dr} = -\frac{k}{r}G + \left(\frac{E + m_e c^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r} \right) F, \quad (88)$$

$$\frac{dF}{dr} = \frac{k}{r}F - \left(\frac{E - m_e c^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r} \right) G. \quad (89)$$

أولاً نحل المعادلات التفاضلية لما $r \sim 0$ أي يكون بالقرب من نقطة الأصل، و بهذا نتجاهل الحدود $\frac{E \pm m_e c^2}{\hbar c}$ و منه تؤول المعادلتين (88) و (89):

$$\frac{dG}{dr} + \frac{k}{r}G - \frac{Z\alpha}{r}F = 0, \quad (90)$$

$$\frac{dF}{dr} - \frac{k}{r}F + \frac{Z\alpha}{r}G = 0. \quad (91)$$

لحل هذه المعادلات نستخدم السلاسل ذات الأسس المتزايدة و ذلك بوضع $G = ar^\gamma$, $F = br^\gamma$ ، نشق بالنسبة للمتغير r :

$$\frac{dG}{dr} = a\gamma r^{\gamma-1}, \quad (92)$$

$$\frac{dF}{dr} = b\gamma r^{\gamma-1}. \quad (93)$$

بالتعويض في المعادلات (90) , (91):

$$a\gamma r^{\gamma-1} + kar^{\gamma-1} - bZ\alpha r^{\gamma-1} = 0, \quad (94)$$

$$b\gamma r^{\gamma-1} - kbr^{\gamma-1} + aZ\alpha r^{\gamma-1} = 0. \quad (95)$$

بالتبسيط نجد:

$$[a(\gamma + k) - bZ\alpha]r^{\gamma-1} = 0, \quad (96)$$

$$[b(\gamma - k) + aZ\alpha]r^{\gamma-1} = 0, \quad (97)$$

$$a(\gamma + k) - bZ\alpha = 0, \quad (98)$$

$$b(\gamma - k) + aZ\alpha = 0. \quad (99)$$

و منه نجد:

$$\gamma^2 = k^2 - (Z\alpha)^2, \implies \gamma = \pm \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}. \quad (100)$$

لكي تكون الدالة الموجية منظمة نختار الحل الموجب ل γ ، أما في حالة الحل السالب يكون الحل $\gamma = -|\gamma|$ نجد العبارة $F^2 + G^2 \sim r^{-2|\gamma|}$ ، و هذا غير مقبول.
لحل المعادلات نقوم بوضع المتغير:

$$\lambda = \frac{(m_2^2 c^4 - E^2)^{\frac{1}{2}}}{\hbar c}. \quad (101)$$

$$\varrho = 2\lambda r, \implies \frac{1}{r} = 2\lambda \frac{1}{\varrho}, \frac{d}{dr} = 2\lambda \frac{d}{d\varrho}. \quad (102)$$

بتعويض عبارة المتغير (102) في المعادلات (88) و (89) :

$$2\lambda \frac{dG(\varrho)}{d\varrho} = -\frac{2\lambda k}{\varrho} G(\varrho) + \left(\frac{E + m_e c^2}{\hbar c} + \frac{2\lambda Z\alpha}{\varrho} \right) F(\varrho), \quad (103)$$

$$2\lambda \frac{dF(\varrho)}{d\varrho} = \frac{2\lambda k}{\varrho} F(\varrho) - \left(\frac{E - m_e c^2}{\hbar c} + \frac{2\lambda Z\alpha}{\varrho} \right) G(\varrho). \quad (104)$$

نقسم على هذه المعادلات على 2λ :

$$\frac{dG(\varrho)}{d\varrho} = -\frac{k}{\varrho} G(\varrho) + \left(\frac{E + m_e c^2}{2\lambda \hbar c} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right) F(\varrho), \quad (105)$$

$$\frac{dF(\varrho)}{d\varrho} = \frac{k}{\varrho} F(\varrho) - \left(\frac{E - m_e c^2}{2\lambda \hbar c} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right) G(\varrho). \quad (106)$$

و من خلال هذه المعادلات التفاضلية ندرس سلوك الدوال $F(\varrho)$, $G(\varrho)$ لما $(\varrho \rightarrow \infty)$ ، و منه نحمل الحدود المضروبة في $\frac{1}{\varrho}$ و بهذا تؤول المعادلات التفاضلية (105) و (106) إلى:

$$\frac{dG(\varrho)}{d\varrho} = \frac{E + m_e c^2}{2\lambda \hbar c} F(\varrho), \quad (107)$$

$$\frac{dF(\varrho)}{d\varrho} = -\frac{(E - m_e c^2)}{2\lambda \hbar c} G(\varrho). \quad (108)$$

نضرب طرفي المعادلة (107) في $\frac{d}{d\rho}$ فنجد:

$$\frac{d^2G(\rho)}{d\rho^2} = \frac{E + m_e c^2}{2\lambda\hbar c} \frac{dF(\rho)}{d\rho} = -\frac{(E + m_e c^2)(E - m_e c^2)}{2\lambda\hbar c} G(\rho), \quad (109)$$

بتعويض عبارة λ (101) بما يساويها و التبسيط نجد:

$$\frac{d^2G(\rho)}{d\rho^2} = -\frac{(E^2 - m_e^2 c^4)}{(2\lambda\hbar c)^2} G(\rho) = \frac{1}{4} G(\rho). \quad (110)$$

و يكون الحل من الشكل $G(\rho) \sim e^{\pm \frac{\rho}{2}}$ ، في هذه الحالة نختار الحل السالب، أما الحل الموجب مرفوض لأن الدالة الموجية تؤول إلى المالا نهاية و هذا غير مقبول، و بإستخدام شرط التنظيم الحلين المحتملين كما يلي:

$$G(\rho) = (m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (\phi_1(\rho) + \phi_2(\rho)), \quad (111)$$

$$F(\rho) = (m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (\phi_1(\rho) - \phi_2(\rho)). \quad (112)$$

بإشتقاق العبارتين (111) و (112) و التعويض على التوالي في المعادلات (105) و (106) نجد:

$$\begin{aligned} & (m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \left[-\frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\rho} + \frac{d\phi_2}{d\rho} \right] \\ &= -\frac{k}{\rho} (m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (\phi_1 + \phi_2) + \left[\frac{E + m_e c^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] (m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (\phi_1 - \phi_2), \quad (113) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \left[-\frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\rho} - \frac{d\phi_2}{d\rho} \right] \\ &= \frac{k}{\rho} (m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (\phi_1 - \phi_2) - \left[\frac{E - m_e c^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] (m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (\phi_1 + \phi_2). \quad (114) \end{aligned}$$

نقسم المعادلتين (113) و (114) على $e^{-\frac{\rho}{2}}$ ، ثم نقسم المعادلة (113) على $(m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}}$ و المعادلة (114) على

