جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم الدقيقة والعلوم الطبيعة والحياة
قسم علوم المادة

مذكرة ماستر

ميدان: علوم المادة

فرع فيزياء

تخصص فيزياء طاقوية وطاقة متجددة

رقم: أدخل رقم تسلسل المذكرة

إعداد الطالبتين:

غانيه إيمان **زمالي أميره**

يوم: 2022/06/27

حل معادلة شرودينغر لكمون الحلقة المضاعف زائد كمون كراتزر

لجنة المناقشة

عليان ايدير	أ محاضر ب	جامعة محمد خيضر بسكرة	رئيسا
هدار مبارك	أ محاضر ب	جامعة محمد خيضر بسكرة	مقررا
حايف خايف وناسة	أ محاضر ب	جامعة محمد خيضر بسكرة	ممتحنا

السنة الجامعية:2022/2021

الإهــداء

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَٰنِ الرَّحِيمِ

وصلى الله على صاحب الشفاعة سيدنا محمد نبينا الكريم وعلى آله وصحبه أجمعين، ومن تبعهم بإحسان إلى يوم الدين وبعد:

إلى من ساندتني في صلاتها ودعائها، إلى من سهرت الليالي تنير دروبي، إلى أجمل وأعظم إمرأة في الوجود أمي الحنون **نعرورة الزهرة**.

إلى من تشققت يداه في سبيل رعايتي إلى من علمني أن الدنيا كفاح أبي الغالي **غانيه عباس**.

إلى الذين ظفرت بهم هدية من الأقدار إخوة فعرفوا معنى الأخوة سندي في هذه الحياة أخوتي الأحباء: **عبد الله، حمزة، عمر، علي ومحمد الصديق**. وأخواتي العزيزات: **وفاء، إلهام**.

إلى أميرات العائلة ونورها بنات أخي **سجود، رحمة**.

إلى بقية أفراد عائلتي الجميلة التي أسعد بإنتمائي لها.

إلى رفيقة الدرب والحياة، إلى أختي التي لم تلدها أمي ومن كانت معي في كل خطوة أخطيها، إلى صاحبة العيون الجميلة **أميرة زمالي**.

إلى كل من أوصلني إلى هذه المرحلة، إلى جميع أساتذتي خلال مشوري الدراسي.

إلى كل من ساعدني من قريب أو بعيد.

إلى كل من يسعهم قلبي ولم يذكرهم قلمي أهدي هذا العمل.

غانيه إيمان

الإهـــداء

الحمد لله حمدا كثيرا طيبا مباركا فيه سبحانك لا نحصى ثناء عليك أنت كما أثنيت على نفسك خلقت فأبدعت، وأعطيت فأفضت، فلا حصر لنعمك ولا حدود لفضلك، وصلى الله وسلم على أشرف عبادك وأكمل خلقك خاتم المرسلين ومعلم المعلمين نبينا ورسولنا محمد ﷺ خير من علم وأفضل من نصح.

أما بعد إلى صاحب الوجه الطيب والأفعال الحسنة فلم يبخل علي طيلة حياته فقد كان له الفضل الأول في بلوغي التعليم العالي **والدي العزيز حسين زمالي.**

إلى من أفضلها على نفسي ولم لا فلقد ضحت من أجلي،ولم تدخر جهدا في سبيل إسعادي على الدوام

أمي الحبيبة امباركة تواتي حمد.

إلى الشخص الذي كان هو سبب نجاحي، إلى من أنار دربي، وكان سندي، ومشجعي الأول وملهمي إلى زوجي **سعودي مراد** رفيق النجاح فلولا فضل الله عز وجل ولولاه لما كنت قد وصلت إلى مثل هذا اليوم العظيم.

إلى من أعتمد عليهم في كل كبيرة وصغيرة إلى من هم السند والعضد في الحياة إخوتي **وأخواتي نور الهدى، سلوى، كريمة، علي، محمد البشير، عبد الكامل، زينب، محمد الهادي، أنور.**

إلى أعزائي براعم العائلة بنات وأولاد أخوتي وأخواتي، وأزواجهم وزوجاتهم.

إلى رفيقة دربي وصديقة الطفولة والمشوار الدراسي ذات الوجه البشوش والبسمة البريئة والقلب الطيب إيمان غانيه.

إلى صديقاتي وزميلاتي اللاتي أشهد لهم بنعم الرفقاء في جميع الأمور وأخص بالذكر عبير، رزيقة، بثينة، سامية.

إلى من لهم الفضل لوصولي إلى هذه المرتبة السامية أساتذتي وأستاذاتي في جميع مراحل الدراسة

إلى كل من ساعدني ولو بكلمة في إنجاز هذه المذكرة وإلى كل من نسيهم القلم وهم في عمق القلب.

أهدي هذا العمل **زمالي أميره**

شكر وعرفان

قبل كل شيء نحمد الله عز وجل ونشكره الذي أنعم علينا بنعمة العلم وأنار طريقنا نحو سبل النور والمعرفة. ونثني عليه الخير كله على أن وفقنا لإتمام هذا العمل، ونسأله أن يجعل هذا كله خالصا لوجهه الكريم، وأن ينفعنا به وينتفع به من بعدنا.

ومن قول الرسول ﷺ "من لا يشكر الناس لا يشكر الله" وأولى الناس بالشكر هما الأبوان لما لهما من فضل ما يبلغ عنان السماء فوجودهما سبب لنجاح والفلاح في الدنيا والآخرة.

نتقدم وبكل معاني التقدير والإحترام بالشكر

للأستاذ "هدار مبارك"

الذي أشرف على هذا العمل وكان له بالغ الأثر في تخطي الكثير من العقبات والصعاب.

وأعضاء لجنة المناقشة الكرام

"عليان ايدير" و **"حايف خايف وناسة"**

بتفضلهما على قبول مناقشة هذه المذكرة.

فهرس المحتويات

المقدمة

المقدمة

في القديم تمكن العلماء من شرح الظواهر العلمية وحتى نهاية القرن الثامن عشر ميلادي بواسطة الفيزياء الكلاسيكية إلا أنه عند اكتشاف الذرات والجزيئات ومكوناتها لم تستطع الفيزياء الكلاسيكية شرح ودراسة الظواهر العلمية المرتبطة بها فقد أخلف ذلك العديد من تراكمات الدلالات العلمية التي أدلت بعدم امكانية الفيزياء الكلاسيكية في شرح وتفسير الأنظمة الذرية المتناهية في الصغر. ولأجل التصدي لهذه التحديات غير القابلة لتفسير أدخل عليها بعض من الفرضيات للعديد من العلماء كماكس بلانك، بوهر ودي برولي لتأسيس ما يسمى بميكانيكا الكم القديمة، هذه الفرضيات لم تكن مقنعة في بعض المواضع لكنها ناجحة جزئيا للظواهر الذرية فهنا قام كل من هيزنبرج وشرودنغر كلا على حدى من إعادة الصياغة الأساسية لنظرية الفيزيائية الخاصة بالأنظمة الميكروسكوبية ووضع اللمسات الأخيرة لها وسميت بنظرية ميكانيكا الكمquantum mechania، فهي نظرية أكثر أساسا وأوسع تطبيقا حيث يمكن تطبيقها على الأجسام المتناهية في الصغر وأيضا على الأجسام الكبيرة وليس كما يعتقد البعض أنها خاصة بالأجسام المتناهية في الصغر فقط.

ونظرا لعدم تناظر الظواهر المدروسة كذرة الهيدروجين التي لها تناظر كروي كالجزيئات والأنوية والذرات متعددة الإلكترونات أدى بالفيزيائيين إلى طرح فكرة الكمونات غير المركزية التي ليس لها تناظر مركزي أي لاتتعلق فقط بنصف القطر إنما تتعلق بمعاملات أخرى كالزوايا. ومن بين هذه الكمونات كمون كراتزر الذي له دورا هاما في تاريخ الكيمياء الجزئية والكمية وقد تم استخدامه لوصف البنية والتفاعلات الجزئية، وكذلك كمون الحلقة المضاعف

وفي هذا العمل سنقوم بدراسة الحل الدقيق لمعادلة شرودينغر لكمون الحلقة المضاعف زائد كمون كراتزر وذلك بالتسلسل التالي:

سنعرض في الفصل الأول كمون الحلقة وكمون كراتزر وذلك بعد التعرف على معادلة شرودينغر من تعريفها حتى عبارتها المتعلقة بالزمن وغير المتعلقة بالزمن.

أما الفصل الثاني فسيكون حول حل معادلة شرودينغر بكمون الحلقة المضاعف.

والفصل الثالث خاص بحل معادلة شرودينغر بكمون كراتزر.

وأخيرا في الفصل الرابع سنتطرق إلى حل معادلة شرودينغر بكمون الحلقة المضاعف زائد كمون كراتزر معا.

الفصل الأول: كمون الحلقة وكمون كراتزر

1.1 مقدمة

تطورت النظرية الكمية في اتجاهين مختلفين، إتجاه رياضي وهو إيجاد طرق رياضية جديدة لحل معادلة شرودينغر وفي الإتجاه الفيزيائي في تفسير بعض الظواهر الفيزيائية والكيميائية. حيث يمكن فهم خصائص الموجة للجسيمات في ميكانيك الكم بإستخدام معادلة شرودينغر وحلها لتوصل إلى حل مشكلة الأنظمة المجهرية مثل الذرة [1] ومع ذلك حل معادلة شرودينغر واجهت عدة صعوبات أهمها أن معادلة شرودينغر معادلة من الدرجة الثانية مما سبب صعوبة في حلها لذلك لجئ الفيزيائيون إلى فصل متغيراتها فتحصلوا على معادلات جديدة ففي بعض الحالات قد تكون هذه المعادلات ليس لها حل، لذلك أقترح حل معادلة شرودينغر بعدة طرق مختلفة وبكمونات عدة.

2.1 معادلة شرودينغر

1.2.1 تعريف

هي عبارة عن معادلة تفاضلية جزئية تصف كيفية تغير الحالة الكمية لنظام فيزيائي مع الزمن، وتضمن السلوك الموجي والجسيمي للأجسام. وقد صاغها العالم الفيزيائي النمساوي إروين شرودينغر(Erwin Schrodinger) في أواخر عام 1925م ونشرها عام 1926م، وتحتل هذه المعادلة أهمية خاصة في ميكانيكا الكم تعادل أهمية القانون الثاني لنيوتن في الفيزياء الكلاسيكية. التي يعطي حلها الدالة الموجية و قيمة الطاقة E [2] [3] [4]. وتكتب من الشكل:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \qquad (1.1)$$

حيث يمثل E طاقة الجسيم، Ψ دالة الموجة له و $\hat{H}$ مؤثر هاملتون ويكتب بشكل :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V \qquad (2.1)$$

حيث V: الطاقة الكامنة.

2.2.1 معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن

بتعويض مؤثر الهاملتون بعبارته في معادلة شرودينغر العام في الإحداثيات الكروية (1.1) نجد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V\right]\Psi_{(r,\theta,\varphi,t)} = \mathrm{E}\Psi_{(r,\theta,\varphi,t)} \quad (3.1)$$

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

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (4.1)$$

بتعويض العبارة (4.1) في (3.1) نجد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + V\right]\Psi_{(r,\theta,\varphi,t)} = \mathrm{E}\Psi_{(r,\theta,\varphi,t)} \quad (5.1)$$

أما في الإحداثيات الكارتيزية تكون:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6.1)$$

بتعويض العبارة (6.1) في (3.1) نجد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V\right]\Psi(x,y,z,t) = \mathrm{E}\Psi(x,y,z,t) \quad (7.1)$$

المعادلة (3.1) تعرف بمعادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن، والتي تتضمن أربعة متغيرات وهي إحداثيات الفضاء والزمن t.

