درس دوازدهم: اتم هیدروژن

۱ مقدمه

این فصل سرآغازی برای آشنایی ما با مکانیک کوانتومی اتم‌ها، مولکول ها و جامدات است. دراین درس یادمی گیریم که چگونه معادله شرودینگر را برای اتم هیدروژن که ساده ترین اتم درطبیعت است حل کنیم و طیف آن را بدست آوریم. برای سادگی نخست یک اتم هیدروژن ایده‌آل را بررسی می کنیم، یعنی فرض می کنیم که هسته ساکن است و تنها الکترون انرژی جنبشی دارد. این فرض از آنجا که هسته بسیارسنگین تر از اتم است فرض خوبی است. درانتهای این درس یادمی گیریم که چگونه تاثیر جرم محدود هسته را محاسبه کنیم. هم چنین درمطالعه اتم هیدروژن از اثرات نسبیتی و برهم کنش ممان مغاطیسی الکترون با ممان مغناطیسی ای که ناشی از حرکت مداری آن است صرف نظر می کنیم. هم چنین برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون با ممان مغناطیسی هسته را نادیده می نگاریم. درفصل های بعدی است که این اثرات را به صورت اختلالی در نظر می گیریم. بنابراین فعلا دراین فصل یک اتم هیدروژن ساده را بررسی می کنیم.

۲ تجزیه تحلیل ابعادی برای اتم هیدروژن

کمیت های مربوط دراتم هیدروژن عبارتند از e و m یعنی بار و جرم الکترون بعلاوهٔ $\hbar$ یعنی ثابت پلانک. می بایست ازاین سه کمیت ها مرتبه همه کمیت های دیگر نظیر انرژی، طول، سرعت و فرکانس را بدست بیاوریم.

دستگاه واحدها: تمامی کمیت ها در دستگاه واحد های متریک نوشته شده‌اند. دراین دستگاه واحد ها بارالکتریکی برحسب کولومب یا C سنجیده می شود و اندازه بارالکترون برابراست با $1.6 \times 10^{-19} C$.

درساختن این کمیت ها c سرعت نور وارد نخواهد شد زیرا مسئله نسبیتی نیست اگر چه ممکن است برای استخراج این کمیت ها زیباتر باشد که از این ثابت استفاده کنیم. می دانیم که طول موج کامپتون الکترون برابراست با

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{mc} \tag{1}$$

هم چنین می دانیم که ثابت ساختارریز که کمیت بدون بعدی است برابراست با

$$\alpha = K\frac{e^2}{\hbar c}. \tag{2}$$

که در آن $K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9 \frac{N\,m^2}{C^2}$

تنها راهی که بتوانیم کمیتی بابعد طول بدون c بسازیم آن است که قراردهیم

$$a_0 := \frac{\lambda_c}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{Kme^2} \approx \quad \text{آنگستروم} \quad 0.5. \tag{3}$$

می دانیم که انرژی درحال سکون الکترون برابراست با

$$E_0 = mc^2. \tag{4}$$

تنهاراهی که بتوانیم کمیتی با بعد انرژی ولی بدون سرعت نوربسازیم آن است که این کمیت را در مجذور ثابت ساختار ریز ضرب کنیم. نصف این کمیت چیزی است که به طور سنتی آن را یک رایدبرگ $Rydberg$ می خوانیم و با نماد Ry نشان می دهیم. راید برگ واحدی است برای سنجش انرژی الکترون ها دراتم ها و برابراست با 13.6 الکترون ولت.

$$Ry := \frac{1}{2}\alpha^2 \times mc^2 = \frac{K^2}{2}m(\frac{e^2}{\hbar})^2. \tag{5}$$

هم چنین اگربخواهیم کمیتی بابعد سرعت بسازیم که درآن سرعت نورنقشی نداشته باشد آن است که قراردهیم

$$v := \alpha c = K\frac{e^2}{\hbar} \approx \quad \text{سرعت نور} \quad \frac{1}{137}. \tag{6}$$

a، v و Ry طول، سرعت و انرژی مشخصه الکترون دراتم هیدروژن هستند. این مقادیر به ترتیب تخمینی هستند از شعاع ، سرعت وانرژی الکترون دراتم هیدروژن. و بالاخره می توانیم تخمینی از فرکانس های تشعشعی ازاتم هیدروژن بدست آوریم. کافی است که قرار دهیم

$$\omega = \frac{Ry}{\hbar} \approx 10^{15} \;\; Hz. \tag{7}$$

برای اتم های شبه هیدروژن یعنی اتم هایی که یک الکترون بدورهسته ای با بارمثبت Ze می چرخد، می بایست درکمیت های فوق e^2 را با Ze^2 جایگزین کرد. همانطور که از روابط بالا پیداست، درنتیجه این جایگزینی انرژی و فرکانس Z^2 برابر، طول مشخصه $\frac{1}{Z}$ و سرعت Z برابرمی شود.