فحصل على النتائج التالية:

$$-\frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\rho} + \frac{d\phi_2}{d\rho} = -\frac{k}{\rho}(\phi_1 + \phi_2) + \left[\frac{E + m_e c^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] \frac{(m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}}}{(m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}}} (\phi_1 - \phi_2), \quad (115)$$

$$-\frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\rho} - \frac{d\phi_2}{d\rho} = \frac{k}{\rho}(\phi_1 - \phi_2) - \left[\frac{E - m_e c^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] \frac{(m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}}}{(m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}}} (\phi_1 + \phi_2). \quad (116)$$

لدينا من العبارة (101):

$$\lambda\hbar c = (m_e^2 c^4 - E^2)^{\frac{1}{2}} = [(m_e c^2 - E)(m_e c^2 + E)]^{\frac{1}{2}}, \quad (117)$$

بضرب طرفي هذه المعادلة في $(m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}}$ نجد:

$$\frac{(m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}}}{(m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}}} = \frac{m_e c^2 - E}{\lambda\hbar c}. \quad (118)$$

و في حالة ضرب المعادلة في $(m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}}$

$$\frac{(m_e c^2 + E)^{\frac{1}{2}}}{(m_e c^2 - E)^{\frac{1}{2}}} = \frac{m_e c^2 + E}{\lambda\hbar c}. \quad (119)$$

بتعويض هاتين العبارتين في المعادلتين (115)، (116) على التوالي نجد:

$$-\frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\rho} + \frac{d\phi_2}{d\rho} = -\frac{k}{\rho}(\phi_1 + \phi_2) + \left[\frac{E + m_e c^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] \frac{m_e c^2 - E}{\lambda\hbar c} (\phi_1 - \phi_2), \quad (120)$$

$$-\frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\rho} - \frac{d\phi_2}{d\rho} = \frac{k}{\rho}(\phi_1 - \phi_2) - \left[\frac{E - m_e c^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] \frac{m_e c^2 + E}{\lambda\hbar c} (\phi_1 + \phi_2). \quad (121)$$

بجمع المعادلتين (121)، (120) نجد:

$$-\phi_1 + 2\frac{d\phi_1}{d\rho} = -\frac{2k}{\rho}\phi_2 + \phi_1 + \frac{Z\alpha(m_e c^2 - E)}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 - \phi_2) - \frac{Z\alpha(m_e c^2 + E)}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 + \phi_2), \quad (122)$$

و بطرح المعادلتين (121)، (120) :

$$-\phi_2 + 2\frac{d\phi_2}{d\rho} = -\frac{2k}{\rho}\phi_1 - \phi_2 + \frac{Z\alpha(m_e c^2 - E)}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{Z\alpha(m_e c^2 + E)}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 + \phi_2). \quad (123)$$

نسط المعادلات المتحصل عليها:

$$2\frac{d\phi_1}{d\rho} = -\frac{2k}{\rho}\phi_2 + 2\phi_1 + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 - \phi_2) - \frac{Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 - \phi_2) - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 + \phi_2) - \frac{Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 + \phi_2),$$

$$2\frac{d\phi_1}{d\rho} = -\frac{2k}{\rho}\phi_2 + 2\phi_1 - \frac{2Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}\phi_2 - \frac{2Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}\phi_1$$

$$\Rightarrow \frac{d\phi_1}{d\rho} = \left(1 - \frac{Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}\right)\phi_1 - \left(\frac{k}{\rho} + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}\right)\phi_2, \quad (124)$$

$$2\frac{d\phi_2}{d\rho} = -\frac{2k}{\rho}\phi_1 + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 - \phi_2) - \frac{Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 + \phi_2) + \frac{Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}(\phi_1 + \phi_2),$$

$$2\frac{d\phi_2}{d\rho} = -\frac{2k}{\rho}\phi_1 + \frac{2Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}\phi_1 + \frac{Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}\phi_2$$

$$\Rightarrow \frac{d\phi_2}{d\rho} = \left(-\frac{k}{\rho} + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\rho\lambda\hbar c}\right)\phi_1 + \frac{Z\alpha E}{\rho\lambda\hbar c}\phi_2. \quad (125)$$

للحصول على الحل نضع ϕ_1 و ϕ_2 على شكل سلاسل قوى و التي تصف الحل بالقرب من الصفر أي $\rho \rightarrow 0$:

$$\phi_1 = \rho^\gamma \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m \rho^m, \quad (126)$$

$$\phi_2 = \rho^\gamma \sum_{m=0}^{\infty} \beta_m \rho^m. \quad (127)$$

نشتق بالنسبة ل ρ :

$$\frac{d\phi_1}{d\rho} = \sum_{m=0}^{\infty} (\gamma + m)\alpha_m \rho^{m+\gamma-1}, \quad (128)$$

$$\frac{d\phi_2}{d\rho} = \sum_{m=0}^{\infty} (\gamma + m)\beta_m \rho^{m+\gamma-1}. \quad (129)$$

بالتعويض في المعادلات أعلاه (124) و (125) نجد:

$$\sum_{m=0}^{\infty} (\gamma + m)\alpha_m \rho^{m+\gamma-1} = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m \rho^{m+\gamma} - \frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m \rho^{m+\gamma-1} - \left(k + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda\hbar c}\right) \sum_{m=0}^{\infty} \beta_m \rho^{m+\gamma-1}, \quad (130)$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} (\gamma + m)\beta_m \rho^{m+\gamma-1} = \left(-k + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda\hbar c}\right) \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m \rho^{m+\gamma-1} + \frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c} \sum_{m=0}^{\infty} \beta_m \rho^{m+\gamma-1}. \quad (131)$$

بمقارنة هاتين المعادلتين:

$$\alpha_m(\gamma + m) = \alpha_{m-1} - \frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c} \alpha_m - \left(k + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda\hbar c}\right) \beta_m, \quad (132)$$

$$\beta_m(\gamma + m) = \left(-k + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda\hbar c}\right) \alpha_m + \frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c} \beta_m. \quad (133)$$

من خلال المعادلة (133):

$$(\gamma + m - \frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c})\beta_m = \left(-k + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda\hbar c}\right) \alpha_m, \quad (134)$$

بالتبسيط نجد:

$$\frac{\beta_m}{\alpha_m} = \frac{-k + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda\hbar c}}{\gamma + m - \frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c}} = \frac{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda\hbar c}}{\frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c} - \gamma - m}, \quad (135)$$

بوضع:

$$n' = \frac{Z\alpha E}{\lambda\hbar c} - \gamma. \quad (136)$$

نعيد صياغة العبارة (135) كما يلي:

$$\frac{\beta_m}{\alpha_m} = \frac{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c}}{n' - m}, \quad (137)$$

لما $m = 0$ نجد:

$$\frac{\beta_0}{\alpha_0} = \frac{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c}}{n'} = \frac{k - (n' + \gamma) \frac{m_e c^2}{E}}{n'}. \quad (138)$$

بتعويض نتيجة العبارة (137) في المعادلة (132)

$$\alpha_m \left[\gamma + m + \frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} + \left(k + \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c} \right) \left(\frac{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c}}{n' - m} \right) \right] = \alpha_{m-1},$$