3.2.1 معادلة شرودينغر غير المتعلقة بالزمن

المتغيرات الموجودة في المعادلة منفصلة حينما لا تكون الطاقة الكامنة دالة زمنية. وباستعمال طريقة فصل المتغيرات نحصل على معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن، حيث نفرض أن الدالة هي جداء دالتين إحداهما تتعلق بالزمن t والأخرى بالموضع r كالتالي [5] :

$$\Psi_{(r,\theta,\varphi,t)} = \Psi_{(r,\theta,\varphi)} \cdot f\left(t\right) \tag{8.1}$$

نعوض (8.1) في المعادلة (3.1) ونكتب:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V\right]\Psi_{(r,\theta,\varphi)} \cdot f\left(t\right) = \mathrm{E}\Psi_{(r,\theta,\varphi)} \cdot f\left(t\right) \tag{9.1}$$

نفاضل المعادلة (8.1) مرة بالنسبة للزمن t ومرتين بالنسبة للموضع r نجد:

$$\frac{\partial \Psi_{(r,\theta,\varphi)} \cdot f\left(t\right)}{\partial t} = \Psi_{(r,\theta,\varphi)} \cdot \frac{\partial f\left(t\right)}{\partial t} \tag{10.1}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(r,\theta,\varphi)} \cdot f\left(t\right)}{\partial r^2} = f\left(t\right) \cdot \frac{\partial^2 \Psi_{(r,\theta,\varphi)}}{\partial r^2} \tag{11.1}$$

نعوض (10.1) و(11.1) في معادلة (9.1) ونقسم على $\Psi_{(r,\theta,\varphi)} \cdot f\left(t\right)$ نحصل على:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 \Psi_{(r,\theta,\varphi)}}{\partial r^2} + V\right] \cdot \frac{1}{\Psi_{(r,\theta,\varphi)}} = \frac{1}{f\left(t\right)}\left[i\hbar \cdot \frac{\partial f\left(t\right)}{\partial t}\right] \tag{12.1}$$

في المعادلة (12.1) نجد أن الطرف الأيسر يعتمد على الموضع r والأيمن على الزمن t، من نظريات المعادلات التفاضلية أن كلا الطرفين مساو لثابت وهو E الطاقة الكلية للجسيم وهي طاقة محفوظة.

إن حل الطرف الأيمن يعطي الدالة الزمنية التالية:

$$f\left(t\right)=e^{iEt/\mathrm{h}} \qquad (13.1)$$

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

$$\left[-\frac{\mathrm{h}^2}{2\mu}\Delta+V\right]\Psi_{(r,\theta,\varphi)}=E\Psi_{(r,\theta,\varphi)} \qquad (14.1)$$

بتعويض مؤثر لابلاس نجد في الإحداثيات الكروية يكون:

$$\left[-\frac{\mathrm{h}^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+V\right]\Psi_{(r,\theta,\varphi)}=E\Psi_{(r,\theta,\varphi)} \qquad (15.1)$$

في الإحداثيات الكارتيزية يكون:

$$\left[-\frac{\mathrm{h}^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V\right]\Psi_{(r,\theta,\varphi)}=E\Psi_{(r,\theta,\varphi)} \qquad (16.1)$$

حيث الكمون المركزي $V\left(r\right)$ هو جهد يعتمد على المسافة r في أصل الإحداثيات. أما الكمون غير المركزي $V\left(r,\theta,\varphi\right)$ فهي دوال تعتمد على نصف القطر r والزوايا θ، φ لذلك أخذنا معادلة شرودينغر في الإحداثيات الكروية.

3.1 الكمونات غير المركزية

في حياتنا اليومية لا نجد جميع الأجسام والظواهر متناظرة فلم تستطع الكمونات المركزية حل هذه الظواهر لذلك أضطر الفيزيائيون إلى إستخدام الكمونات غير المركزية، حيث تعتمد الكمونات المركزية على البعد r في أصل الإحداثيات أما الكمونات غير المركزية فهي دوال تعتمد على نصف القطر r، الزاوية القطبية θ والزاوية φ. وهناك العديد من الكمونات غير المركزية التي تمت دراستها ونذكر منها: كمون ماكاروف، كمون هارتمان، كمون Hautot ، كمون كراتزر، كمون الحلقة المضاعف.... وجذبت

هذه الكمونات الإنتباه في الكيمياء نظرا لتطبيقاتها ضمن الحدود الأيونية للجزيئات القطبية.أيضا في علم الأحياء الجزيئي في دراسة آليا ترابط الإلكترون في الحمض النووي والحمض النووي الريبي[6].

1.3.1 كمون الحلقة المضاعف

يعد جزءا كبيرا من ميكانيك الكم والفيزياء النووية فهو دراسة مستويات الطاقة والذبذبات من الجزيئات والذرات والنواة المشوهة وكذلك الكمون غير المركزي في التفاعل بين جزيئات على شكل حلقة مثل البنزين وأيضا لتفاعلات بين الزوج المشوه من النوى.ويكتب هذا الكمون من الشكل التالي[7]:

$$V(r,\theta)=\eta\sigma^2\left(\frac{2a_0}{r}-q\eta\frac{a_0^2}{r^2\sin^2\theta}\right)\varepsilon_0+\frac{\hbar^2}{2M}\frac{c}{r^2\cos^2\theta} \quad ، \quad c\geq 0 \qquad (17.1)$$

حيث: $a_0=\frac{\hbar^2}{Me^2}$ ، $\varepsilon_0=\frac{-Me^4}{2\hbar^2}$ وتمثلان على الترتيب نصف قطر بوهر وطاقة الحالة الاساسية لذرة الهيدروجين.

وهو حالة خاصة من كمون Hautot لا مركزي:

$$V(r,\theta)=\mu\left[-\frac{H}{r}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\right] \qquad (18.1)$$

بحيث:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)\gamma=c \quad ، \quad \left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)(\beta+\gamma)=a_0^2 \quad ، \quad \alpha=0$$

2.3.1 كمون كراتزر

تلعب كمونات كراتزر دورا مهما في تاريخ الكيمياء الجزيئية والكمية وقد تم استخدامها لوصف البنية والتفاعلات الجزيئية بسبب أهميتها في هذا المجال. كانت كمونات كراتزر موضوع لعديد من الدراسات منذ تقديمها من قبل كراتزر في عام 1920. ويتم تعريفه بالشكل التالي:

$$V(r,\theta)=\frac{Q}{r}+\frac{D_r}{r^2} \tag{19.1}$$

الفصل الثاني: حل معادلة شرودينغر لكمون الحلقة المضاعف

1.2 مقدمة

إن كمون الحلقة المضاعف يستعمل لدراسة ووصف التفاعل بين الجزيئات والنواة المشوهة بشكل حلقي، وهو يعتبر كمون غير مركزي وفي هذا الفصل سنحاول دراسة معادلة شرودينغر تحت تأثير كمون الحلقة المضاعف[7].

2.2 حل معادلة شرودينغر لكمون الحلقة المضاعف

نكتب معادلة شرودينغر بالشكل التالي:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta+V\left(r,\theta\right)\right]\psi=E\Psi \qquad (1.2)$$

من أجل حل هذه المعادلة يجب علينا فصل المتغيرات لذلك من الأفضل استخدام الإحداثيات الكروية [8]

فتكتب معادلة شرودينغر كالتالي :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cot\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\mu V\left(r\right)+\frac{\mu f\left(\theta\right)}{r^2}\right]\psi=E\Psi \qquad (2.2)$$

نضع المعادلة في الشكل المناسب التالي:

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{2\mu^2}{\hbar^2}V\left(r\right)\right)+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\frac{2\mu^2}{\hbar^2}f\left(\theta\right)\right)\right]\psi=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi \qquad (3.2)$$

يمكن فصل المتغيرات عندما تتم كتابة الدالة الموجية بالشكل: $\psi=\exp\left(im\varphi\right)R\left(r\right)\Theta\left(\theta\right)$، لذلك علينا حساب مشتقات الدالة الموجية في التعبير الجديد.

المشتق الأول من ψ بالنسبة ل r هو:

$$\frac{\partial \psi}{\partial r}=\frac{\partial R(r)}{\partial r}\exp(im\varphi)\Theta(\theta) \tag{4.2}$$

المشتق الثاني من ψ بالنسبة ل r هو:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}=\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}\exp(im\varphi)\Theta(\theta) \tag{5.2}$$

المشتق الأول من ψ بالنسبة ل θ هو:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta}=\frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta}\exp(im\varphi)R(r) \tag{6.2}$$

المشتق الثاني من ψ بالنسبة ل θ هو:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2}=\frac{\partial^2 \Theta(\theta)}{\partial \theta^2}\exp(im\varphi)R(r) \tag{7.2}$$

المشتق الأول من ψ بالنسبة ل φ هو:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi}=im\exp(im\varphi)R(r)\Theta(\theta) \tag{8.2}$$

المشتق الثاني من ψ بالنسبة ل φ هو:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}=-m^2\exp(im\varphi)R(r)\Theta(\theta) \tag{9.2}$$

نعوض بالمعادلات من (4.2) إلى (9.2) في معادلة شرودينغر (3.2) نجد:

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}\exp(im\varphi)\Theta(\theta)+\frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\exp(im\varphi)\Theta(\theta)+\left(\frac{2\mu E}{\mathrm{h}^2}-\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}V(r)\right)\exp(im\varphi)R(r)\Theta(\theta)+$$

$$\left(\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Theta(\theta)}{\partial\theta^2}\exp(im\varphi)R(r)\right)+\cot\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\exp(im\varphi)R(r)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\exp(im\varphi)R(r)\Theta(\theta)-\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}f(\theta)\exp(im\varphi)R(r)\Theta(\theta)\right)=0 \tag{10.2}$$

نقسم على $\exp(im\varphi)$ نجد:

$$\left[\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}+\left(\frac{2\mu E}{h^2}-\frac{2\mu^2}{h^2}V(r)\right)R(r)\right]\Theta(\theta)+$$

$$\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2\Theta(\theta)}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)-\frac{2\mu^2}{h^2}f(\theta)\Theta(\theta)\right]R(r)=0 \qquad (11.2)$$

نقسم على $R(r)\Theta(\theta)$ فنجد:

$$\frac{1}{R(r)\Theta(\theta)}\left[\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}+\frac{2\mu}{h^2}\left(E-\mu V(r)\right)R(r)\right]\Theta(\theta)+$$

$$\frac{1}{R(r)\Theta(\theta)}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2\Theta(\theta)}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)-\frac{2\mu}{h^2}f(\theta)\Theta f(\theta)\right]R(r)=0 \qquad (12.2)$$

ونضرب المعادلة في r^2 نحصل على:

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

$$-\frac{1}{\Theta(\theta)}\left[\frac{\partial^2\Theta(\theta)}{\partial r^2}+\cot\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)-\frac{2\mu^2}{h^2}f(\theta)\Theta f(\theta)\right] \qquad (13.2)$$

عندما نضع يمين المعادلة (12.2) مساويا ل E_θ نجد معادلتين كالتالي:

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\left[\frac{\partial^2\Theta(\theta)}{\partial r^2}+\cot\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)-\frac{2\mu}{h^2}f(\theta)\Theta(\theta)\right]=E_\theta \qquad (14.2)$$

$$\frac{1}{R(r)}\left[r^2\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}+2r\frac{\partial R(r)}{\partial r}+r^2\frac{2\mu}{h^2}\left(E-\mu V(r)\right)R(r)\right]=-E_\theta \qquad (15.2)$$

لذلك يعطي هذا كمعادلتين المعادلة الزاوية والمعادلة القطرية :

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)-\frac{2\mu^2}{\hbar^2}f(\theta)\Theta(\theta)-E_\theta\Theta(\theta)=0 \qquad (16.2)$$

$$r^2\frac{d^2R(r)}{dr^2}+2r\frac{dR(r)}{dr}+r^2\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-\mu V(r)\right)R(r)+E_\theta R(r)=0 \qquad (17.2)$$

1.2.2 حل المعادلة الزاوية

لدينا كمون الحلقة المضاعف:

$$V(r,\theta)=\mu\left[-\frac{H}{r}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\right] \qquad (18.2)$$

وهو حالة خاصة من كمون لامركزي ل Hautot بحيث:

$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)\gamma=c$ ، $\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)(\beta+\gamma)=a_0^2$ ، $\alpha=0$.

