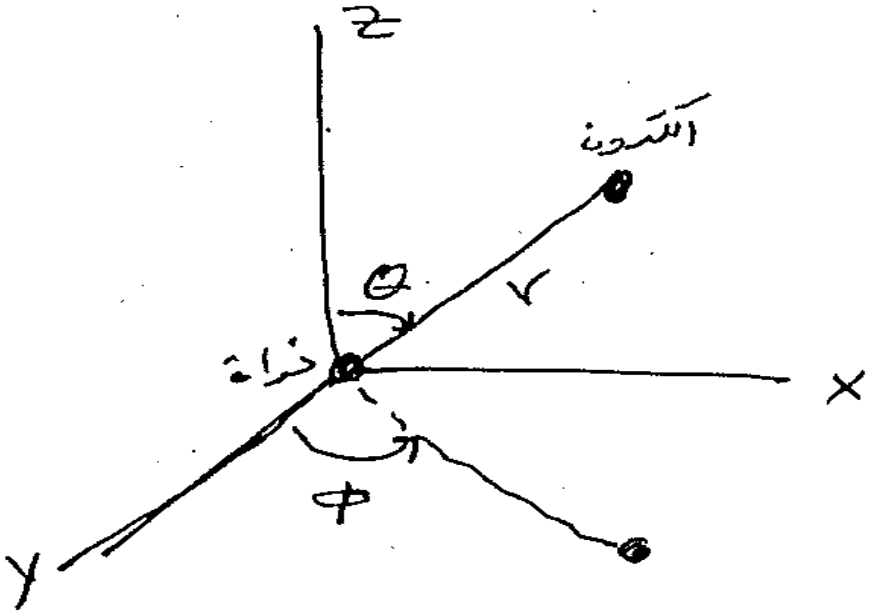
حل معادلة شرودنكر لنظام ذرة الهيدروجين:

نفرض ان نظام الاحداثيات لذرة الهيدروجين ممثلة بالشكل:



- وضعت النواة في مركز الاحداثيات وكان الواجب ان يكون المركز في مركز ثقل النظام، والسبب هو اعتبار ان النواة تمثل مركز الكتلة لكونها اكبر بكثير من كتلة النواة.

- لهذا من الممكن اعتبار الكتلة المختزلة للنظام تساوي كتلة الالكترون واعتبار النواة في حالة سكون.

الطاقة الكامنة لكتلتين مشحونتين تكون:

$$\mathbf{V = - Z\, e^2 / r}$$

للهيروجين $Z = 1$ فيكون:

$$\mathbf{V = - e^2 / r}$$

وعليه يكون عامل هاملتون:

$$\mathbf{\hat{H} = - \hbar^2 / 2m \nabla^2 - e^2 / r}$$

وعليه تكون معادلة شرودنكر لذرة الهيدروجين على النحو الاتي:

$$\nabla^2 \Psi + 8\pi^2 m / h^2 (E + e^2/r) \Psi = 0 \quad \text{---------- 1}$$

وبسبب التماثل الكروي لنظام ذرة الهيدروجين يجب استخدام الاحداثيات الكروية او القطبية في معادلة شرودنكر ، اي تغيير عامل لابلاس بدلالة الاحداثيات القطبية في المعادلة رقم ١ :

$$\nabla^2 = (1/r^2)\, d/dr\, (r^2.d/dr) + (1/r^2 \sin\theta)\, d/d\theta\, (\sin\theta \,.\, d/d\theta) + 1/r^2 \sin 2\theta) d^2/d\phi^2$$

وبذلك تصبح معادلة رقم ١ بالشكل الاتي:

$$[(1/r^2)\, d/dr\, (r^2.\, d/dr) + (1/r^2 \sin\theta)\, d/d\theta\, (\sin\theta \,.\, d/d\theta) + 1/r^2 \sin^2\theta)\, d^2/d\phi^2]\, \Psi + 8\pi^2 m/h^2\, [E+e^2/r]\Psi = 0 \quad \text{---- 2}$$

ويمكن كتابة المعادلة ٢ بالشكل الاتي:

$$[(1/r^2)\, d/dr\, (r^2.\, d/dr) + 1/r^2\, \Lambda^2]\, \Psi + 2m/\hbar^2 (E+e^2/r)\, \Psi = 0 \quad \text{------ 3}$$

والمعادلة ٣ تمثل معادلة شرودنكر لذرة الهيدروجين بدلالة الاحداثيات القطبية. وتحل هذه المعادلة بطريقة فصل المتغيرات وذلك بفرض دوال جديدة احدهما دالة للمتغير القطري والاخرى للمتغير الزاوي:

$$\Psi_{(r,\theta,\phi)} = R_{(r)} \,.\, Y_{(\theta,\phi)} \quad \text{--------- 4}$$

وبتعويض معادلة ٤ في ٣ نحصل بعد الترتيب:

$$1/R(r).\, d/dr(r^2.\, dR_{(r)}/dr) + 2mr^2/\hbar^2 (E+e^2/r) = 1/Y_{(\theta,\phi)}\, \Lambda^2\, Y_{(\theta,\phi)} \quad \text{-----5}$$