نضرب طرفي هذه المعادلة في $(n' - m)$:

$$\alpha_m \left[\left(\gamma + m + \frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} \right) (n' - m) + \left(k^2 - \left(\frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c} \right)^2 \right) \right] = \alpha_{m-1} (n' - m). \quad (139)$$

لدينا:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} + \gamma + m \right) \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} - \gamma - m \right) = \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} + \gamma + m \right) \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} - (\gamma + m) \right) \\ & = \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} \right)^2 - (\gamma + m)^2 = \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} \right)^2 - (\gamma^2 + m^2 + 2\gamma m) = \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} \right)^2 - \gamma^2 - m^2 - 2\gamma m \\ & = \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} \right)^2 - k^2 + (Z\alpha)^2 - m^2 - 2m\gamma. \end{aligned} \quad (140)$$

بتعويض (140) في المعادلة (139) نجد:

$$\alpha_m \left[k^2 - \left(\frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c} \right)^2 + \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} \right)^2 - k^2 + (Z\alpha)^2 - m^2 - 2m\gamma \right] = \alpha_{m-1}(n' - m), \quad (141)$$

$$\alpha_m \left[-m(2\gamma + m) + (Z\alpha)^2 + \left(\frac{Z\alpha E}{\lambda \hbar c} \right)^2 - \left(\frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c} \right)^2 \right] = \alpha_{m-1}(n' - m). \quad (142)$$

و منه نكتب:

$$\alpha_m = -\frac{(n' - m)}{m(2\gamma + m)} \alpha_{m-1} = \frac{(-1)^m (n' - 1) \dots (n' - m)}{m! (2\gamma + 1) \dots (2\gamma + m)} \alpha_0 = \frac{(1 - n')(2 - n') \dots (m - n')}{m! (2\gamma + 1) \dots (2\gamma + m)} \alpha_0. \quad (143)$$

بالتعويض نجد:

$$\begin{aligned} \beta_m &= \frac{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c}}{n' - m} \frac{(-1)^m (n' - 1) \dots (n' - m)}{m! (2\gamma + 1) \dots (2\gamma + m)} \alpha_0 \\ &= \frac{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c}}{n' - m} \frac{(-1)^m (n' - 1) \dots (n' - m)}{m! (2\gamma + 1) \dots (2\gamma + m)} \frac{n'}{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c}} \beta_0 \\ &= (-1)^m \frac{n' (n' - 1) \dots (n' - m + 1)}{m! (2\gamma + 1) \dots (2\gamma + m)} \beta_0. \end{aligned} \quad (144)$$

$$F(a, c, x) = 1 + \frac{a}{c} x + \frac{a(a+1)x^2}{c(c+1)2!}. \quad (145)$$

و منه نجد:

$$\phi_1 = \alpha_0 \rho^\gamma F(1 - n', 2\gamma + 1; \rho), \quad (146)$$

$$\phi_2 = \beta_0 \varrho^\gamma F(-n', 2\gamma + 1; \varrho) = \frac{k - \frac{Z\alpha m_e c^2}{\lambda \hbar c}}{n'} \alpha_0 \varrho^\gamma F(-n', 2\gamma + 1; \varrho). \quad (147)$$

لكي تبقى الدالة الموجية منظمة يجب أن تكون سلسلة ϕ_1 و ϕ_2 منتهية، و لا يمكن تحقق ذلك إلا إذا كان $n' = 0, 1, 2, \dots$
 لنعرف عدد كم رئيسي :

$$n = n' + |k| = n' + j + \frac{1}{2}, \quad (148)$$

بحيث $n = 1, 2, 3, \dots$
 و من العبارة (136) لدينا:

$$n' + \gamma = \frac{Z\alpha E}{\hbar C \frac{(m_e^2 c^4 - E^2)^{\frac{1}{2}}}{\hbar c}} = \frac{Z\alpha E}{(m_e^2 c^4 - E^2)^{\frac{1}{2}}}, \quad (149)$$

بحيث:

$$n' + \gamma = n - |k| + \gamma = n - j - \frac{1}{2} + \gamma, \quad (150)$$

بتعويض (150) في (149) نجد:

$$\frac{Z\alpha E}{(m_e^2 c^4 - E^2)^{\frac{1}{2}}} = n - j - \frac{1}{2} + \gamma, \quad (151)$$

بالتربيع نجد:

$$\frac{(Z\alpha)^2 E^2}{(m_e^2 c^4 - E^2)} = (n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2,$$

$$[(Z\alpha)^2 + (n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2] E^2 = m_e^2 c^4 (n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2,$$

$$\begin{aligned}
 E^2 &= \frac{m_e^2 c^4 (n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2}{(Z\alpha)^2 + (n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2} \\
 &= \frac{m_e^2 c^4 (n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2}{(n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2 \left(1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2} \right)} \\
 &= \frac{m_e^2 c^4}{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(n - j - \frac{1}{2} + \gamma)^2}}. \tag{152}
 \end{aligned}$$

بجيث:

$$\sqrt{k^2 - (Z\alpha)^2} = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}. \tag{153}$$

بتعويض (153) في (152) نجد:

$$= \pm m_e c^2 \left(1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left[n - j - \frac{1}{2} + \left(\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - (Z\alpha)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \tag{154}$$

بجيث:

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

$$k = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

في هذه الحالة نستبعد الإشارة السالبة لطاقة في العبارة (154)، لأن النواة موجبة أي $(Z\alpha > 0)$.

أما الخطوة الثانية هي إيجاد عبارة الدالة الموجية بجيث نقوم باستخدام شرط التنظيم :

$$\int_0^\infty (f^2 + g^2) r^2 dr = 1 \tag{155}$$

و منه نحصل على الدوال الموجية القطرية كما يلي:

$$\left. \begin{array}{l} g(r) \\ f(r) \end{array} \right\} = \frac{\pm(2\lambda)^{\frac{3}{2}}}{\Gamma(2\gamma + 1)} \times \sqrt{\frac{(mc^2 \pm E)\Gamma(2\gamma + n' + 1)}{4mc^2 \frac{(n' + \gamma)mc^2}{E} \left(\frac{(n' + \gamma)mc^2}{E} - k \right) n'!}} \times (2\lambda r)^{\gamma-1} e^{-\lambda r} \left\{ \left(\frac{(n' + \gamma)mc^2}{E} - k \right) F(-n', 2\gamma + 1; 2\lambda r) \mp n' F(1 - n', 2\gamma + 1; 2\lambda r) \right\} \quad (156)$$

و في الختام نستنتج أن معادلة ديراك كانت ناجحة في تقديم دراسة نسبية لذرة الهيدروجين و بتالي الحصول على عبارة طاقة أدق بإدخال مفهوم الف الذاتي للإلكترون من التي تحصلنا عليها في الفصل الأول مع معادلة شرودينغر، حيث تبين تجريبيا أن الفرق في مستويات الطاقة لـ $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ هي نفسها عندما نستخدم طاقة ديراك لذرة الهيدروجين. أي النتائج التجريبية تنطبق مع ما قدمه ديراك في معادله النسبية التي تصف سبين $1/2$. إلا أن هذه المعادلة تختص بمعالجة الإلكترون المنفرد أو مضاده البزيترون، أي عندما نريد دراسة نظام مكون من جسيمين في الحالة النسبية فإن معادلة ديراك لاتصلح لهذا، و منه سنستند إلى معادلة موجية نسبية أحر تختص بدراسة جسيمين (فرميونين)، و التي سنطبقها على ذرة الهيدروجين بإعتباره نظام مكون من جسيمين و هذا سيكون في الفصل الثالث.