وفي هذه الحالة تصبح المعادلة الزاوية لكمون لا مركزي من الشكل:

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d\Theta}{d\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)-\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\cos^{-2}\theta-E_\theta\Theta(\theta)=0 \qquad (19.2)$$

وعند أخذ المتغيرات التالية:

$$\omega=\cos^2(\theta) \qquad (20.2)$$

$$\Theta=\omega^\rho(1-\omega)^\sigma T \qquad (21.2)$$

نستعمل لحساب باقي أجزاء المعادلة الزاوية نحصل على المتغيرات الجديدة:

$$\sin^2(\theta)=1-\cos^2(\theta)=1-\omega \qquad (22.2)$$

$$\cot\theta = \frac{\sqrt{\omega}}{\sqrt{1-\omega}} \tag{23.2}$$

المشتق الأول ل Θ بالنسبة ل θ من حيث المتغير الجديد ω هو:

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = -\left[2\sqrt{\omega(1-\omega)}\right]\frac{d\Theta}{d\omega} \tag{24.2}$$

المشتق الثاني ل Θ بالنسبة ل θ من حيث المتغير الجديد ω هو:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = (2-4\omega)\frac{d\Theta}{d\omega} + 4\omega(1-\omega)\frac{d^2\Theta}{d\omega^2} \tag{25.2}$$

المشتق الأول $\frac{d\Theta}{d\omega}$ من حيث الدالة الجديدة T هو:

$$\frac{d\Theta}{d\omega} = \left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma} - \sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)T + \omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{dT}{d\omega} \tag{26.2}$$

المشتق الثاني $\frac{d^2\Theta}{d\omega^2}$ من حيث الدالة الجديدة T هو:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\Theta}{d\omega^2} &= \left[\left(\rho(\rho-1)\omega^{\rho-2}(1-\omega)^{\sigma} - 2\rho\sigma\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma-1} + \sigma(\sigma-1)\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)\right]T \\ &+2\left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma} - \sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)\frac{dT}{d\omega} + \omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{d^2T}{d\omega^2}\end{aligned} \tag{27.2}$$

بواسطة تعويض المعادلتين (22.2) و (25.2) في المعادلة (19.2) نجد المعادلة الزاوية الجديدة بالمتغير ω:

$$4\omega(1-\omega)\frac{d^2\Theta}{d\omega^2} + (2-6\omega)\frac{d\Theta}{d\omega} - \left[\frac{1}{1-\omega}\left(m^2 + \alpha\omega + \beta + \frac{\gamma}{\omega}\right) + E_{\theta}\right]\Theta(\theta) = 0 \tag{28.2}$$

وبتعويض المعادلات (21.2)، (26.2) و(27.2) في المعادلة (28.2) نجد:

$$\Big(\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{d^2T}{d\omega^2}+2\left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma}-\sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)\frac{dT}{d\omega}\,4\omega(1-\omega)$$

$$\Big)+\left(\rho(\rho-1)\omega^{\rho-2}(1-\omega)^{\sigma}-2\rho\sigma\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma-1}+\sigma(\sigma-1)\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)T$$

$$+(2-6\omega)\left[\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{dT}{d\omega}+\left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma}-\sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)T\right]$$

$$-\left[\frac{1}{1-\omega}\left(m^2+\alpha\omega+\beta+\frac{\gamma}{\omega}\right)+E_{\theta}\right]\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}T=0 \tag{29.2}$$

وبالقسمة على $4\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}$ تصبح المعادلة من الشكل:

$$\omega(1-\omega)\frac{d^2T}{d\omega^2}+\left[\left(2\rho+\frac{1}{2}\right)-\left(2\rho+2\sigma+\frac{3}{2}\right)\omega\right]\frac{dT}{d\omega}+$$

$$\rho(\rho-1)\omega^{-1}+\rho(\rho-1)+\sigma(\sigma-1)\omega+\frac{1}{2}\rho\omega^{-1}-\frac{1}{2}\sigma(1-\omega)^{-1}+\frac{3}{2}\sigma\omega(1-\omega)^{-1}$$

$$\frac{1}{4(1-\omega)}\left(m^2+\alpha\omega+\beta+\frac{\gamma}{\omega}\right)-2\rho\sigma-\frac{E_{\theta}}{4}-\frac{3}{2}\rho T=0 \tag{30.2}$$

وبوضع:

$$\rho=\frac{1}{4}+\frac{1}{4}(1+\gamma)^{1/2} \tag{31.2}$$

$$\sigma=\frac{1}{2}\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2} \tag{32.2}$$

نحصل على المعادلة الفوق الهندسية التالية:

$$\omega(1-\omega)T''+\left[\left(2\rho+\frac{1}{2}\right)-\left(2\rho+2\sigma+\frac{3}{2}\right)\omega\right]T'$$

$$-\frac{1}{4}\left[E_\theta+8\rho\sigma+2\rho+2\alpha+2\gamma+m^2+\beta\right]T=0 \qquad (33.2)$$

وحلها هو دالة فوق الهندسية:

$$T=\mathrm{N}_\theta F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\omega\right) \qquad (34.2)$$

من شكل المعادلة فوق الهندسية:

$$\frac{1}{4}\left[E_\theta+8\rho\sigma+2\rho+2\alpha+2\gamma+m^2+\beta\right]=(-2\rho)(2\rho+2\sigma) \qquad (35.2)$$

فهي تتطلب:

$$E_\theta=\frac{1}{4}+\alpha+\left[2l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2}\right]^2 \qquad (36.2)$$

وبذلك نحصل علة دالة الموجة الزاوية عند تعويض الدالة T في المعادلة $\Theta=\omega^\rho(1-\omega)^\sigma T$ نجد:

$$\Theta=\mathrm{N}_\theta\omega^\rho(1-\omega)^\sigma F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\omega\right) \qquad (37.2)$$

وبوضع: $\omega=\cos^2\theta$ تصبح المعادلة من الشكل:

$$\Theta=\mathrm{N}_\theta\left(\cos\theta\right)^{2\rho}\left(1-\cos^2\theta\right)^\sigma$$

$$F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\cos^2\theta\right) \qquad (38.2)$$

حيث: $\sigma=\frac{1}{2}\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2}$ و $\rho=\frac{1}{4}+\frac{1}{4}(1+\gamma)^{1/2}$

وتكتب الطاقة الزاوية على النحو التالي:

$$E_\theta=\frac{1}{4}+\alpha+\left[2l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2}\right]^2 \qquad (39.2)$$

$l=0,1,2.....,\mathrm{m}=0,\pm1,\pm2,.....$

وهذا الحل الخاص بكمون لا مركزي أما كمون الحلقة المضاعف فسنعوض بالثوابت السابقة:

$$\alpha=0 \quad ، \quad \left(\frac{\mathrm{h}^2}{2\mu^2}\right)(\beta+\gamma)=a_0^2 \quad ، \quad \left(\frac{\mathrm{h}^2}{2\mu^2}\right)\gamma=c$$

ومنه: $\gamma=\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)c$ ، $\beta=\left(a_0^2-c\right)\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)$

وبالتعويض في المعادلتين نجد:

$$\Theta=\mathrm{N}_\theta\left(\cos\theta\right)^{2\rho}\left(1-\cos^2\theta\right)^\sigma$$

$$F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)c\right)^{1/2}+\left(m^2+\left(a_0^2-c\right)\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)+\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)c\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)c\right)^{1/2};\cos^2\theta\right) \qquad (40.2)$$

أي:

$$\Theta=\mathrm{N}_\theta\left(\cos\theta\right)^{2\rho}\left(1-\cos^2\theta\right)^\sigma$$

$$F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)c\right)^{1/2}+\left(m^2+a_0^2\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}\right)c\right)^{1/2};\cos^2\theta\right) \qquad (41.2)$$

حيث: $\sigma=\frac{1}{2}\left(m^2+\left(a_0^2-c\right)\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2}=\frac{1}{2}\left(m^2+a_0^2\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)\right)^{1/2}$ و

$$\rho=\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2}$$

وتكتب الطاقة الزاوية على النحو التالي:

$$E_\theta=\frac{1}{4}+\left[2l+1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2}+\left(m^2+\left(a_0^2-c\right)\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2}\right]^2 \qquad (42.2)$$

2.2.2 حل المعادلة القطرية

من المعادلة التالية: [9]

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu R(r)}\frac{\partial r^2}{\partial r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}-Hr-Er^2=E_\theta \qquad (43.2)$$

لدينا: $A'=-\frac{2\mu E_\theta}{\hbar^2}$ ، $A'=l\,(l+1)$ ومنه:

$$E_\theta=\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left(l\,(l+1)\right) \qquad (44.2)$$

نضرب في $R(r)$ ونقسم على r^2:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial r^2}{\partial r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}-\frac{H}{r}R(r)-ER(r)=\frac{E_\theta}{r^2}R(r) \qquad (45.2)$$

يمكننا كتابة هذه المعادلة من الشكل:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial r^2}{\partial r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}-\left(\frac{H}{r}+E-\frac{E_\theta}{r^2}\right)R(r)=0 \qquad (46.2)$$

لدينا الجهد الفعال لذرة الهيدروجين يعطى بالعبارة:

$$V_{eff}=\frac{E_{\theta}}{r^2}-\frac{H}{r} \tag{47.2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial r^2}{\partial r}\frac{\partial R(\mathrm{r})}{\partial r}-\left(E-V_{eff}\right)R(r)=0 \tag{48.2}$$

نضرب المعادلة في $-\frac{2\mu}{\hbar^2}$ فنجد:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial r^2}{\partial r}\frac{\partial R(\mathrm{r})}{\partial r}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-V_{eff}\right)R(r)=0 \tag{49.2}$$