بعدازاین مقدمات به حل معادله شعاعی شرودینگرمی پردازیم. از درس گذشته دیدیم که ویژه توابع هامیلتونی برای یک پتانسیل که دارای تقارن دوارنی است حتماً به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = f_E(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{8}$$

و هرگاه تابع شعاعی را به صورت $f_E(r) = \frac{R(r)}{r}$ بنویسیم آنگاه تابع $R(r)$ دریک معادله شرودینگر یک بعدی صدق می کنند که درآن پتانسیل اولیه با یک پتانسیل موثر جایگزین شده است. برای اتم هیدروژن معادله شعاعی شرودینگربه شکل زیردرمی آید. دراین معادله ثابت $\hbar$ را صریحاً نوشته ایم. ازآنجا که انرژی E منفی است آن را به صورت $-|E|$ نوشته ایم.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2R}{dr^2} - \frac{Ke^2}{r}R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}R = -|E|R(r), \tag{9}$$

نخستین کاری که می کنیم پارامتر r را بایک پارامتربدون بعد مثل x که با رابطه $r = a_0\ x$ تعریف می شود جایگزین می کنیم، دراینجا a_0 یک واحد طول طبیعی یعنی همان شعاع بوهراست. دراین صورت رابطه بالا به شکل زیر درمی آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu\ a_0^2}\frac{d^2R}{dx^2} - \frac{e^2}{a_0 x}R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu a_0^2 x^2}R = -|E|R, \tag{10}$$

ویا

$$-\frac{d^2R}{dx^2} - \frac{2\mu\xi e^2}{\hbar^2 x}R + \frac{l(l+1)}{x^2}R = -\frac{2\mu a_0^2}{\hbar^2}|E|R, \tag{11}$$

حال اگر قرار دهیم

$$R(r) = R(a_0 x) \equiv \tilde{R}(x), \tag{12}$$

معادله به شکل زیر درمی آید:

$$-\frac{d^2}{dx^2}\tilde{R}(x) - \frac{2}{x}\tilde{R}(x) + \frac{l(l+1)}{x^2}\tilde{R}(x) = -\lambda^2\ \tilde{R}(x), \tag{13}$$

که درآن λ یک پارامتر بدون بعد و برابر است با $\lambda^2 = \frac{|E|}{R_y}$.

برای حل معادله 13 نخست به رفتارمجانبی آن برای x های بزرگ نگاه می کنیم. برای x های بزرگ این معادله به شکل زیردرمی آید

$$\frac{d^2\tilde{R}}{dx^2} \approx \lambda^2\ \tilde{R}, \tag{14}$$

که حل آن عبارت است از $\tilde{R}(x) \sim e^{-\lambda x}$. بنابراین حل کامل معادله شعاعی را به صورت

$$\tilde{R}(x) = g(x)e^{-\lambda x} \tag{15}$$

می نویسیم و باجایگذاری آن در 13 به معادله زیرمی رسیم

$$-\frac{d^2g(x)}{dx^2}+2\lambda\frac{d}{dx}g(x)+\left(\frac{l(l+1)}{x^2}-\frac{2}{x}\right)g(x)=0. \tag{16}$$