معادلة (Breit) لوصف تفاعل جسيمين

1.III مدخل

لقد أدى ظهور النسبية سنة 1905م على يد العالم ألبرت أنشتاين لفتح أفاق نحو إبتكارات و دراسات جديدة، و التي من بينها إكتشاف ديراك لمعادلته النسبية و التي كانت محور دراستنا في الباب الثاني، و قد حازت على نجاح مبهري في دراسة حركة الإلكترون و البزيترون، و الآن لنعود سنوات للوراء أين قام العالم داروين سنة 1920م بأول محاولة لمزاوجة كل من النسبية و الميكانيك الكلاسيكية، و من خلال هذا تمكن داروين من الحصول على لاغرانج لحركة جسيمين مع أخذ كل متطلبات النسبية بعين الإعتبار، فكان هذا العمل المصدر الأساسي الذي تطورت منه الفيزياء النسبية للجسيمين و خاصة الجسيمات المقيدة، و هكذا كان إنجاز داروين الطريق الذي إنبثقت منه معادلة بریت الكمية النسبية و التي تصف جسيمين، و لمزيد من التعرف سنتناول في بداية هذا الفصل كيف نشأة هذه المعادلة، ثم نطبق هذه الأخيرة على ذرة الهيدروجين [11].

2.III نشأة معادلة (Breit)

من أجل الحصول على تفاعل لاغرانج لشحنة نقطية تتحرك في مجال خارجي سنبدأ من قانون نيوتن للحركة، بحيث تعطى القوة المؤثرة على جسيم يتحرك في حقل كهرومغناطيسي خارجي كما يلي:

$$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \frac{\vec{B}}{c}. \quad (1)$$

و التي تسمى بقوة لورنتز.

نعرف \vec{E} و \vec{B} بدلالة الكمون السلمي ϕ و الشعاعي \vec{A} كما يلي:

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (3)$$

بتعويض (2)، (3) في (1) نكتب معادلة نيوتن للحركة:

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \frac{\vec{B}}{c} = -q\left(\nabla\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right) + \frac{q}{c}\vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}). \quad (4)$$

باستخدام العلاقات التالية:

$$\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = \frac{d\vec{A}}{dt} - (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{A} \quad (5)$$

$$\vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{A}) - (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{A} \quad (6)$$

نعوض (5)، (6) في (4) نجد:

$$\begin{aligned} m\frac{d\vec{v}}{dt} &= -q\left(\nabla\phi + \frac{1}{c}\frac{d\vec{A}}{dt} - \frac{1}{c}(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{A}\right) + \frac{q}{c}\left(\vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{A}) - (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{A}\right) \\ &= -q\nabla\phi - \frac{q}{c}\frac{d\vec{A}}{dt} + \frac{q}{c}(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{A} + \frac{q}{c}\vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{A}) - \frac{q}{c}(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{A}, \end{aligned}$$

بالتبسيط نجد:

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A}) = \vec{\nabla}\left(\frac{q}{c}\vec{v} \cdot \vec{A} - q\phi\right). \quad (7)$$

هذه المعادلة لها نفس شكل معادلة أولر-لاجرانج للحركة والتي تعطى :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_i}, \quad (8)$$

من المعادلتين (7) و (8) نحصل على تفاعل لاجرانج :

$$L_{int} = \frac{q}{c} \vec{v} \cdot \vec{A} - q\phi. \quad (9)$$

و للحصول على عبارة \vec{A} و ϕ التي تحتوي بعض الحدود النسبية نستخدم اشتقاق داروين [11].

3.III اشتقاق داروين

تعطى معادلات ماكسويل:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \quad (10)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (11)$$

نضرب طرفي المعادلة (2) من اليسار في $\vec{\nabla}$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = -\nabla^2 \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}), \quad (12)$$

$$\nabla^2 \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) = -4\pi\rho. \quad (13)$$

ولدينا أيضا:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j} + \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right). \quad (14)$$

ويستخدم معيار لورنتز :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad (15)$$

نعيد صياغة المعادلات (13) و(14) كمايلي:

$$\nabla^2 \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = -4\pi\rho$$

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi\rho \quad (16)$$

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j}. \quad (17)$$

بحيث تعطى حلول هذه المعادلات على التوالي:

$$\phi = \int \frac{\rho'}{r'} dV \quad (18)$$

$$\vec{A} = \frac{1}{c} \int \frac{\vec{j}'}{r'} dV. \quad (19)$$

الكميات التي نرمز لها برمز الإشتقاق (') محسوبة في زمن متأخر t' بحيث $t' = t - \tau$ ، نحدد ϕ و \vec{A} في الزمن t عند شحنة الإختبار، بحيث في حالة وجود مصدر نقطي لشحنة تتحرك بسرعة v ، تصبح العبارات (18) و(19) حسب كمون *Lienard - Weichert* كمايلي :

$$\phi = \frac{q}{r' - \frac{\vec{v}' \cdot \vec{r}'}{c}} \quad (20)$$

$$\vec{A} = \frac{q\vec{v}'}{c \left(r' - \frac{\vec{v}' \cdot \vec{r}'}{c} \right)}, \quad (21)$$

\vec{r}' شعاع المسافة من شحنة المصدر إلى نقطة المجال التي يتم عندها تحديد الكمونات، بحيث نشير إلى الكميات المتعلقة بشحنة المصدر بالدليل 1 و الكميات المتعلقة بشحنة الأختبار بالدليل 2، وباستخدام نشر تايلور للكمية $c^2\tau^2$ نجد:

$$c^2\tau^2 = r'^2 = \vec{r}'^2 = [\vec{r}_1(t) - \vec{r}_2(t')]^2 = \left[\vec{r}_1(t) - \vec{r}_2(t) + \tau\dot{\vec{r}}_2(t) - \frac{1}{2}\tau^2\ddot{\vec{r}}_2(t) \dots \right]^2 \quad (22)$$

$$= r^2 - 2\tau\dot{\vec{r}}_2(t) \cdot \vec{r} + \tau^2 \left[\dot{\vec{r}}_2^2(t) + \ddot{\vec{r}}_2(t) \cdot \vec{r} \right] - \dots, \quad (23)$$

بجيث : $\dot{\vec{r}} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial t}$, $\vec{r} = \vec{r}_2(t) - \vec{r}_1(t)$
 نأخذ الحدود حتى الدرجة c^{-2} فقط و بالتالي نحصل :

$$r' = c\tau = r - \frac{\dot{\vec{r}}_2 \cdot \vec{r}}{c} + \frac{r}{2c^2} \left[\dot{\vec{r}}_2^2 + \ddot{\vec{r}}_2 \cdot \vec{r} + \frac{(\dot{\vec{r}}_2 \cdot \vec{r})^2}{r^2} \right]. \quad (24)$$

$$v'_2 = \dot{\vec{r}}_2 - \left(\frac{r}{c} - \frac{\dot{\vec{r}}_2 \cdot \vec{r}}{c^2} \right) \ddot{\vec{r}}_2. \quad (25)$$