بتغيير الدالة $R(r)$:

$$\mathrm{R}(r)=\frac{\mathrm{X}(r)}{r} \tag{50.2}$$

ونعوض في المعادلة ونبسطها:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\left(\frac{X(r)}{r}\right)\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V_{eff}\right]\frac{X(r)}{r}$$

$$=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\left(\frac{1}{r}\frac{dX(r)}{dr}-\frac{1}{r^2}X(r)\right)\right]+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V_{eff}\right]\frac{X(r)}{r}$$

$$=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\left(\frac{1}{r}\frac{d\mathrm{X}(r)}{dr}-\frac{1}{r^2}\mathrm{X}(r)\right)\right]+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\mathrm{E}-V_{eff}\right]\frac{\mathrm{X}(r)}{r}$$

$$=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\mathrm{X}(r)}{dr}-\mathrm{X}(r)\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\mathrm{E}-V_{eff}\right]\frac{\mathrm{X}(r)}{r}$$

$$=\frac{1}{r^2}\left(\frac{d\mathrm{X}(r)}{dr}+r\frac{d^2\mathrm{X}(r)}{dr^2}-\frac{d\mathrm{X}(r)}{dr}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\mathrm{E}-V_{eff}\right]\frac{\mathrm{X}(r)}{r}$$

$$=\frac{d^2X(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V_{eff}\right]X(r)=0 \qquad (51.2)$$

أي:

$$\frac{d^2X(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}l(l+1)-\frac{H}{r}\right]X(r)=0 \qquad (52.2)$$

بوضع الثوابت: $A=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ ، $B=\frac{2\mu H}{\hbar^2}$ ، $\omega=\frac{2\mu}{\hbar^2}E_\theta$ فتصبح المعادلة من الشكل:

$$\frac{d^2X(r)}{dr^2}-\left(A-\frac{B}{r}+\frac{\omega}{r^2}\right)X(r)=0 \qquad (53.2)$$

لإعطاء الطاقة الحركية السالبة للجسيمات في المالانهاية فإنه نبحث عن السلوك المقارب ل $X(r)$ عندما $r\to\infty$ ، بحيث تكون الطاقات الكامنة هنا معدومة ومنه:

$$\frac{d^2X(r)}{dr^2}-AX(r)=0 \qquad (54.2)$$

وحل هذه المعادلة يكون من الشكل:

$$X(r)=\alpha e^{r\sqrt{A}}+\beta e^{-r\sqrt{A}} \qquad (55.2)$$

نضع $\alpha=0$ حتى تحقق الدالة شرط الإستنظام، أي تكون من الشكل:

$$X(r)=\beta e^{-r\sqrt{A}} \qquad (56.2)$$

للبحث عن السلوك المقارب ل $X(r)$ لما $r\to 0$ نضرب المعادلة (53.2) في r^2 فنجد:

$$r^2\frac{d^2X(r)}{dr^2}-\left(Ar^2-Br+\omega\right)X(r)=0 \qquad (57.2)$$

فعندما تكون $r \to 0$ نجد:

$$r^2 \frac{d^2 \mathrm{X}(r)}{dr^2} - \omega \mathrm{X}(r) = 0 \tag{58.2}$$

وحلها يكون من الشكل:

$$\mathrm{X}(r) = r^{\varepsilon} \tag{59.2}$$

بإشتقاق الحل ونعوضه في المعادلة :

$$r^2 \varepsilon(\varepsilon - 1) r^{\varepsilon - 2} - \omega r^{\varepsilon} = 0 \tag{60.2}$$

$$\varepsilon(\varepsilon - 1) r^{\varepsilon - 2} - \omega r^{\varepsilon - 2} = 0 \tag{61.2}$$

$$\varepsilon(\varepsilon - 1) - \omega = 0 \tag{62.2}$$

$$\varepsilon(\varepsilon - 1) = \omega = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{\theta} \to \varepsilon^2 + \varepsilon - \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{\theta} = 0 \tag{63.2}$$

حل معادلة من الدرجة الثانية: $\Delta = 1 + 4\frac{2\mu}{\hbar^2} E_{\theta} \succ 0$ ولها حلين:

$$\varepsilon_1 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\frac{2\mu}{\hbar^2} E_{\theta}}}{2} \quad ، \quad \varepsilon_2 = \frac{-1 - \sqrt{1 + 4\frac{2\mu}{\hbar^2} E_{\theta}}}{2}$$

ومن أجل تحقق شرط محدودية الدالة الموجية نأخذ الحل $\varepsilon_1 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\frac{2\mu}{\hbar^2} E_{\theta}}}{2}$ ، ومنه تكون المعادلة(59.2) من الشكل:

$$\mathrm{X}(r) = r^{\frac{-1 + \sqrt{1 + 4\frac{2\mu}{\hbar^2} E_{\theta}}}{2}} \tag{64.2}$$

فيكون الحل العام كما يلي:

$$\mathrm{X}(r)=r^{\frac{-1+\sqrt{1+4\frac{2\mu}{\mathrm{h}^2}E_\theta}}{2}}e^{-r\sqrt{\mathrm{A}}}F(r) \tag{65.2}$$

باشتقاق معادلة الحل (65.2) ونعوضه في المعادلة (53.2) نجد:

$$\frac{d^2F(r)}{dr^2}+2\sqrt{\mathrm{A}}\left(\frac{-1+\sqrt{1+4\frac{2\mu}{\mathrm{h}^2}E_\theta}}{2r\sqrt{\mathrm{A}}}-1\right)\frac{dF(r)}{dr}+\frac{\mathrm{B}-\sqrt{\mathrm{A}}\left(-1+\sqrt{1+4\frac{2\mu}{\mathrm{h}^2}E_\theta}\right)}{r}F(r)=0 \tag{66.2}$$

بتغيير متغير:

$$2\sqrt{\mathrm{A}}r=\rho\rightarrow\frac{d}{dr}=2\sqrt{\mathrm{A}}\frac{d}{d\rho}\rightarrow\frac{d^2}{dr^2}=4\mathrm{A}\frac{d^2}{d\rho^2} \tag{67.2}$$

بالتعويض نجد:

$$4\mathrm{A}\frac{d^2F(\rho)}{dr^2}+4\mathrm{A}\left(\frac{2\varepsilon_1}{\rho}-1\right)\frac{dF(\rho)}{d\rho}+\frac{2\sqrt{\mathrm{A}}\mathrm{B}-4\mathrm{A}\varepsilon_1}{\rho}F(\rho)=0 \tag{68.2}$$

$$\frac{d^2F(\rho)}{dr^2}+\left(\frac{2(1+1)}{\rho}-1\right)\frac{dF(\rho)}{d\rho}+\frac{\left(\frac{\mathrm{B}}{2\sqrt{\mathrm{A}}}-\varepsilon_1\right)}{\rho}F(\rho)=0 \tag{69,2}$$

نضع الثوابت التالية: $a=\varepsilon_1-\frac{\mathrm{B}}{2\sqrt{\mathrm{A}}}$ ، $b=2\varepsilon_1$ وبتعويض في المعادلة :

$$\frac{d^2F(\rho)}{dr^2}+\left(\frac{b}{\rho}-1\right)\frac{dF(\rho)}{d\rho}-\frac{a}{\rho}F(\rho)=0 \tag{70.2}$$

حل هذه المعادلة التفاضلية على شكل سلسلة ذات أسس متزايدة تكتب كما يلي:

$$F(\rho)=\sum_{k=0}^{\infty}C_k\rho^k \tag{71.2}$$

نقوم باشتقاق الحل ونعوضه في المعادلة (70.2) نجد:

$$\frac{dF(\rho)}{d\rho}=\sum_{k=1}^{\infty}C_k k\rho^{k-1}\Rightarrow\frac{d^2F(\rho)}{d\rho^2}=\sum_{k=2}^{\infty}C_k k(k-1)\rho^{k-2} \tag{72.2}$$

$$\sum_{k=2}^{\infty}C_k k(k-1)\rho^{k-2}+\left(\frac{b}{\rho}-1\right)\sum_{k=1}^{\infty}C_k k\rho^{k-1}-\frac{a}{\rho}\sum_{k=0}^{\infty}C_k\rho^k=0 \tag{73.2}$$

$$\sum_{k=2}^{\infty}C_k k(k-1)\rho^{k-2}+c\sum_{k=1}^{\infty}C_k k\rho^{k-2}-\sum_{k=1}^{\infty}C_k k\rho^{k-1}-a\sum_{k=0}^{\infty}C_k\rho^{k-1}=0 \tag{74.2}$$

وهذه بعض المعاملات الأساسية:

$$b_1=b_0\frac{a}{b}\text{،}b_2=\frac{b_1}{2}\frac{a+1}{b+1}\text{،}b_3=\frac{b_2}{3}\frac{a+2}{b+2}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots b_m=\frac{b_{m-1}}{m}\frac{a+m-1}{b+m-1} \tag{75.2}$$

ومنه:

$$F(\rho)=b_0\left[1+\frac{a}{b}\rho+\frac{a}{b}\frac{a+1}{b+1}\frac{\rho^2}{2}+\frac{a}{b}\frac{a+1}{b+1}\frac{a+2}{b+2}\frac{\rho^3}{2\times3}\ldots+\frac{(a+m-1)!\rho^m}{(b+m-1)!\mathrm{m}!}\right] \tag{76.2}$$

ومن هنا تكون الدالة تؤول إلى المالانهاية ولكن بما أن الدالة محدودة فإنه يجب التوقف عند $m_{\max}$،

وبالتالي نحصل على:

$$a+m_{\max}=0\rightarrow\varepsilon_1-\frac{\mathrm{B}}{2\sqrt{\mathrm{A}}}+m_{\max}=0 \tag{77.2}$$

$$\mathrm{B}=2\sqrt{\mathrm{A}}(m+\varepsilon_1) \tag{78.2}$$

بتعويض الثوابت A ،B نجد:

$$2\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\left(m_{\max}+\varepsilon_1\right)=\frac{2\mu H}{\hbar^2} \tag{79.2}$$

بتربيع الطرفين نحصل على:

$$-\frac{8\mu E}{\hbar^2}\left(m_{\max}+\varepsilon_1\right)^2=\frac{4\mu^2 H^2}{\hbar^4} \tag{80.2}$$

$$E=-\frac{\mu H}{2\hbar\left(m_{\max}+\varepsilon_1\right)^2}=-\frac{\mu}{2\left(m_{\max}+\varepsilon_1\right)^2}\left(\frac{H}{\hbar}\right) \tag{81.2}$$

بوضع $n=\left(m_{\max}+\varepsilon_1\right)$ نجد:

$$E_n=-\frac{\mu}{2n^2}\left(\frac{H}{\hbar}\right)^2=-\frac{\mu}{\left(-1+\sqrt{1+4\frac{2\mu}{\hbar^2}E_\theta}\right)^2}\left(\frac{H}{\hbar}\right)^2 \tag{82.2}$$

ومن خلال عبارة الطاقة لذرة الهيدروجين نستنتج أنها تتعلق ب n فقط ولا تتعلق ب l، m أي أن هناك العديد من الحلات الكمية المختلفة التي لها نفس قيمة الطاقة E.