اصبحت الان الطرف الايمن من المعادلة يعتمد على الزوايا θ و ϕ في حين يعتمد الطرف الايسر على r فقط. لذا فان كلا الطرفين يجب ان يكون مساويا لكمية ثابتة ولتكن C وبذلك نحصل على معادلتين تفاضليتين هما:

$$1/R_{(r)}.\, d/dr(r^2.\, dR_{(r)}/dr) + 2mr^2/\hbar^2 (E+e^2/r) = C \quad \text{-------- 6}$$

$$1/Y_{(\theta,\phi)}\, \Lambda^2\, Y_{(\theta,\phi)} = C \quad \text{-------- 7}$$

تسمى المعادلة رقم ٦ بالمعادلة القطرية لذرة الهيدروجين فيما تسمى المعادلة ٧ بالمعادلة الكروية او القطبية لذرة الهيدروجين.

اما القيمة الذاتية للدالة اي الطاقة فهي:

$$E_n = -2Z\,\pi^2\,m\,e^4 / n^2\,h^2 \qquad \text{----- 8}$$

وهي تمثل طاقة حالة السكون او الحالة الاستقرارية لذرة الهيدروجين وهي متفقة مع طاقة ذرة الهيدروجين التي اشتقت من قبل بور.

١- عدد الكم الرئيسي(n)principle quantum number

- وياخذ جميع القيم الصحيحة ولاياخذ القيمة صفر ، اي ان ---- n = 1, 2, 3.

- تزداد الطاقة بازدياد قيمة هذا العدد، لذلك يعتبر مرافقا للطاقة ويحدد كذلك عدد العقد بدالة الموجة، حيث ان عدد العقد = (n-l-1).

٢- عدد كم الزخم الزاوي(l) angular momentum quantum number

ويسمى احيانا بعدد الكم السمتي (azimuthal)

- تكون قيمته محددة بقيمة n وهو دائما اصغر من n . وياخذ القيم المحصورة بين صفر و (n-1) لاية قيمة من n . اي عندما يكون n = 1 هناك قيمة واحدة ل l = 0 وعندما تكون n = 2 تكون هناك قيمتين l = 0 and 1 ----- وهكذا.

- ياخذ l جميع القيم الصحيحة وبضمنها الصفر اي ان ------- l = 0, 1, 2, 3

- لذلك يساوي هذا العدد عدد العقد بالدالة الزاوية θ_θ اي عدد السطوح العقدية التي تمر بنقطة الاصل. وعند l = 0 لا تكون هناك عقد بالدالة ولذلك تكون دالة الموجة متماثلة كرويا حول النواة. (مثل دالة اوربتال s).

- اما مستويات الطاقة فيعبر عنها بدلالة قيم l ، وعندما l = 0 يرمز لمستوى الطاقة بالرمز s وعندما يساوي ١ يرمز له p ---- وهكذا.

n= 1 ; l = 0 ; 1s

n =2 ; l = 0 ; 2s

n = 2 ; l = 1 ; 2p

n = 3 ; l = 0 ; 3s

n = 3 ; l = 1 ; 3p

n = 3 ; l = 2 ; 3d

٣- عدد الكم المغناطيسي (m) magnetic quantum number

- ويحدد الخواص الاتجاهية للمستويات الذرية

- ولما كانت الذرات كروية التماثل فانه لا يمكن تحديد عدد التوجهات الا عندما تكون الذرة تحت تاثير مجال كهربائي او مغناطيسي.

- لذلك فان عدد الكم المغناطيسي يمثل عدد توجهات الالكترون الممكنة المسموح بها تحت تاثير المجال الكهربائي او المغناطيسي والمتمثلة بالعلاقتين:

$$(|m| \leq l \;\; ; (2l+1)$$

وبذلك يعطي عدد الكم المغناطيسي درجة انحلال المستويات الالكترونية.

فاذا كان l = 0 هناك قيمة واحدة ل m .

اذا كان l = 1 هناك ثلاث قيم ل m هي ٠ و +١ و -١ . وهكذا

لذلك قيم m تساوي كالاتي:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2 \;\; \text{------}$$

وتكون مستويات الطاقة منحلة ثلاثيا وخماسيا وسباعيا ----- وهكذا.

- ان المستويات الالكترونية التي تتساوى في قيم l وتختلف في قيم m تكون ذات طاقة متساوية اذا كانت بمعزل عن اي تاثير خارجي. لكن هذه المستويات تتخذ طاقات مختلفة تحت تاثير المجال الكهربائي او المغناطيسي. حيث تعرف الحالة الاولى اي تاثير المجال الكهربائي – تاثير شتارك (stark effect) والثانية اي تاثير المجال المغناطيسي – تاثير زيمان (Zeeman effect). وادت هاتين الظاهرتين الى اكتشاف التراكيب الدقيقة (fine structure) في الاطياف الالكترونية للذرات.