بإستبدال هذه التعبيرات في كمون *Lienard - Weichert* نجد :

$$\phi = \frac{q_2}{r} + \frac{q_2}{2c^2} \left[\frac{\dot{\vec{r}}_2^2 + \ddot{\vec{r}}_2 \cdot \vec{r}}{r} - \frac{(\dot{\vec{r}}_2 \cdot \vec{r})^2}{r^3} \right]. \quad (26)$$

$$A = \frac{q_2 \dot{\vec{r}}_2}{cr} = \frac{q_2 \vec{v}_2}{cr}. \quad (27)$$

بتعويض العبارات (27) , (26) في العبارة (9) نحصل على تفاعل لاغرانج لديناميك الكهروإتية الكلاسيكية كما يلي :

$$L_{int} = \frac{q_1}{c} \vec{v}_1 \cdot \vec{A} - q_1 \phi = -\frac{q_1 q_2}{r} - \frac{q_1 q_2}{2c^2} \left[\frac{\vec{v}_2^2 + \vec{a}_2 \cdot \vec{r} - 2\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2}{r} - \frac{(\vec{v}_2 \cdot \vec{r})^2}{r^3} \right]. \quad (28)$$

بجيث $\vec{a}_2 = \ddot{\vec{r}}_2$ هو تسارع الشحنة المصدر.
 يمكننا تحويل لاغرانج وفق العبارة التالية :

$$L' = L + \frac{d\vec{F}}{dt}. \quad (29)$$

وتعطى

$$\vec{F} = \frac{q_1 q_2}{2c^2 r} \vec{v}_1 \cdot \vec{r}. \quad (30)$$

و بتعويض (30) , (28) في العبارة (29) نحصل على لاغرانج المحول :

$$L_{int} = -\frac{q_1 q_2}{r} + \frac{q_1 q_2}{2c^2 r} \left[\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 + \frac{(\vec{v}_1 \cdot \vec{r})(\vec{v}_2 \cdot \vec{r})}{r^2} \right]. \quad (31)$$

وهذا يسمى بتفاعل لاغرانج لداروين، و هو متماثل في حالة تبادل التسمية.

4.III هاملتون بریت (Breit)

لقد كانت أعمال داروين بداية لبريت لتطوير معادلته لثنائية الجسم في الحالة الكمية ، بحيث يعطى هاملتون داروين في الحالة النسبية الكلاسيكية:

$$H = \frac{P_1^2}{2m} - \frac{P_1^4}{8m^3c^2} + \frac{P_2^2}{2m} - \frac{P_2^4}{8m^3c^2} + \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{2m^2c^2r} \left[\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 + \frac{(\vec{p}_1 \cdot \vec{r})(\vec{p}_2 \cdot \vec{r})}{r^2} \right]. \quad (32)$$

بحيث r المسافة بين الشحنتين.

لقد إستند بریت على معادلة ديراك النسبية للحصول على معادلته الموجية التي تصف جسيمين في الحالة النسبية الكمية ، وذلك بإستناده إلى نظرية Ehrenfest :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, r] = c\alpha = v_{op}. \quad (33)$$

بحيث تعطى معادلة ديراك في الحالة الحرة:

$$H = c\alpha \cdot \vec{p} + \beta mc^2. \quad (34)$$

ومنه نجد:

$$\frac{P_1^2}{2m} - \frac{P_1^4}{8m^3c^2} \rightarrow (c\alpha \cdot \vec{p} + \beta mc^2)_1. \quad (35)$$

$$\frac{P_2^2}{2m} - \frac{P_2^4}{8m^3c^2} \rightarrow (c\alpha \cdot \vec{p} + \beta mc^2)_2. \quad (36)$$

$$\frac{e^2}{2m^2c^2r} \left[\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 + \frac{(\vec{p}_1 \cdot \vec{r})(\vec{p}_2 \cdot \vec{r})}{r^2} \right] \rightarrow \frac{e^2}{2r} \left[\alpha_1 \cdot \alpha_2 + \frac{(\alpha_1 \cdot \vec{r})(\alpha_2 \cdot \vec{r})}{r^2} \right]. \quad (37)$$

وبهذا نحصل معادلة بریت النسبية التي تعالج ثنائية الفرميون كما يلي:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \left((c\alpha \cdot \vec{p} + \beta mc^2)_1 + (c\alpha \cdot \vec{p} + \beta mc^2)_2 + \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{2c^2r} \frac{e^2}{2c^2r} \left[\alpha_1 \cdot \alpha_2 + \frac{(\alpha_1 \cdot \vec{r})(\alpha_2 \cdot \vec{r})}{r^2} \right] \right) \psi. \quad (38)$$

بحيث الدالة الموجية تصف ثنائية الفرميون ولها ستة عشر مركبة بحيث أن الدالة الموجية مكون من أربع سبينورات
ومنه نكتب [11]

$$\psi_{m,n}(m, n = 1, 2, 3, 4)$$

إن معادلة برييت Breit يمكن تطبيقها على ذرة الهيدروجين و هذا يكون في ظل دراسة تقريبية بإعتبارها نظام مكون من جسيمين بحيث ندرس النواة دراسة غير نسبية و الإلكترون يكون في إطار دراسة نسبية، وهذا مآردنا الوصول إليه بالإضافة إلى وجود ذرة الهيدروجين في حقل مغناطيسي خارجي، و نظرا لسوء الوضع لم نتمكن من مواصلة الدراسة لهذه المسألة. [12].

وفي الأخير نقول أن معادلة برييت Breit هي معادلة موجية نسبية تقريبية لمعالجة جسيمين، بحيث أننا إستخدمنا في دراستنا السابقة كمون كولوم وكمون برييت Breit ولكن يوجد هناك أيضا كمونات أخرى يمكن إستخدامها لمعالجة الأنظمة المكونة من جسيمين ذات السبين نصف.