بمطابقة المعادلة (70.2) مع معادلة كثير حدود Laguerre المعمم التالية:

$$r\frac{d^2L_K^N(r)}{dr^2}+(N+1-r)\frac{dL_K^N(r)}{dr}-(K-N)L_K^N(r)=0 \tag{83.2}$$

نجد أن الدالة هي كثير حدود Laguerre المعمم L_{n+1}^{2l+1}، بتعويض الثوابت والتبسيط نجد:

$$R_{nl}(r)=N_{nl}\left(\frac{2Z}{na_0}r\right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}}L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2Z}{na_0}r\right) \tag{84.2}$$

ولتحديد الثابت N_{nl} نستعمل شرط التنظيم للدالة القطرية $R_{nl}(r)$:

$$\int_0^{\infty} R_{nl}(r)R_{nl}^*(r)r^2dr=1 \tag{85.2}$$

وبادخال المتغير ρ نجد:

$$\int_0^{\infty}\left(\rho^{2l}\right)e^{-\rho}\left[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\right]^2\rho^2d\rho=\frac{2n\left[(n+l)!\right]^3}{(n-l-1)!} \tag{86.2}$$

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

$$N_{nl}=\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+l)!\right]^3}} \tag{87.2}$$

إذا نكتب الدالة القطرية كما يلي :

$$R(r)_{nl}=\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+l)!\right]^3}}\left(\frac{2}{na_0}r\right)^{l}e^{-\frac{r}{na_0}}L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2}{na_0}r\right) \tag{88.2}$$

ومن خلال المعادلات السابقة يمكننا كتابة دالة الموجة كما يلي:

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+l)!\right]^3}}\left(\frac{2}{na_0}r\right)^{l}e^{-\frac{r}{na_0}}L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2}{na_0}r\right)\cdot \mathrm{N}_{\theta}(\cos\theta)^{2\rho}\left(1-\cos^2\theta\right)^{\sigma}$$

$$F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2}+\left(m^2+a_0^2\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2};\cos^2\theta\right).\exp(im\varphi) \tag{89.2}$$

وعبارة الطاقة:

$$\mathrm{E}_n=-\mu\left(\frac{H}{\hbar}\right)^2\left(-1+\sqrt{1+4\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{1}{4}+\left[2l+1+\frac{1}{2}\left(1+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2}+\left(m^2+\left(a_0^2-c\right)\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}\right)c\right)^{1/2}\right]^2\right)}\right)^{-2} \tag{90.2}$$

الفصل الثالث: حل معادلة شرودينغر

لكمون كراتزر

1.3 مقدمة

تم تقديم الدراسة لكمون كراتزر في أطياف النطاق للجزيئات ثنائية الذرة [11] [10] ومنذ ذلك الحين جذب الكثير من الاهتمام بسبب تطبيقها في مختلف مجالات الفيزياء والكيمياء مثل: الفيزياء النووية [12] والجزيئية [13]وكيمياء الكم [14] و الفيزياء الكيميائية [15] حتى أنه يستخدم لدراسة الخصائص البصرية في النشاط الكمومي لأشباه الموصلات [16] وسنرى في هذا الفصل حل معادلة شرودينغر بواسطة هذا الكمون [17] [18].

2.3 حل معادلة شرودينغر لكمون كراتزر

بالتعويض في معادلة شرودينغر نجد [9]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}Y(\theta,\varphi)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}R(r)\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}R(r)\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}\right)-\frac{H}{r}R(r)\cdot Y(\theta,\varphi)$$
$$=\mathrm{E}\cdot R(r)\cdot Y(\theta,\varphi) \qquad (1.3)$$

وبعد فصل المتغيرات لدالة الموجة $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}=R(r)\cdot Y(\theta,\varphi)$ نتحصل على نفس المعادلات في الفصل الثاني.

1.2.3 حل المعادلة الزاوية

$$\frac{\hbar^2}{2mY(\theta,\varphi)\sin\theta}\frac{\partial\sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}+\frac{\hbar^2}{2mY(\theta,\varphi)\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}=E_\theta \qquad (2.3)$$

نضرب المعادلة الزاوية في $\frac{2m}{\hbar^2}$ ومع تبسيطها نجد:

$$\frac{1}{Y(\theta,\varphi)\sin\theta}\frac{\partial\sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}+\frac{1}{Y(\theta,\varphi)\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}-\frac{2mE_\theta}{\hbar^2}=0 \qquad (3.3)$$

وبوضع: $A' = -\frac{2mE_\theta}{\hbar^2}$ نتحصل على:

$$\frac{1}{Y(\theta,\varphi)\sin\theta}\frac{\partial \sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}+\frac{1}{Y(\theta,\varphi)\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}+A'=0 \tag{4.3}$$

نضرب المعادلة (4.3) في $\sin^2\theta$:

$$\frac{\sin\theta}{Y(\theta,\varphi)}\frac{\partial \sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}+\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}+A'\sin^2\theta=0 \tag{5.3}$$

باستخدام فصل المتغيرات للمرة الثانية أي:

$$Y(\theta,\varphi)=y(\theta)\cdot\Phi(\varphi) \tag{6.3}$$

بتعويض المعادلة (6.3) في (5.3) وتبسيطها نجد:

$$\frac{\sin\theta}{y(\theta)}\frac{\partial \sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial y(\theta)}{\partial\theta}+\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}+A'\sin^2\theta=0 \tag{7.3}$$

المعادلة (7.3) لا يمكن أن تتحقق إلا إذا كان:

$$\frac{\sin\theta}{y(\theta)}\frac{\partial \sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial y(\theta)}{\partial\theta}+A'\sin^2\theta=B \tag{8.3}$$

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=-B \tag{9.3}$$

حل الجزء الخاص بالزاوية φ

نضرب المعادلة (9.3) في $\Phi(\varphi)$ ونبسطها فنجد:

$$\frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}+B\Phi(\varphi)=0 \tag{10.3}$$

ولتكن $B=m^2$ فنكتب المعادلة (10.3):

$$\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}+m^2\Phi(\varphi)=0 \tag{11.3}$$

وهي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية حلها من الشكل:

$$\Phi(\varphi)=C_1e^{im\varphi}+C_2e^{-im\varphi} \tag{12.3}$$

بحيث: $m\in ¢$.

نضع $C_2=0$ حتى لا يغير الإلكترون اتجاه حركته.

أي تكتب المعادلة (12.3) من الشكل:

$$\Phi(\varphi)=C_1e^{im\varphi} \tag{13.3}$$

ولمعرفة الثابت C_1 نستعمل شرط الإستنظام لتكون الدالة $\Phi(\varphi)$ مستنظمة، ولدينا الزاوية φ تكون في المجال $[0,2\pi]$.

$$\int_0^{2\pi}\Phi(\varphi)\Phi^*(\varphi)\,d\varphi=1 \tag{14.3}$$

$$\int_0^{2\pi}C_1^2e^{im\varphi}e^{-im\varphi}\,d\varphi=1 \tag{15.3}$$

ومنه :

$$C_1=\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{16.3}$$

وبتعويض المعادلة (16.3) في (13.3) نجد:

$$\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \tag{17.3}$$

ولكي تكون الدالة الموجية أحادية القيمة يجب أن تكون الدالة عند الزاويتين φ و $\varphi+2\pi$ متساوية القيمة أي أن:

$$\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi) \tag{18.3}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im(\varphi+2\pi)} \tag{19.3}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}e^{im2\pi} \tag{20.3}$$

$$\Rightarrow e^{im2\pi}=1 \tag{21.3}$$

ومنه تأخذ m القيم التالية: $m=0,\pm1,\pm2,\pm3...$ وهو ما يسمى بالعدد الكمي المغناطيسي.

حل الجزء الخاص ب θ

أي المعادلة(8.3):

$$\frac{\sin\theta}{y(\theta)}\frac{\partial\sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial y(\theta)}{\partial\theta}+A'\sin^2\theta=B=m^2 \tag{8.3}$$

$$\frac{\sin\theta}{y(\theta)}\frac{\partial\sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial y(\theta)}{\partial\theta}+A'\sin^2\theta-m^2=0 \tag{22.3}$$

بضرب المعادلة (22.3) في $y(\theta)$ والقسمة على $\sin^2\theta$ نجد:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\sin\theta}{\partial\theta}\frac{\partial y(\theta)}{\partial\theta}+\left(A'-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)y(\theta)=0 \tag{23.3}$$

لدينا:

$$\frac{d\cos\theta}{d\theta}=-\sin\theta \Rightarrow d\cos\theta=-\sin\theta d\theta \tag{24.3}$$

$$\Rightarrow -\frac{d}{d\cos\theta}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta} \tag{25.3}$$

نضرب المعادلة (25.3) في $\sin^2\theta$ فنجد:

$$-\sin^2\theta\frac{d}{d\cos\theta}=\sin\theta\frac{d}{d\theta} \tag{26.3}$$

$$\sin^2\theta+\cos^2\theta=1 \Rightarrow \sin^2\theta=1-\cos^2\theta \tag{27.3}$$

نعوض المعادلات (25.3)، (26.3)، (27.3) في المعادلة (23.3) فنجد:

$$\frac{d}{d\cos\theta}\left(\sin^2\theta\frac{dy(\theta)}{d\cos\theta}\right)+\left(A'-\frac{m^2}{\left(1-\cos^2\theta\right)}\right)y(\theta)=0 \tag{28.3}$$

نقوم بتغيير متغير ونضع: $x=\cos\theta$ ، $P(x)=y(\theta)$. فتصبح المعادلة (28.3) من الشكل:

$$\frac{d}{dx}\left(\left(1-x^2\right)\frac{dP(x)}{dx}\right)+\left(A'-\frac{m^2}{\left(1-x^2\right)}\right)P(x)=0 \tag{29.3}$$

في الحالة العامة لهذه المعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية حلان مستقلان يصبحان لا نهاية من أجل $x=\pm1$ ، التابع الموجي يكون غير معدوم عند مسافة غير محددة $r\to\infty$ ، وتعرف هذه المعادلة بمعادلة ليجندر والحل العام لها غير مقبول فيزيائيا الا اذا كان: $A'=l(l+1)$ أي $E_\theta=\frac{-\hbar^2}{2m}\left(l(l+1)\right)$ بحيث: $l\geq0$.أحد هذه الحلول يكون معرف عند كل قيم x .

من أجل $m=0$ فإن $P(x)$ ستكون كثيرة الحدود لليجندر.