٤- عدد كم البرم Spin quantum number (m_s)

- من خلال تجربة شتيرن – جيرلوخ (Stern-Gerlach) اي ملاحظة انقسام بخار الفضة عند دخولها مجال مغناطيسي خارجي الى قسمين اي الى نوعين احدهما يدور باتجاه عقرب الساعة والثاني يكون باتجاه معاكس لعقرب الساعة. بمعنى اخر:

(قسما من الالكترونات في ذرات الفضة تدور حول محورها باتجاه واحد والقسم الاخر يدور باتجاه معاكس)

- ظاهرة انقسام خطوط الطيف للمعادن القلوية الى خطوط مزدوجة (doublet).

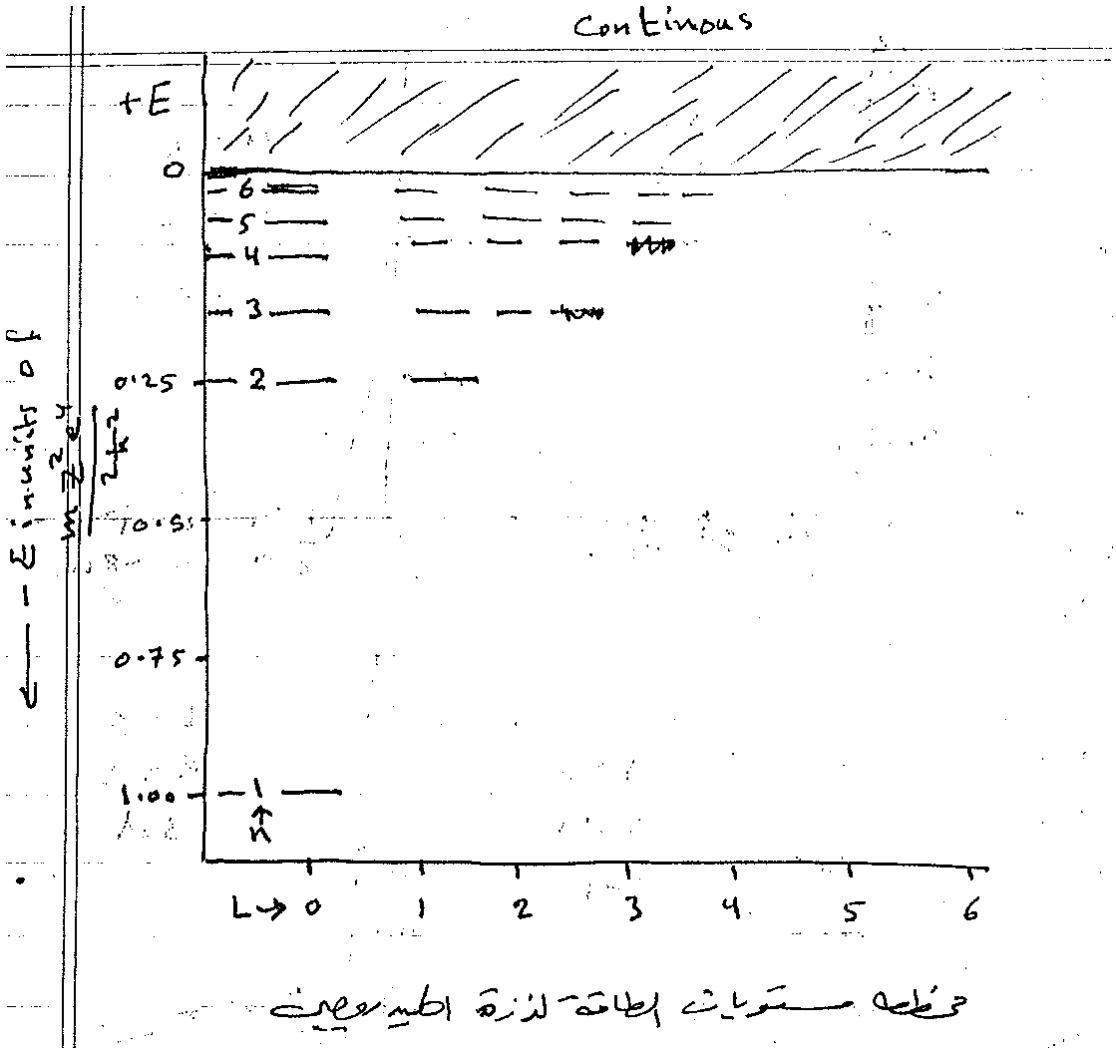
- ياخذ عدد الكم (m_s) القيم 1/2+ و 1/2-

وينتج عن هذا الدوران زخم زاوي برمي يمكن ان نكتب معادلته بالشكل:

$$\hat{S}\alpha = 1/2 \cdot h/2\pi \cdot \alpha$$

$$\hat{S}\beta = -1/2 \cdot h/2\pi \cdot \beta$$

الان يمكن ان نرسم مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين كالاتي (من معادلة ٩):



مخطط مستويات إطاقة لذرة الهيدروجين