دراین مرحله می توان بانوشتن $g(x)$ به صورت یک سری به شکل $g(x)=\sum_{k=0}^{\infty}c_kx^{r+k}$ حل کرد که هم مقدار r را بدست خواهد داد و هم یک رابطه تکرار برای ضرایب بسط تولید خواهد کرد. برای r دو جواب بدست می آید که عبارتند از $r=l+1$ و $r=-l$ که دومی منجر به یک تابع موج نابهنجار خواهد شد. بنابراین جواب صحیح برای r برابر با $l+1$ است ورابطه تکرار به شکل زیر خواهد بود:

$$c_{k+1}=\frac{2[\lambda(k+l+1)-1]}{(k+1)[k+2(l+1)]}c_k. \tag{17}$$

رفتار مجانبی این سری با نگاه کردن به این رابطه تکرار برای k های بزرگ بدست می آید که نشان می دهد برای k های بزرگ

$$c_{k+1}\sim\frac{2\lambda}{k}c_k. \tag{18}$$

اما این رابطه بیان می کند که تابع $g(x)$ چنانچه سری ادامه پیدا کند به صورت $e^{2\lambda x}$ رفتار می کند و درنتیجه تابع موج $\tilde{R}(x)$ دربی نهایت واگرا خواهد شد. بنابراین سری $g(x)$ می بایست درجایی قطع شود. برای این کار لازم است که داشته باشیم

$$\lambda=\frac{1}{k_0+l+1}, \tag{19}$$

که درآن $k_0=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$ یک عدد صحیح است که بعد از آن چند جمله‌ای قطع می شود. تحت این شرایط سری $f(x)$ تبدیل به یک چند جمله ای

$$g(x)=\sum_{k=0}^{k_0}c_kx^{k+l+1}=x^{l+1}(c_0+c_1x+c_2x^2+\cdots c_{k_0}x^{k_0}) \tag{20}$$

می شود. درنتیجه خواهیم داشت

$$\lambda=\frac{1}{k_0+l+1},\qquad k_0=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{21}$$

بهتر است که نام k_0+l+1 را به یک عدد صحیح دیگر مثل n که آن را عدد کوانتومی اصلی می نامیم تغییر دهیم. دراین صورت خواهیم داشت

$$\lambda=\frac{1}{n},\qquad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{22}$$

این رابطه مهمترین رابطه ای است که ازحل معادله دیفرانسیل شعاعی بدست می آوریم و نحوه کوانتش انرژی را دراتم هیدروژن بیان می کند. هرگاه تعریف λ را به یاد بیاوریم به این نتیجه می رسیم که سطوح انرژی الکترون دراتم هیدروژن به صورت زیر هستند:

$$E_n = \frac{-R_y}{n^2}, \qquad n = 1,\ 2,\ 3, \cdots . \tag{23}$$

ازآنجا که داریم $l = n - 1 - k_0$ و $0 \leq k_0$ بنابراین به ازای هر عدد صحیح n عدد l مقادیر زیر را اختیار می کند:

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ \cdot\ n - 1. \tag{24}$$

بنابراین مقدار انرژی تنها به یک عدد کوانتومی یعنی n که عدد کوانتومی اصلی است وابسته است و مستقل از عدد کوانتومی l است. این واگنی ناشی ازیک تقارن اضافی است که برای پتانسیل های $V(r) = \frac{k}{r}$ و $V(r) = kr^2$ برقرار است. شکل ۱ طیف اتم هیدروژن را نشان می دهد. دقت کنید که دراین طیف سه عدد کوانتومی هرحالت را مشخص می کنند. این سه عدد عبارتند از n، l و m، اما انرژی تنها به یکی از این سه عدد یعنی n که آن را عدد کوانتومی اصلی می گوییم بستگی دارد. دراین شکل چند تا از ترازها و هم چنین گذارهایی که بین آنها انجام می شود و باعث ساطع شدن فوتون می شود، رسم شده‌اند. هم چنین برای لایه‌های با l های مختلف از نمادگذاری طیفی که درشیمی و فیزیک اتمی مرسوم است استفاده کرده ایم. دراین نمادگذاری به جای اعداد $l = 0,\ 1,\ 2,\ 3, \cdots$ از حروف $S,\ P,\ D,\ F$ استفاده می شود. در درس های آینده بازهم در باره این نمادگذاری و جزییات آن بیشتر خواهیم گفت.