من أجل $m \neq 0$ حل دائما معرف، لن يكون ممكنا إلا إذا كانت $|m| \leq l$ والحل يكون كثيرات الحدود

للجندر المرافقة $P_l^{|m|}(x)$ بحيث:

$$P_l^{|m|} = \left(1-x^2\right)^{|m|/2} \cdot \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} \cdot P_l(x) \qquad (30.3)$$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l \, l!} \frac{d^l}{dx^l}\left(x^2-1\right)^l \qquad (31.3)$$

فيكتب الحل من الشكل:

$$y(\theta) = \mathrm{N}_{lm} \cdot \mathrm{P}_l^{|m|}(\cos\theta) \qquad (32.3)$$

إذا حل الجزء المتعلق بالزوايا يكون:

$$Y(\theta,\varphi) = \mathrm{N}_{lm} \cdot \mathrm{P}_l^{|m|}(\cos\theta) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \qquad (33.3)$$

بحيث:

N_{lm}ثابت التنظيم نحصل عليه من خلال شرط الاستنظام لدالة:

$$\iint Y_{lm}(\theta,\varphi) Y_{lm}^*(\theta,\varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = 1 \qquad (34.3)$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \left(\frac{\mathrm{N}_{lm}}{\sqrt{2\pi}}\right)^2 e^{im\varphi} \cdot e^{-im\varphi} \left|\mathrm{P}_l^m(x)\right|^2 d\theta = 1 \qquad (35.3)$$

لدينا:

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \left|\mathrm{P}_l^m(x)\right|^2 d\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta u \qquad (36.3)$$

بتعويض المعادلة (36.3) في المعادلة (35.3) نجد:

$$2\pi\frac{N_{lm}^2}{2\pi}\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta u=1 \qquad (37.3)$$

ومنه:

$$N_{lm}=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \qquad (38.3)$$

وبالتعويض في المعادلة (33.3) نجد من أجل $m\rangle 0$:

$$Y(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \qquad (39.3)$$

$$Y(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi} \qquad (40.3)$$

ومن أجل $m\langle 0$:

$$Y_l^{-m}=(-1)^m\,Y_l^{m^*} \qquad (41.3)$$

2.2.3 المعادلة القطرية

لحل المعادلة القطرية نأخذ المعادلة المتحصل عليها في الفصل السابق ونقسمها على r^2 فنجد:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}E+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}H\right)\frac{1}{r}-\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)\frac{1}{r^2}\right]R(r)=0 \qquad (42.3)$$

من أجل حل هذه المعادلة نقوم بالتغيير التالي:

$$\rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}Er} \qquad (43.3)$$

نحسب مشتق الدالة $R(r)$ في المعادلة القطرية بدلالة المشتقات للمتغير الجديد ρ:

يمكن كتابة المشتق الأول $\frac{dR(r)}{dr}$ بالشكل التالي:

$$\frac{dR(r)}{dr}=\frac{dR(r)}{d\rho}\frac{d\rho}{dr}=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}\,\frac{dR(r)}{d\rho} \tag{44.3}$$

ويمكن كتابة المشتق الثاني بالشكل:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}=-\frac{8\mu}{\hbar^2}E\frac{d^2R(r)}{d\rho^2} \tag{45.3}$$

وبهذا التعبير تصبح المعادلة القطرية على النحو التالي:

$$-\frac{8\mu}{\hbar^2}E\frac{d^2R(r)}{d\rho^2}+\frac{2\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}}{\rho}\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}\,\frac{dR(r)}{d\rho}+$$

$$\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}E+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}H\right)\frac{\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}}{\rho}-\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)\left(\frac{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}{\rho^2}\right)\right]R(r)=0 \tag{46.3}$$

وبقسمة المعادلة (23.3) على $-\frac{8\mu}{\hbar^2}E$ نجد $\rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}\,r$:

$$\frac{d^2R(r)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR(r)}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}-\left(\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H\right)\frac{1}{\rho}-\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]R(r)=0 \tag{47.3}$$

نضع: $\beta(\beta+1)=\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta$ ، $\alpha=\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H$

فنحصل على المعادلة القطرية التالية:

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho}-\left[\frac{1}{4}-\frac{\alpha}{\rho}+\beta(\beta+1)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]R(\rho)=0 \quad (48.3)$$

لحل هذه المعادلة نضع:

$$R(\rho)=\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho) \quad (49.3)$$

علينا حساب مشتقات الدالة الجديدة بدلالة المتغير الجديد

المشتق الأول:

$$\frac{dR}{d\rho}=\frac{d\left(\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)\right)}{d\rho}=\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)-\frac{1}{2}\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)+\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\frac{df(\rho)}{d\rho} \quad (50.3)$$

المشتق الثاني:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}=\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2}+\left(2\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}-\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)\frac{df(\rho)}{d\rho}+$$

$$\left(\beta(\beta-1)\rho^{\beta-2}e^{-\frac{\rho}{2}}-\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}+\frac{1}{4}\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)f(\rho) \quad (51.3)$$

نعوض المعادلتين (50.3) و(51.3) في المعادلة (48.3) نجد:

$$\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2}+\left(2\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}-\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)\frac{df(\rho)}{d\rho}+$$

$$\left(\beta(\beta-1)\rho^{\beta-2}e^{-\frac{\rho}{2}}-\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}+\frac{1}{4}\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)f(\rho)$$

$$+\frac{2}{\rho}\left(\beta f(\rho)-\frac{1}{2}\rho f(\rho)+\rho\frac{df(\rho)}{d\rho}\right)-\left[\frac{1}{4}-\frac{\alpha}{\rho}+\beta(\beta+1)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)=0 \quad (52.3)$$

بالقسمة على $\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}$ نجد:

$$\rho\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2}+(2\beta-\rho)\frac{df(\rho)}{d\rho}+\left(\beta(\beta-1)\rho^{-1}-\beta+\frac{1}{4}\rho\right)f(\rho)+$$

$$+\frac{2}{\rho}\left(\beta f(\rho)-\frac{1}{2}\rho f(\rho)+\rho\frac{df(\rho)}{d\rho}\right)-\left[\frac{1}{4}-\frac{\alpha}{\rho}+\beta(\beta+1)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]\rho f(\rho)=0 \qquad (53.3)$$

بعد تبسيط المعادلة نحصل على:

$$\rho\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2}+(2\beta+2-\rho)\frac{df(\rho)}{d\rho}+(\alpha-\beta-1)f(\rho) \qquad (54.3)$$

المعادلة الأخيرة هي معادلة Laguerre التفاضلية المعروفة وحلها هو دالة فوق الهندسية المتجمعة:

$$f(\rho)=N_1F_1(\alpha-\beta-1,2\beta+2,\rho) \qquad (55.3)$$

من السلوك المقارب للدالة المتجمعة $\left(r\to\infty\Rightarrow N_1F_1=0\right)$ مما يؤدي هذا إلى $\psi\to 0$ حيث $r\to\infty$

نجد الشرط العام للتكميم:

$$\alpha-\beta-1=n_r,\mathrm{n}_r=1,2,3,.... \qquad (56.3)$$

أي:

$$\alpha=n_r+\beta+1 \qquad (57.3)$$

نعوض $\alpha=\sqrt{-\frac{\mu}{2\mathrm{h}^2E}}\mu H$ ، $\rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\mathrm{h}^2}Er}$ و $\beta=\alpha-n_r-1$ ومنه:

$$f(r)=N_{r1}F_1\left(n_r,2\beta+2,\sqrt{-\frac{8\mu}{\mathrm{h}^2}Er}\right) \qquad (58.3)$$

$N_{r1}F_1\left(n_r,-2\left(\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H+n_r\right),\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)$ يمكن كتابتها ككثير حدود Laguerre من الدرجة n_r:

$$L_{n_r}^{2\beta+2}\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)=N_{r1}F_1\left(n_r,-2\left(\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H+n_r\right),\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right) \qquad (59.3)$$

من المعادلة (49.3) لدينا:

$$R(r)=N_r\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)_1$$

$$F_1\left(n_r,1+\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)},\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right) \qquad (60.3)$$

حيث:

$\beta=\alpha-n_r-1, \beta(\beta+1)=\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta$ و $\rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er$ ، $\alpha=-\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H$

باستخدام هذه العبارات نجد عبارة الطاقة:

$$\alpha=-\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H \Rightarrow \alpha^2=-\frac{\mu^3}{2\hbar^2E}H^2 \Rightarrow E=-\frac{\mu^3}{2\hbar^2\alpha^2}H^2 \qquad (61.3)$$

بتعويض $\alpha=n_r+\beta+1$ فتصبح عبارة الطاقة من الشكل :

$$E=-\frac{\mu^3}{2\hbar^2\left(n_r+\beta+1\right)^2}H^2 \qquad (62.3)$$

علينا حساب β من المعادلة التالية:

$$\beta(\beta+1)=\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta \Rightarrow \beta^2+\beta-\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)=0 \tag{63.3}$$

هذه المعادلة لها حلين هما:

$$\beta_1=-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)} \tag{64.3}$$

$$\beta_2=-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)} \tag{65.3}$$

الحل المقبول هو الحل الأول β_1 نستخدمه في عبارة الطاقة (62.3) فنجد:

$$E_{n_r}=-\frac{\mu^3H^2}{2h^2}\left(n_r+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)}\right)^{-2} \tag{66.3}$$

وعبارة الدالة القطرية من دالة الموجة تكون:

$$R(r)=N_r\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r+\frac{h^2}{2m}(l(l+1))\right)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right)_1$$

$$F_1\left(n_r,1+\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r\right)+\frac{h^2}{2m}(l(l+1))},\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right) \tag{67.3}$$

نعوض عبارة E_θ في معادلة الطاقة (66.3) لنجد العبارة النهائية لطاقة :

$$E_{n_r}=-\frac{\mu^3H^2}{2h^2}\left(n_r+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\mu^2}{h^2}D_r+\frac{h^2}{2m}(l(l+1))}\right)^{-2} \tag{68.3}$$

$m=0,\pm1,\pm2,....$ و $n_r=0,1,2,....,l=0,1,2,....$

ومنه نستنتج الدالة الموجية لنظامنا $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi)$ من المعادلة الزاوية (40.3) والمعادلة القطرية (67.3) نجد:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=N_r\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}Er}\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r+\frac{\hbar^2}{2m}(l(l+1))\right)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}Er}\right)_1$$

$$F_1\left(n_r,1+\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r\right)+\frac{\hbar^2}{2m}(l(l+1))},\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}Er}\right).(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi}\qquad(69.3)$$

الفصل الرابع : حل معادلة شرودينغر لكمون الحلقة المضاعف زائد كمون كراتزر

1.4 مقدمة

في هذا الفصل سنعمم التطبيقات التي قمنا بها سابقا، وذلك عن طريق حل معادلة شرودينغر العددية بوجود كمون الحلقة المضاعف زائد كمون كراتزر لحساب دالة الموجة وطيف الطاقة المقابل لهذه الحالة.

2.4 حل معادلة شرودينغر لكمون كراتزر زائد الحلقة المضاعف

نكتب معادلة شرودينغر على الشكل التالي:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r,\theta)\right]\psi = E\Psi \qquad (1.4)$$

ونقوم بنفس الخطوات التي قمنا بها في الفصلين السابقين فنتحصل على المعادلتين الزاوية والقطرية على التوالي:

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + \cot\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta) - \frac{2\mu^2}{\hbar^2}f(\theta)\Theta(\theta) - E_\theta\Theta(\theta) = 0 \qquad (2.4)$$

$$r^2\frac{d^2R(r)}{dr^2} + 2r\frac{dR(r)}{dr} + r^2\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - \mu V(r)\right)R(r) + E_\theta R(r) = 0 \qquad (3.4)$$

استبدلنا المشتق الجزئي ∂ بالمشتق الكلي d لأن الدالتين $R(r)$ و$\Theta(\theta)$ لهما متغير واحد، وعلينا حل المعادلة الزاوية (2.4) لإيجاد E_θ ثم نستخدم هذه القيم الذاتية الزاوية لحل المعادلة القطرية (3.4) و سيعطينا هذا الطاقات E للنظام وأيضا وظيفة الموجة $\psi(r,\theta)$.