خاتمة عامة

تمت وبفضل الله هذه المذكرة تحت عنوان دراسة ذرة الهيدروجين في إطار جسيمين، و الهدف منها الحصول على مستويات الطاقة لذرة الهيدوجين، و ذلك في الحالة الكمية الغير نسبية و ذلك بحل معادلة شرودينغر في حالة النواة ساكنة وفي حالة إدخال حركة النواة، فوجدنا أن الحل يكون نفسه في كلتا الحالتين و لكن بإستبدال كتلة الإلكترون بالكتلة المختزلة في حالة إعتبار حركة النواة، و هذه المعالجة كانت في عدم وجود السبين، ثم تطرقنا في الفصل الموالي إلى المعالجة الكمية النسبية لذرة الهيدروجين بحل معادلة ديراك و توصلنا في الأخير على عبارة الطاقة النسبية للإلكترون أدق من عبارة الطاقة التي توصلنا لها في حالة حل معادلة شرودينغر و هذا كان بإدخال الف الذاتي للإلكترون (السبين)، وهذه الأخيرة ساهمت بدورها في خلق الجسيم المضاد للإلكترون و الذي ندعوه اليوم بالبريترون، و نظرا لتواصل الدراسة تم التوصل لمعادلة موجية كمية نسبية مهمة تعالج جسيمين ذو السبين نصف هي معادلة *Breit* التي تطرقنا لها في الفصل الأخير ، وإنتلاقا من إشتقاق داروين تمكنا من الوصول إلى تفاعل لاغرانج لجسيمين و ثم الحصول على هاملتون تفاعل لاغرنج لجسيمين و بالتكميم و الإستناد على معادلة ديراك النسبية تمكنا من الحصول على هاملتون *Breit* ومنه توصلنا لمعادلة *Breit* الكمية النسبية التي تصف تفاعل فرميونين، وكان في ودنا مواصلة العمل وتقديم المزيد وذلك بتطبيق هذه المعادلة على ذرة الهيدروجين بإعتبارها نظام مكون من جسيمين ومن ثم دراسة تفاعل ذرة الهيدروجين مع حقل مغناطيسي خارجي ولكن لسوء الوضع لم نتمكن من هذا، وهذه الدراسات تساهم في الكشف عن التركيب الدقيق لذرة وبالتالي يمكن تفسير الجدول الدوري للعناصر و الذي يعتبر الأساس في دراسة الكيمياء، و في الختام أتمنى أن يستفيد الطلبة من دراسة هذه العمل و يفتح الباب لمواصلة البحث في العمل و بالتوفيق للجميع.

ملحق

نموذج بور - سومرفيلد Bohr-Sommerfeld

قام سومرفيلد بتعديل مسارات الإلكترون حول النواة مفترضا أن مسار الإلكترون عبارة عن قطع ناقص وتقع النواة في إحدى بؤرتيه مما يجعل مدارات بور حالة خاصة. كما قام بإيجاد حجم وشكل المدارات البيضاوية للإلكترون و قام أيضا بحساب قيمة الطاقة الكلية للإلكترون في كل مدار بناء على التعديل الجديد و ذلك بإدخال أعداد كمية (n_r, n_θ) ولتوضيح هذا سوف نتطرق الى العناصر التالية:

1- المعادلة التفاضلية للموضع r حالة الحركة الغير دائرية

2- العبارة الكلاسيكية لطاقة الإلكترون في هذه الدراسة المعممة

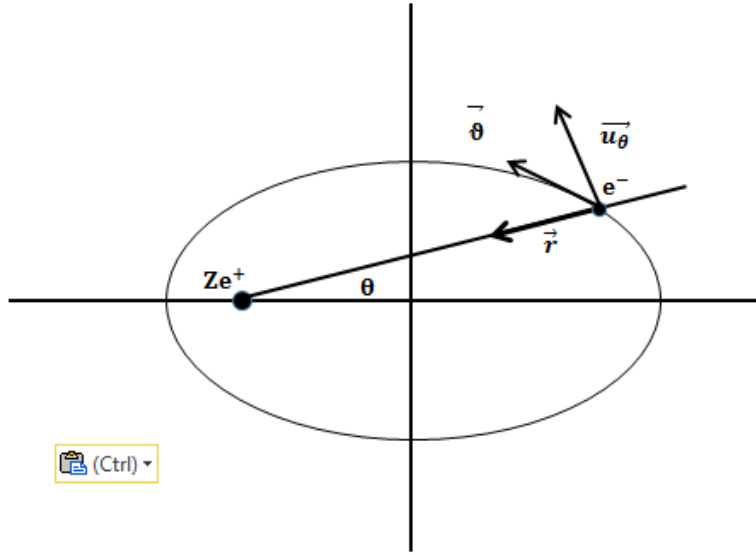
3- تكميم بور - سومرفيلد

المعادلة التفاضلية للموضع r حالة الحركة الإهليجية:

قام سومرفيلد بتصحيح نموذج بور مفترضا أن مسار الإلكترون يكون على شكل قطع ناقص كما توضحه هذه الصورة:

يمكن تبسيط معادلة القطع الناقص لمسار الإلكترون في النظام الكرتيزي بدلالة القطرين a و b بالمعادلة :

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (39)$$



يمكننا الحصول على معادلة الدائرة (بوضع $a = b = R$) عندما يكون a مساويا لـ b كما يعطى معامل التباعد المركزي ϵ أيضا بالعلاقات التالية:

$$\epsilon = \sqrt{\frac{a^2 - b^2}{a^2}} = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}} \Rightarrow 1 - \epsilon^2 = \frac{b^2}{a^2}. \quad (40)$$

$$\frac{1}{r} = \frac{1 + \epsilon \cos \theta}{a(1 - \epsilon^2)}. \quad (41)$$

نعرف شعاع السرعة للإلكترون في الإحداثيات القطبية بـ :

$$\vec{v} = r\dot{u}_r + r\dot{\theta}\dot{u}_\theta \Rightarrow \|\vec{v}\| = \sqrt{\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2}. \quad (42)$$

ويادخال شعاع كمية الحركة في الإحداثيات القطبية لدينا:

$$\vec{P}_r = m\dot{r}\dot{u}_r, \vec{P}_\theta = mr^2\dot{\theta}\dot{u}_\theta. \quad (43)$$

أما الطاقة الكلية له هي مجموع الطاقة الحركية و الطاقة الكامنة الكهربائية وهذا بإهمال الطاقة الثقالية لصغرها.

$$E = E_c + E_p \quad (44)$$

وهي مكتوبة بالإحداثيات القطبية r, θ :

$$E = \frac{1}{2}m \left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (45)$$

حيث مشتق شعاع الموضع بالنسبة لزمان يساوي:

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = \frac{dr}{d\theta} \dot{\theta} = \frac{dr}{d\theta} \cdot \frac{P_\theta}{mr^2}. \quad (46)$$

وتكتب عبارة الطاقة الكلية في الإحداثيات القطبية بالعبارة التالية:

$$E = \frac{1}{2}m \left(\left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 \cdot \frac{P_\theta^2}{m^2 r^4} + r^2 \frac{P_\theta^2}{m^2 r^4} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (47)$$

لنجد أيضا:

$$\frac{2mr^2 E}{P_\theta^2} = \frac{1}{r^2} \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 + 1 - \frac{2Ze^2 r}{(4\pi\epsilon_0) P_\theta^2}. \quad (48)$$

وأخيرا نصل إلى المعادلة التفاضلية للموضع Γ :

$$\frac{1}{r^2} \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 = \frac{2mr^2 E}{P_\theta^2} - 1 + \frac{2Ze^2 r}{(4\pi\epsilon_0) P_\theta^2}. \quad (49)$$

طاقة الإلكترون في حالة مسار قطع ناقص:

من جهة أخرى بإدخال اللوغاريتم على الدالة التالية :

$$\frac{1}{r} = \frac{1 + \epsilon \cos \theta}{a(1 - \epsilon^2)}. \quad (50)$$

$$\log\left(\frac{1}{r}\right) = \log(1 + \epsilon \cos \theta) - \log(a(1 - \epsilon^2)). \quad (51)$$

ثم بإدخال الإشتقاق بالنسبة لزاوية θ نجد:

$$\frac{1}{r} \frac{dr}{d\theta} = -\frac{\epsilon \sin \theta}{1 + \epsilon \cos \theta} \Rightarrow \frac{1}{r^2} \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2 = \frac{\epsilon^2 \sin^2 \theta}{(1 + \epsilon \cos \theta)^2}. \quad (52)$$

ويستخدم المساواة التالية نجد:

$$1 + \epsilon \cos \theta = \frac{a(1 - \epsilon^2)}{r} \Rightarrow \epsilon^2 \cos^2 \theta = \left[-1 + \frac{a(1 - \epsilon^2)}{r}\right]^2. \quad (53)$$

$$\epsilon^2 - \epsilon^2 \sin^2 \theta = \left[-1 + \frac{a(1 - \epsilon^2)}{r}\right]^2. \quad (54)$$

كذلك:

$$\Rightarrow \epsilon^2 \sin^2 \theta = \epsilon^2 - \left[-1 + \frac{a(1 - \epsilon^2)}{r}\right]^2 = \epsilon^2 - 1 - \frac{a^2(1 - \epsilon^2)^2}{r^2} + \frac{2a(1 - \epsilon^2)}{r}. \quad (55)$$

$$\Rightarrow \epsilon^2 \sin^2 \theta = \epsilon^2 - 1 - \frac{a^2(1 - \epsilon^2)^2}{r^2} + \frac{2a(1 - \epsilon^2)}{r}. \quad (56)$$

ومنه نحصل على:

$$\Rightarrow \frac{\epsilon^2 \sin^2 \theta}{(1 + \epsilon \cos \theta)^2} = \frac{\epsilon^2 - 1 - \frac{a^2(1 - \epsilon^2)^2}{r^2} + \frac{2a(1 - \epsilon^2)}{r}}{\left(\frac{a(1 - \epsilon^2)}{r}\right)^2}. \quad (57)$$

$$\Rightarrow \frac{\epsilon^2 \sin^2 \theta}{(1 + \epsilon \cos \theta)^2} = -\frac{r^2}{a^2(1 - \epsilon^2)} - 1 + \frac{2r}{a(1 - \epsilon^2)}. \quad (58)$$

لنجد:

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 = -\frac{r^2}{a^2(1-\epsilon^2)} - 1 + \frac{2r}{a(1-\epsilon^2)}. \quad (59)$$

وأخيرا نستخرج العلاقتين التاليتين:

$$\frac{2mE}{P_\theta^2} = -\frac{1}{a^2(1-\epsilon^2)}, \quad (60)$$

$$\frac{2mZe^2}{(4\pi\epsilon_0)P_\theta^2} = \frac{2}{a(1-\epsilon^2)}, \quad (61)$$

وكما نعلم من تعريف معامل التباعد المركزي الذي أوضحناه في البداية، سوف نحصل على:

$$\Rightarrow \frac{2mE}{P_\theta^2} = -\frac{1}{a^2} \cdot \frac{a^2}{b^2} = -\frac{1}{b^2}. \quad (62)$$

$$\frac{2mZe^2}{(4\pi\epsilon_0)P_\theta^2} = \frac{2}{a} \cdot \frac{a^2}{b^2} = \frac{2a}{b^2}. \quad (63)$$

وأخيرا سوف نتحصل على عبارة الطاقة:

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2P_\theta^2} \cdot \frac{b^2}{a^2}. \quad (64)$$

تكميم ويلسون سومرفلد:

اعتمد تكميم ويلسون سومرفلد على قاعدتين وهي:

$$\oint P_r dr = n_r h. \quad (65)$$

$$\oint P_{\theta} d\theta = n_{\theta} h. \quad (66)$$

القاعدة الثانية في التكميم سوف نحصل على:

$$\int_0^{2\pi} P_{\theta} d\theta = n_{\theta} h \Rightarrow 2\pi P_{\theta} = n_{\theta} h \Rightarrow P_{\theta} = \frac{n_{\theta} h}{2\pi}. \quad (67)$$

ومن قاعدة التكميم الأولى نحصل على:

$$P_r = m\dot{r} = m \frac{dr}{dt} = m \frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{dt}. \quad (68)$$

$$P_r = \frac{dr}{d\theta} \frac{P_{\theta}}{r^2}. \quad (69)$$

$$\int P_r dr = \int \frac{dr}{d\theta} \frac{P_{\theta}}{r^2} dr = \int \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 \frac{P_{\theta}}{r^2} d\theta = n_r h. \quad (70)$$

$$P_{\theta} \int_0^{2\pi} \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 \frac{d\theta}{r^2} = n_r h \Rightarrow \frac{n_{\theta} h}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 \frac{d\theta}{r^2} = n_r h. \quad (71)$$

ثم بتعويض $\frac{1}{r^2} \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 = \frac{\epsilon^2 \sin^2 \theta}{1 + \epsilon \cos \theta}$ بدلالة الزاوية θ نجد:

$$\frac{n_{\theta} h}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 \frac{d\theta}{r^2} = \int_0^{2\pi} \frac{\epsilon^2 \sin^2 \theta}{1 + \epsilon \cos \theta} d\theta = \frac{2\pi n_r}{n_{\theta}}. \quad (72)$$

كما يمكننا أن نجري التكامل بسهولة و ذلك بإستخدام التكامل بالتجزئة لنجد النتيجة التالية:

$$\left[\frac{2\pi}{\sqrt{1 - \epsilon^2}} - 2\pi \right] = \frac{2\pi n_r}{n_{\theta}}. \quad (73)$$

وأخيرا نحصل على:

$$\frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2}} = 1 + \frac{n_r}{n_\theta} \Rightarrow \sqrt{1-\epsilon^2} = \frac{n_\theta}{n_\theta + n_r} = \frac{n_\theta}{n}. \quad (74)$$

حيث $n = n_\theta + n_r$.