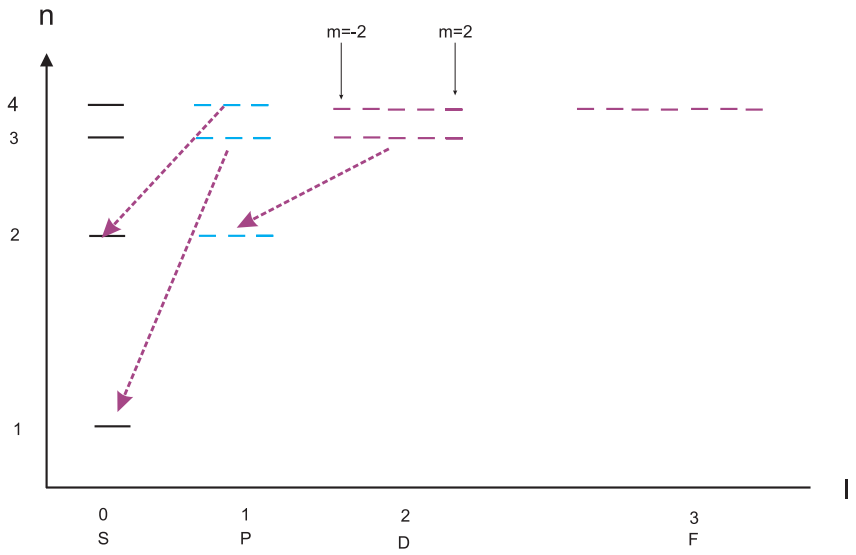
همانطور که در درس گذشته دیدیم، وابسته نبودن انرژی به عدد کوانتومی m به دلیل تقارن دورانی است، ولی وابسته نبودن انرژی به عدد کوانتومی l ناشی از یک تقارن اضافی است که اصطلاحاً به آن تقارن $SO(4)$ می گویند و خاص پتانسیل های $\frac{K}{r}$ و Kr^2 است.

به تابع موج شعاعی بازمی گردیم. با انتخاب عدد کوانتومی n بجای k_0 تابع $f(x)$ به شکل زیر درمی آید:

$$g(x) = x^{l+1} \sum_{k=0}^{n-l-1} c_k x^k. \tag{25}$$

و رابطه تکرار به صورت زیر خواهد بود:

$$c_{k+1} = \frac{2}{n} \frac{k + l + 1 - n}{(k+1)(k + 2(l+1)} c_k. \tag{26}$$



شکل ۱: طیف اتم هیدروژن.

این رابطه تکرار به عدد کوانتومی l نیز بستگی دارد. بنابراین توابع شعاعی را باید به صورت $f_{n,l}(r) = \frac{R_{n,l}(r)}{r}$ نوشت و درنتیجه شکل کامل توابع موج اتم هیدروژن به صورت زیر خواهد بود:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{R_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\phi), \qquad E_n = -\frac{R_y}{n^2}. \tag{27}$$

برای آنکه شکل دقیق تابع موج شعاعی را بدست آوریم می بایست رابطه تکرارِ 26 را به کار ببریم. از این رابطه می توان شکل کلی ضرایب را بدست آورد:

$$c_k = \frac{1}{k!}(\frac{2}{n})^k \frac{(l+k-n)!(2l+1)!}{(l-n)!(2l+k+1)!} c_0. \tag{28}$$

ضریب c_0 چنان تعیین می شود که تابع موج شعاعی بهنجارباشد. ازآنجا که تابع موج شعاعی به n و l هردو وابسته است نماد $R_{n,l}$ را برای آن بکار می بریم.

$$\tilde{R}_{n,l}(x) = x^{l+1} g_{n,l}(x) e^{-\frac{x}{n}} \tag{29}$$

و یا

$$\tilde{R}_{n,l}(x) = c_0 e^{-\frac{x}{n}} x^{l+1} \sum_{k=0}^{n-l-1} (\frac{2}{n})^k \frac{1}{k!} \frac{(l+k-n)!(2l+1)!}{(l-n)!(2l+k+1)!} x^k \tag{30}$$

ثابت c_0 را چنان می بایست تعیین کنیم که تابع موج شعاعی بهنجار باشد. این انتخاب را بعداً انجام می دهیم.

بااستفاده از رابطه 12، خواهیم داشت

$$R_{n,l}(r) = (\frac{r}{a_0})^{l+1} g_{n,l}(\frac{r}{a_0}) e^{-\frac{r}{n a_0}}, \tag{31}$$

و تابع موج کامل عبارت خواهد بود از:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r} R_{n,l}(\frac{r}{a_0}) Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{32}$$

دراینجا می بایست راجع به بهنجارش توابع موج شعاعی تصمیم بگیریم. می دانیم که

$$\int_0^\infty R_{n,l}^2(r) dr = 1 \tag{33}$$

که به معنای این است که

$$\int_0^\infty \tilde{R}_{n,l}^2(x) a_0 dx = 1, \quad \longrightarrow \quad \int_0^\infty x^{2(l+1)} f_{n,l}(x) e^{-2\frac{x}{n}} dx = \frac{1}{a_0}. \tag{34}$$

با استفاده از این رابطه می توانیم ضریب c_0 را نیز پیداکنیم. این کار برای توابع موج شعاعی که عدد کوانتومی n آنها کوچک است به سادگی از روی رابطه‌ی 30 انجام می شود. برای اعداد کوانتومی بزرگ تر می بایست از روابطی که برای توابع لاگر می شناسیم کمک بگیریم.