1.2.4 حل المعادلة الزاوية

لدينا:

$$V(r,\theta)=\mu\left[-\frac{H}{r}+\frac{D_r}{r^2}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\mathrm{h}^2}{2\mu^2}\right)\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\right] \qquad (4.4)$$

وفي هذه الحالة تصبح المعادلة الزاوية من الشكل:

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d\Theta}{d\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)-\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\cos^{-2}\theta-E_\theta\Theta(\theta)=0 \qquad (5.4)$$

وعند أخذ المتغيرات التالية:

$$\omega=\cos^2(\theta) \qquad (6.4)$$

$$\Theta=\omega^\rho(1-\omega)^\sigma T \qquad (7.4)$$

نستعمل لحساب باقي أجزاء المعادلة الزاوية نحصل على المتغيرات الجديدة:

$$\sin^2(\theta)=1-\cos^2(\theta)=1-\omega \qquad (8.4)$$

$$\cot\theta=\frac{\sqrt{\omega}}{\sqrt{1-\omega}} \qquad (9.4)$$

المشتق الأول ل Θ بالنسبة ل θ من حيث المتغير الجديد ω هو:

$$\frac{d\Theta}{d\theta}=-\left[2\sqrt{\omega(1-\omega)}\right]\frac{d\Theta}{d\omega} \qquad (10.4)$$

المشتق الثاني ل Θ بالنسبة ل θ من حيث المتغير الجديد ω هو:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}=(2-4\omega)\frac{d\Theta}{d\omega}+4\omega(1-\omega)\frac{d^2\Theta}{d\omega^2} \qquad (11.4)$$

المشتق الأول $\frac{d\Theta}{d\omega}$ من حيث الدالة الجديدة T هو:

$$\frac{d\Theta}{d\omega}=\left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma}-\sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)T+\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{dT}{d\omega} \qquad (12.4)$$

المشتق الثاني $\frac{d^2\Theta}{d\omega^2}$ من حيث الدالة الجديدة T هو:

$$\frac{d^2\Theta}{d\omega^2}=\left[\left(\rho(\rho-1)\omega^{\rho-2}(1-\omega)^{\sigma}-2\rho\sigma\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma-1}+\sigma(\sigma-1)\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)\right]T$$

$$+2\left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma}-\sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)\frac{dT}{d\omega}+\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{d^2T}{d\omega^2} \qquad (13.4)$$

بواسطة تعويض المعادلتين (8.4) و (11.4) في المعادلة (5.4) نجد المعادلة الزاوية الجديدة بالمتغير ω:

$$4\omega(1-\omega)\frac{d^2\Theta}{d\omega^2}+(2-6\omega)\frac{d\Theta}{d\omega}-\left[\frac{1}{1-\omega}\left(m^2+\alpha\omega+\beta+\frac{\gamma}{\omega}\right)+E_\theta\right]\Theta(\theta)=0 \qquad (14.4)$$

وبتعويض المعادلات (7.4)، (12.4) و(13.4) في المعادلة (14.4) نجد:

$$\left(\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{d^2T}{d\omega^2}+2\left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma}-\sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)\frac{dT}{d\omega}\,4\omega(1-\omega)\right.$$

$$\left.\right)+\left(\rho(\rho-1)\omega^{\rho-2}(1-\omega)^{\sigma}-2\rho\sigma\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma-1}+\sigma(\sigma-1)\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)T$$

$$+(2-6\omega)\left[\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}\frac{dT}{d\omega}+\left(\rho\omega^{\rho-1}(1-\omega)^{\sigma}-\sigma\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma-1}\right)T\right]$$

$$-\left[\frac{1}{1-\omega}\left(m^2+\alpha\omega+\beta+\frac{\gamma}{\omega}\right)+E_\theta\right]\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}T=0 \qquad (15.4)$$

وبالقسمة على $4\omega^{\rho}(1-\omega)^{\sigma}$ تصبح المعادلة من الشكل:

$$\omega(1-\omega)\frac{d^2T}{d\omega^2}+\left[\left(2\rho+\frac{1}{2}\right)-\left(2\rho+2\sigma+\frac{3}{2}\right)\omega\right]\frac{dT}{d\omega}+$$

$$\rho(\rho-1)\omega^{-1}+\rho(\rho-1)+\sigma(\sigma-1)\omega+\frac{1}{2}\rho\omega^{-1}-\frac{1}{2}\sigma(1-\omega)^{-1}+\frac{3}{2}\sigma\omega(1-\omega)^{-1}$$

$$\frac{1}{4(1-\omega)}\left(m^2+\alpha\omega+\beta+\frac{\gamma}{\omega}\right)-2\rho\sigma-\frac{E_\theta}{4}-\frac{3}{2}\rho T=0 \qquad (16.4)$$

وبوضع:

$$\rho=\frac{1}{4}+\frac{1}{4}(1+\gamma)^{1/2} \qquad (17.4)$$

$$\sigma=\frac{1}{2}\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2} \qquad (18.4)$$

نحصل على المعادلة الفوق الهندسية التالية:

$$\omega(1-\omega)T''+\left[\left(2\rho+\frac{1}{2}\right)-\left(2\rho+2\sigma+\frac{3}{2}\right)\omega\right]T'$$

$$-\frac{1}{4}\left[E_\theta+8\rho\sigma+2\rho+2\alpha+2\gamma+m^2+\beta\right]T=0 \qquad (19.4)$$

وحلها هو دالة فوق الهندسية:

$$T=\mathrm{N}_\theta F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\omega\right)$$

$$(20.4)$$

من شكل المعادلة فوق الهندسية:

$$\frac{1}{4}\left[E_\theta+8\rho\sigma+2\rho+2\alpha+2\gamma+m^2+\beta\right]=(-2\rho)(2\rho+2\sigma) \qquad (21.4)$$

فهي تتطلب:

$$E_\theta=\frac{1}{4}+\alpha+\left[2l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2}\right]^2 \qquad (22.4)$$

وبذلك نحصل علة دالة الموجة الزاوية عند تعويض الدالة T في المعادلة $\Theta=\omega^\rho(1-\omega)^\sigma T$ نجد:

$$\Theta=\mathrm{N}_\theta\omega^\rho(1-\omega)^\sigma F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\omega\right) \qquad (23.4)$$

وبوضع: $\omega=\cos^2\theta$ تصبح المعادلة من الشكل:

$$\Theta=\mathrm{N}_\theta\left(\cos\theta\right)^{2\rho}\left(1-\cos^2\theta\right)^\sigma$$

$$F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\cos^2\theta\right) \qquad (24.4)$$

حيث: $\sigma=\frac{1}{2}\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2}$ و $\rho=\frac{1}{4}+\frac{1}{4}(1+\gamma)^{1/2}$

وتكتب الطاقة الزاوية على النحو التالي:

$$E_\theta=\frac{1}{4}+\alpha+\left[2l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2}\right]^2 \qquad (25.4)$$

$$l=0,1,2.....,\mathrm{m}=0,\pm1,\pm2,.....$$

2.2.4 حل المعادلة القطرية

لحل المعادلة القطرية نأخذ المعادلة (3.4) ونقسمها على r^2 فنجد:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}E+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}H\right)\frac{1}{r}-\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)\frac{1}{r^2}\right]R(r)=0 \qquad (26.4)$$

من أجل حل هذه المعادلة نقوم بالتغيير التالي:

$$\rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}Er} \tag{27.4}$$

نحسب مشتق الدالة $R(r)$ في المعادلة القطرية بدلالة المشتقات للمتغير الجديد ρ:

يمكن كتابة المشتق الأول $\frac{dR(r)}{dr}$ بالشكل التالي:

$$\frac{dR(r)}{dr}=\frac{dR(r)}{d\rho}\frac{d\rho}{dr}=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}\frac{dR(r)}{d\rho} \tag{28.4}$$

ويمكن كتابة المشتق الثاني بالشكل:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}=-\frac{8\mu}{\hbar^2}E\frac{d^2R(r)}{d\rho^2} \tag{29.4}$$

وبهذا التعبير تصبح المعادلة القطرية على النحو التالي:

$$-\frac{8\mu}{\hbar^2}E\frac{d^2R(r)}{d\rho^2}+\frac{2\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}}{\rho}\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}\frac{dR(r)}{d\rho}+$$

$$\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}E+\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}H\right)\frac{\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}}{\rho}-\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)\left(\frac{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}{\rho^2}\right)\right]R(r)=0 \tag{30.4}$$

وبقسمة المعادلة (8.3) على $-\frac{8\mu}{\hbar^2}E$ نجد $\rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}Er}$:

$$\frac{d^2R(r)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR(r)}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}-\left(\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H\right)\frac{1}{\rho}-\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]R(r)=0 \tag{31.4}$$

نضع: $\beta(\beta+1)=\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta$ ، $\alpha=\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H$

فنحصل على المعادلة القطرية التالية:

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho}-\left[\frac{1}{4}-\frac{\alpha}{\rho}+\beta(\beta+1)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]R(\rho)=0 \qquad (32.4)$$

لحل هذه المعادلة نضع:

$$R(\rho)=\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho) \qquad (33.4)$$

علينا حساب مشتقات الدالة الجديدة بدلالة المتغير الجديد

المشتق الأول:

$$\frac{dR}{d\rho}=\frac{d\left(\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)\right)}{d\rho}=\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)-\frac{1}{2}\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)+\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\frac{df(\rho)}{d\rho} \qquad (34.4)$$

المشتق الثاني:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}=\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2}+\left(2\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}-\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)\frac{df(\rho)}{d\rho}+$$

$$\left(\beta(\beta-1)\rho^{\beta-2}e^{-\frac{\rho}{2}}-\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}+\frac{1}{4}\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)f(\rho) \qquad (35.4)$$

نعوض المعادلتين (34.4) و(35.4) في المعادلة (32.4) نجد:

$$\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2}+\left(2\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}-\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)\frac{df(\rho)}{d\rho}+$$

$$\left(\beta(\beta-1)\rho^{\beta-2}e^{-\frac{\rho}{2}}-\beta\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}+\frac{1}{4}\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)f(\rho)$$

$$+\frac{2}{\rho}\left(\beta f(\rho)-\frac{1}{2}\rho f(\rho)+\rho\frac{df(\rho)}{d\rho}\right)-\left[\frac{1}{4}-\frac{\alpha}{\rho}+\beta(\beta+1)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]\rho^{\beta}e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)=0 \qquad (36.4)$$

بالقسمة على $\rho^{\beta-1}e^{-\frac{\rho}{2}}$ نجد:

$$\rho\frac{d^2 f(\rho)}{d\rho^2}+(2\beta-\rho)\frac{df(\rho)}{d\rho}+\left(\beta(\beta-1)\rho^{-1}-\beta+\frac{1}{4}\rho\right)f(\rho)+$$

$$+\frac{2}{\rho}\left(\beta f(\rho)-\frac{1}{2}\rho f(\rho)+\rho\frac{df(\rho)}{d\rho}\right)-\left[\frac{1}{4}-\frac{\alpha}{\rho}+\beta(\beta+1)\left(\frac{1}{\rho^2}\right)\right]\rho f(\rho)=0 \qquad (37.4)$$

بعد تبسيط المعادلة نحصل على:

$$\rho\frac{d^2 f(\rho)}{d\rho^2}+(2\beta+2-\rho)\frac{df(\rho)}{d\rho}+(\alpha-\beta-1)f(\rho) \qquad (38.4)$$

المعادلة الأخيرة هي معادلة Laguerre التفاضلية المعروفة وحلها هو دالة فوق الهندسية المتجمعة:

$$f(\rho)=N_1F_1(\alpha-\beta-1,2\beta+2,\rho) \qquad (39.4)$$

من السلوك المقارب للدالة المتجمعة $(r\to\infty\Rightarrow N_1F_1=0)$ مما يؤدي هذا إلى $\psi\to 0$ حيث $r\to\infty$

نجد الشرط العام للتكميم:

$$\alpha-\beta-1=n_r,\ n_r=1,2,3,.... \qquad (40.4)$$

أي:

$$\alpha=n_r+\beta+1 \qquad (41.4)$$

نعوض $\alpha=\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H$ ، $\rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}E}r$ و $\beta=\alpha-n_r-1$ ومنه:

$$f(r)=N_{r1}F_1\left(n_r,2\beta+2,\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right) \tag{42.4}$$