لنعود إلى عبارة الطاقة المحصل عليها من قبل ونعوض كلا من الحدين بما يساويهما: $P_\theta = \frac{n_\theta h}{2\pi}$ و $\frac{b^2}{a^2} = \left(\frac{n_\theta}{n}\right)^2$ لنحصل على:

$$E_{n_\theta, n_r} = -\frac{mZ^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{b^2}{a^2 P_\theta^2} = -\frac{mZ^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{n_\theta^2 (2\pi)^2}{n^2 (n_\theta h)^2}. \quad (75)$$

$$E_{n_\theta, n_r} = -\frac{mZ^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{(2\pi)^2}{h^2 n^2} = -\frac{mZ^2e^4}{8h^2\epsilon_0^2} \frac{1}{(n_r + n_\theta)^2}. \quad (76)$$

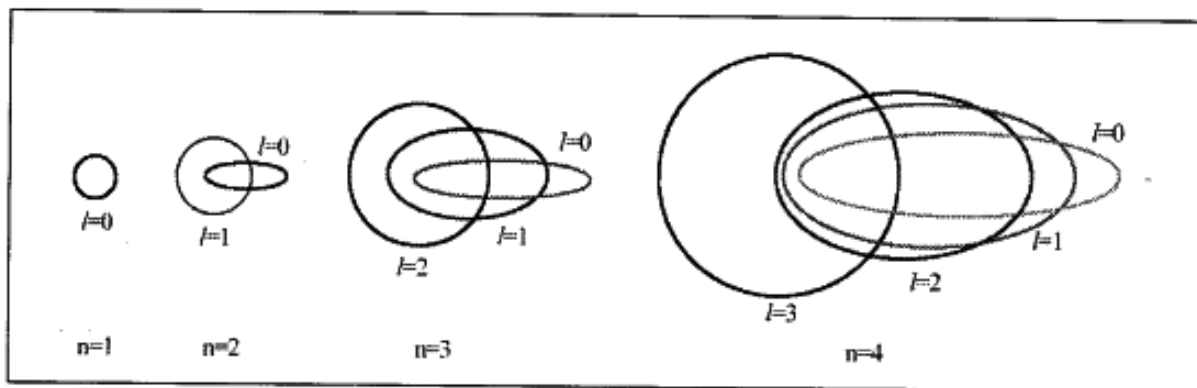
وهي نفس عبارة الطاقة التي حصل عليها بور فقط العدد الكمي n ينفصل إلى عددين كميين هما n_r و n_θ بحيث قيم n_r تأخذ من $0, 1, 2, \dots$ وقيم n_θ تأخذ القيم من $1, 2, \dots$ أما عبارات أنصاف أقطار القطع الناقص تكون مكممة و تساوي:

$$a = \frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{Z m e^2 \pi}. \quad (77)$$

$$b = a \cdot \frac{n_\theta}{n} = \frac{\epsilon_0 h^2}{Z m e^2 \pi} n \cdot n_\theta. \quad (78)$$

ولتوضيح الصورة أكثر انظر الى المخططات أعلاه حيث قيمة $n = 4$:
العدد l هو نفسه n_r ، حيث نلاحظ وجود انفصالات في مدار الإلكترون عند $n > 1$.
ثم تمكن سومرفيلد أيضا بدراسة الحركة النسبية للإلكترون وقد توصل إلى وجود تشققات في مستويات الطاقة حيث تزداد أهمية التشقق مع زيادة سرعة الإلكترون و بذلك تمكن سومرفيلد من تفسير التركيب الدقيق لذرة الهيدروجين في حساباته والتي تأخذ العبارة التالية:

$$E_{n_\theta, n_r} = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (79)$$



The allowed electronic orbits for the main Quantum numbers by Bohr - Sommerfeld model

حيث α يدعى ثابت البنية الدقيقة والذي يساوي:

$$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} \simeq \frac{1}{137}. \quad (80)$$

لقد سمح هذا الحساب من رفع توألد مستوى الطاقة وهذا بتجزئته إلى عدة مستويات متجاورة ولكنها مختلفة في الطاقة ونقول عن هذه العناصر بأن لها بنية دقيقة.

قائمة المراجع

- [1] صباح محمود امان الله، عبد السميع فوزي عبد العزيز، أساسيات الفيزياء الذرية، دار غيداء للنشر والتوزيع 2007.
- [2] محمد أنور بطل، الفيزياء الذرية و الجزيئية، منشورات جامعة حلب كلية العلوم 1410هـ-1989م.
- [3] أسامة زيد إبراهيم ناجي، مقدمة في ميكانيك الكم، الدار الدولية للنشر و التوزيع مصر-القاهرة.
- [4] غازي ياسين القيسي، أساسيات الفيزياء الحديثة، دار المسيرة للنشر والتوزيع الطبعة الأولى 2007م-1427هـ، الطبعة الثانية 2009م-1429هـ.
- [5] احو يوسف ، المدخل إلى ميكانيك الكم، دار الينابيع للنشر والتوزيع دمشق 1993م/1/10.
- [6] حسن سلمان، الميكانيك الكوانتية، دار(مير) موسكو.
- [7] Nouredine Zettili , Quantum Mechanics, Concepts and Applications, Jacksonvill State University (2001).
- [8] W.Greiner , Relativistic Quantum Mechanics: wave equations; 3. ed. - Berlin; Heidelberg; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Singapore; Tokyo: Springer, (2000).
- [9] R.Shankar , Principles of Quantum Mechanics ,Second Edition 1994, 1980 Plenum Press, New York A Division of Plenum Publishing Corporation 233 Spring Street, New York, N.Y. 10013.
- [10] Dr.Armin Wachter , Relativistic Quantum Mechanics, Springer Science+Business Media B.V. 2011.
- [11] Alan James Sommerer, Relativistic two-body wave equations ,1993
- [12] H.Grotch and Roger A. Hegstrom , Rev. A **2**, 648 (1970).

مُلخَص

الهدف من هذه المذكرة هي دراسة ذرة الهيدروجين في حالة النسبية، حيث نميز حالتين حالة كون النواة ساكنة تؤول المعادلة النسبية إلى دراسة معادلة ديراك مع كمون كولوم (كمون مركزي). أما في حالة إدخال حركة النواة تؤول المسألة إلى دراسة حركة جسيمين و التي ترتبط بمعادلة تختلف عن معادلة ديراك تدعى بمعادلة Breit. و لتبسيط المسألة يمكن إرجاع النظام إلى حركة جسيم منفرد بإستخدام إحداثيات مركز الكتلة.

الكلمات المفتاحية : ذرة الهيدروجين، معادلة شرودينغر، معادلة ديراك، معادلة بريت، إشتقاق داروين.

Abstract

The aim of this work is to study the hydrogen atom in the relativistic case, where two cases can be distinguished, the first one being that of a stable nucleus, whose relativistic equation leads to the study of Dirac's equation with Coulomb potential (Central potential). The second case is that of the motion of a nucleus, this time the problem returns to the study of the motion of two particles, which are related to an equation different from the Dirac equation called the Breit equation. To simplify the problem, the system can be traced back to the motion of a single particle using the coordinates of the center of mass.

Keywords: The hydrogen atom, the Schrodinger equation, Dirac's equation, The Breit equation, Darwin's Derivation.

Résumé

Le but de ce mémoire est d'étudier l'atome d'hydrogène dans le cas relativiste, où l'on distingue deux cas, le premier celui de noyau stable, dont l'équation relativiste conduit à l'étude de l'équation de Dirac à potentiel de Coulomb (Potentiel central). Le deuxième cas est du mouvement de noyau, au cette fois, le problème revient à l'étude du mouvement de deux particules, qui sont liés à une équation différente de l'équation de Dirac appelée équation de Breit. Pour simplifier le problème, le système peut être retracé au mouvement d'une seule particule en utilisant les coordonnées du centre des masses.

Mots-clés : L'atom de Hydrogene, l'equation de Schrodinger, l'equation de Dirac, l'equation de Breit, la derivation de Darwin.