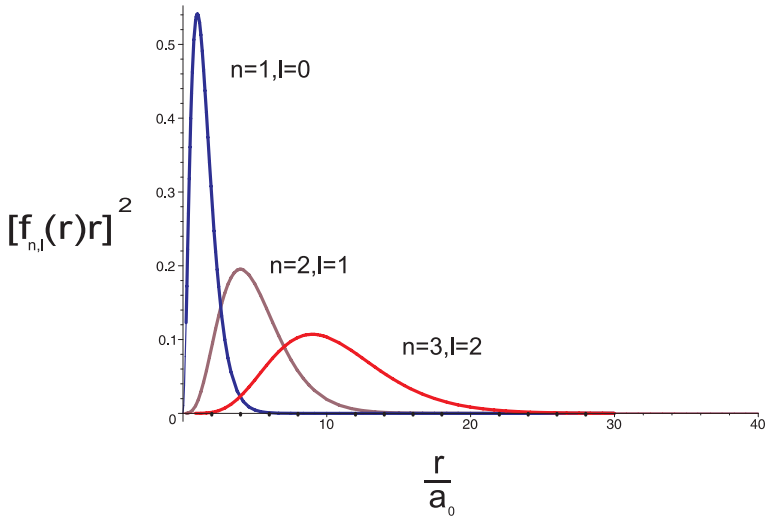
درزیر چند تا از توابع موج شعاعی را می نویسیم.

$$f_{1,0}(r) = \frac{R_{1,0}}{r} = 2(\frac{1}{a_0})^{\frac{3}{2}} e^{-r/a_0}$$

$$f_{2,0}(r) = \frac{R_{2,0}}{r} = 2(\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}} (1 - \frac{r}{2a_0}) e^{-r/2a_0}$$

$$f_{2,1}(r) = \frac{R_{2,1}}{r} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$f_{3,0}(r) = \frac{R_{3,0}}{r} = 2(\frac{1}{3a_0})^{\frac{3}{2}} \left[1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right] e^{-r/3a_0}$$



شکل ۲: چند تابع موج شعاعی برای اتم هیدروژن .

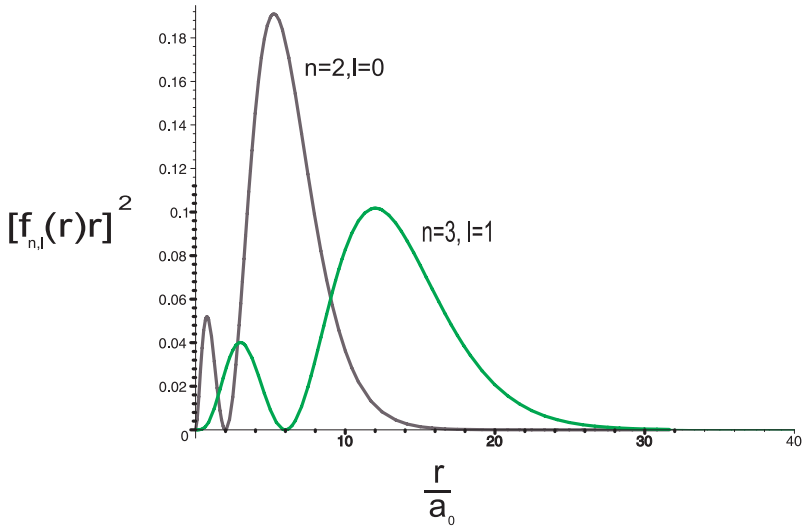
$$f_{3,1}(r) = \frac{R_{3,1}}{r} = \frac{4\sqrt{2}}{9}(\frac{1}{3a_0})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}(1-\frac{r}{6a_0})e^{-r/3a_0}$$
$$f_{3,2}(r) = \frac{R_{3,2}}{r} = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}(\frac{1}{3a_0})^{\frac{3}{2}}(\frac{r}{a_0})^2 e^{-r/3a_0}. \qquad (35)$$

تمرین: نشان دهید که توابع $f_{1,0}$، $f_{2,0}$ و $f_{2,1}$ بهنجار هستند.