$N_{r1}F_1\left(n_r,-2\left(\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H+n_r\right),\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)$ يمكن كتابتها ككثير حدود Laguerre من الدرجة n_r:

$$L_{n_r}^{2\beta+2}\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)=N_{r1}F_1\left(n_r,-2\left(\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H+n_r\right),\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right) \tag{43.4}$$

من المعادلة (33.4) لدينا:

$$R(r)=N_r\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right)_1$$

$$F_1\left(n_r,1+\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta\right)},\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er\right) \tag{44.4}$$

حيث:

$$\beta=\alpha-n_r-1,\beta(\beta+1)=\frac{2\mu^2}{\hbar^2}D_r-E_\theta \text{ و } \rho=\sqrt{-\frac{8\mu}{\hbar^2}}Er \text{ ، } \alpha=-\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H$$

باستخدام هذه العبارات نجد عبارة الطاقة:

$$\alpha=-\sqrt{-\frac{\mu}{2\hbar^2E}}\mu H\Rightarrow\alpha^2=-\frac{\mu^3}{2\hbar^2E}H^2\Rightarrow E=-\frac{\mu^3}{2\hbar^2\alpha^2}H^2 \tag{45.4}$$

بتعويض $\alpha=n_r+\beta+1$ فتصبح عبارة الطاقة من الشكل :

$$E=-\frac{\mu^3}{2\hbar^2(n_r+\beta+1)^2}H^2 \tag{46.4}$$

علينا حساب β من المعادلة التالية:

$$\beta(\beta+1)=\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta \Rightarrow \beta^2+\beta-\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)=0 \qquad (47.4)$$

هذه المعادلة لها حلين هما:

$$\beta_1=-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)} \qquad (48.4)$$

$$\beta_2=-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)} \qquad (49.4)$$

الحل المقبول هو الحل الأول β_1 نستخدمه في عبارة الطاقة (46.4) فنجد:

$$E_{n_r}=-\frac{\mu^3H^2}{2h^2}\left(n_r+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)}\right)^{-2} \qquad (50.4)$$

وعبارة الدالة القطرية من دالة الموجة تكون:

$$R(r)=N_r\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right)\,{}_1F_1\left(n_r,1+\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r-E_\theta\right)},\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right) \qquad (51.4)$$

نعوض عبارة E_θ من المعادلة (25.4) في معادلة الطاقة (50.4) لنجد العبارة النهائية لطاقة :

$$E_{n_r}=-\frac{\mu^3H^2}{2h^2}$$

$$\left(n_r+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}D_r-\left(\frac{1}{4}+\alpha+\left[2l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2}\right]^2\right)}\right)^{-2} \qquad (52.4)$$

$\mathrm{m}=0,\pm1,\pm2,....$ و $\mathrm{n}_r=0,1,2,....,l=0,1,2,....$

ومنه نستنتج الدالة الموجية لنظامنا $\psi(r,\theta,\varphi)=\exp(im\varphi)R(r)\Theta(\theta)$ من المعادلة الزاوية (24.4)

والمعادلة القطرية (51.4) نجد:

$$\psi=N\exp(im\varphi)\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{\mathrm{h}^2}Er}\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}D_r-E_\theta\right)}}(\cos\theta)^{2\rho}\left(1-\cos^2\theta\right)^{\sigma}$$

$$\exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{-\frac{8\mu}{\mathrm{h}^2}Er}\right){}_1F_1\left(n_r,1+\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}D_r-E_\theta\right)},\sqrt{-\frac{8\mu}{\mathrm{h}^2}Er}\right)$$

$$F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\cos^2\theta\right) \qquad (53.4)$$

بحيث:

$$\sigma=\frac{1}{2}\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2} \quad ، \quad \rho=\frac{1}{2}\left(m^2+\alpha-\beta+\gamma\right)^{1/2}$$

مناقشة

نلاحظ في هذا الفصل أن كمون الحلقة المضاعف زائد كمون كراتزر يعطينا عبارة طاقة وتكون بقيم معرفة لطاقة في حالة تحقق الشرط $\frac{1}{4}+\frac{2\mu^2}{\mathrm{h}^2}D_r-E_\theta\geq0$ وهذا الشرط يستلزم قيم حدية ل D_r وتتغير بتغير E_θ وهذا الشرط ما يجعلنا نحصل على حل معادلة شرودينغر للكمونين معا.

الخاتمة

الخاتمة

في هذه الاطروحة قمنا بدراسة بشكل تحليلي معادلة شرودينغر بكمون الحلقة المضاعف زائد كمون كراتزر وذلك بعد إعطاء نظرة عامة حول معادلة شرودينغر ومفهومها ومعادلتها المتعلقة بالزمن وغير المتعلقة بالزمن مع شرح بسيط لبعض الكمونات غير المركزية التي نحتاجها، وقمنا بحل معادلة شرودينغر بكمون الحلقة المضاعف وكمون كراتزر كل على حدى وتحصلنا على عبارتين دالة الموجة على التوالي:

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{(n-1-1)!}{2n\left[(n+1)!\right]^3}}\left(\frac{2}{na_0}r\right)^{1} e^{-\frac{r}{na_0}}L_{n+1}^{21+1}\left(\frac{2}{na_0}r\right)\cdot N_\theta(\cos\theta)^{2\rho}\left(1-\cos^2\theta\right)^{\sigma}$$

$$F\left(-l,l+1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2}+\left(m^2+\alpha+\beta+\gamma\right)^{1/2};1+\frac{1}{2}(1+\gamma)^{1/2};\cos^2\theta\right).\exp(im\varphi)$$

$$\psi(r,\theta,\varphi)=N_r\left(\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r+\frac{h^2}{2m}(l(l+1))\right)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right)_1$$

$$F_1\left(n_r,1+\sqrt{1+4\left(\frac{2\mu^2}{h^2}D_r\right)+\frac{h^2}{2m}(l(l+1))},\sqrt{-\frac{8\mu}{h^2}Er}\right).(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi}$$

وفي الأخير رأينا حل المعادلة بالكمونين معا حيث تحصلنا على دالة الموجة التي هي عبارة عن دالة مشتركة بين الدالتين السابقتين حيث نلاحظ الجزء الزاوي من دالة الموجة لكمون الحلقة المضاعف والجزء القطري من دالة الموجة لكمون كراتزر.

قائمة المراجع

والمصادر

[1] Bransden. B. H and Joachain C. J, Physics of Atoms and Molecules, (United States of America: John Wiley & Sons, Inc) 128, 1995.

[2] حسن سلمان, الميكانيك الكوانتية, دار (مير) موسكو.

[3] Physique Quantique I et II Notes de cours Prof. Frédéric Mila Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne Avril 2010.

[4] L. I. Schiff, Quantum Mechanics (McGraw-Hill, New York, 1949).

[5] Cohen-Tannoudji, Claude, Bernard Diu, and Franck Laloë. *Mécanique quantique*. Hermann, EDP Sciences, 1998.

[6] M. Moumni, M. Falek. arXiv:1506.07812v4 [quant-ph] 13 May 2016.

[7] Chen, C. Y., Lu, F. L., Sun, D. S., & Dong, S. H. (2013). Analytic solutions of the double ring-shaped Coulomb potential in quantum mechanics. *Chinese Physics B*, *22*(10), 100302.

[8] Heddar, M. E. B. A. R. E. K. *Quantum Studies of Some Non-Central Potentials*. Diss. Université de mohamed kheider biskra, 2021.

[9] غانيه، زمالي، حل معادلة شرودينغر كمسألة ذات جسمين، مذكرة تخرج لنيل شهادة أستاذ تعليم ثانوي المدرسة العليا للأساتذة بورقلة (2021).

[10] Kratzer A.; Die ultraroten Rotationsspektren der Halogenwasserstoffe, Z. Phys. 3, 289-307 (1920)

[11] Kratzer A.; Die Gesetzm¨assigkeiten in den Bandspektren, Enc. d. Math. Wiss. 3, 821-859 (1926)

[12] Fortunato L. and Vitturi A.; Analytically solvable potentials for gamma unstable nuclei, J.Phys.G 29, 1341-1350 (2003)18

[13] Hajigeorgiou P.G.; Exact analytical expressions for diatomic rotational and centrifugal distortion constants for a Kratzer Fues oscillator, J. Molec. Spect. 235, 111-116 (2006)

[14] Berkdemir C., Berkdemir A. and Han J.; Bound state solutions of the Schr¨odinger equation for modified Kratzer's molecular potential, Chem. Phys. Lett. 417, 326-329 (2006).

[15] Van Hooydonk G.; Ionic Kratzer bond theory and vibrational levels for achiral covalent bond HH, Z. Naturforsch. A 64, 801 (2009)

[16] Batra K. and Prasad V.; Spherical quantum dot in Kratzer confining potential: study of linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index change, Eur. Phys. J. B 91,298 (2018)

[17] Heddar, M., M. Moumni, and M. Falek. "Non-relativistic and relativistic equations for the Kratzer potential plus a dipole in 2D systems." *Physica Scripta* 94.12 (2019): 125011.

[18] Isonguyo, C. N., Okon, I. B., Antia, A. D., Oyewumi, K. J., Omugbe, E., Onate, C. A., ... & Ituen, E. (2022). Eigensolutions and Thermodynamic Properties of Kratzer plus generalized Morse Potential. *arXiv preprint arXiv:2202.09659*.

ملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة تحليلية لحل معادلة شرودينغر لكمون لا مركزي متكون من كمون كراتزر زائد كمون الحلقة المضاعف، وذلك في حالتين بحيث الحالة الأولى درسنا كل كمون لوحده وقمنا بحل المعادلة ومن ثم في الحالة الثانية دمجنا الكمونين معا:

$$V(r,\theta)=\mu\left[-\frac{H}{r}+\frac{D_r}{r^2}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\right]$$

وتحصلنا على حل المعادلة وهي دالة الموجة الأخيرة والطاقة في هذه الحالة.

الكلمات المفتاحية: معادلة شرودينغر ، كمون الحلقة المضاعف، كمون كراتزر

Abstract:

in this work we have studied an analytical to solve Schrodinger equivalent to a non−central universe consisting of an ambush of a keratzer plus Double Ring−Shaped in two cases, so that the first case we studied all an ambulance alone and we solved the equation and then in the second case together:

$$V(r,\theta)=\mu\left[-\frac{H}{r}+\frac{D_r}{r^2}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\right]$$

we obtainequation and afinal wave and energy function in this case.

kegwordes: Schrödinger equation, Kratzer potential, Double Ring−Shaped potential

Résumé:

dans ce travail nous avons fait une étude analytique pour résoudre l'équation de Schrödinger pour un potentiel excentrique composé d'un potentiel de Kratzer plus un potentiel a double boucle, dans les duex cas ou le premier cas nous avons étudié chaque potentiel seul nous avons résolu l'équation et puis dans les deux potentiels ensemble:

$$V(r,\theta)=\mu\left[-\frac{H}{r}+\frac{D_r}{r^2}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\right)\left(\alpha\cos^4\theta+\beta\cos^2\theta+\gamma\right)\sin^{-2}\theta\right]$$

et on obtenu la solution de l'équation qui est une fonction la dernière onde et l'énergie dans ce cas.

Mots clés : l'équation de Schrödinger, potentiel de Kratzer, potentiel a double boucle