شکل های ۲ و ۳ چندتا از توابع شعاعی را نشان می دهند. به این نکته دقت کنید که تعداد ماکزیمم های یک تابع شعاعی $R_{n,l}$ برابر است با $n-l$. هم چنین به این نکته دقت کنید که با افزایش n یعنی عدد کوانتومی اصلی، شعاع متوسط افزایش می یابد.

توابع $R_{n,l}(r)$ برحسب چند توابع وابسته لاگر $Laguerre$ $Laguerre$ $Associated$ که مجموعه ای از توابع متعامد هستند قابل بیان هستند. (برای فهم بهتر خواص این توابع به یک کتاب ریاضی فیزیک رجوع کنید.) بااستفاده از این ارتباط می توان متوسط توان های r را برای توابع موج حساب کرد. (ضمیمه شماره ۱). درزیر چند تاازاین متوسط هارا که درآینده به آنها احتیاج داریم می نویسیم:

$$\langle r\rangle_{n,l} = \frac{a_0}{2}\left[3n^2 - l(l+1)\right]$$
$$\langle r^2\rangle_{n,l} = \frac{a_0^2 n^2}{2}\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right]$$
$$\langle \frac{1}{r}\rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0 n^2}$$



شکل ۳: چند تابع موج شعاعی برای اتم هیدروژن.

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0^2 n^3 (l+\frac{1}{2})}. \tag{36}$$

تمرین: با محاسبه مستقیم $\langle r \rangle_{2,1}$ و $\langle r^2 \rangle_{1,0}$ را حساب کنید.

تمرین: وقتی که الکترون در لایه‌ی n,l است، میزان پهنای نسبی شعاع متوسط یعنی $\frac{\langle r^2 \rangle_{n,l} - \langle r \rangle^2_{n,l}}{\langle r \rangle^2_{n,l}}$ را بدست آورید.

به این نکته دقت کنید که متوسط فاصله از مرکز یعنی $\langle r \rangle$ که در مدل اتمی بوهر شعاع یک مدار دایره‌ای بود، بازهم به صورت مجذور عدد کوانتومی اصلی یعنی n افزایش می یابد، ولی این بار عدد کوانتومی l نیز در آن سهیم است.

۱.۲ تاثیرجرم محدود هسته

تاکنون فرض کردیم که هسته کاملاً ساکن است ودرواقع جرم آن بی نهایت است. دراین بخش تاثیرجرم محدود هسته را مطالعه می کنیم. درواقع می بایست اتم هیدروژن را به عنوان یک مسئله دوجسمی درنظربگیریم که هامیلتونی آن به شکل زیراست

$$H = \frac{P_1^2}{2M_1} + \frac{P_2^2}{2M_2} - \frac{e^2}{|\vec{R_2} - \vec{R_1}|} \tag{37}$$

که درآن $\vec{R_2}$ و $\vec{P_2}$ مکان و تکانه هسته و $\vec{R_1}$ و $\vec{P_1}$ مکان و تکانه الکترون را نشان می دهند. M_2 جرم هسته و $M_1 << M_2$ جرم الکترون است. حال متغیرهای جدیدی به شکل زیرتعریف می کنیم:

$$\vec{r} := \vec{R_1} - \vec{R_2}, \qquad \vec{R} := \frac{M_1 \vec{R_1} + M_2 \vec{R_2}}{M_1 + M_2}$$

$$\vec{p} := \frac{M_2\vec{P}_1 - M_1\vec{P}_2}{M_2 + M_1}, \qquad \vec{P} := \vec{P}_1 + \vec{P}_2. \tag{38}$$

تمرین: تحقیق کنید که متغیرهای جدید نیزکانونیک هستند یعنی

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}, \qquad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \tag{39}$$

وبقیه روابط جابجایی برابرصفرهستند.

ازنظرفیزیکی $\vec{r}$ مکان الکترون نسبت به هسته و $\vec{R}$ مکان مرکزجرم الکترون وهسته را نشان می دهد. ازآنجا که هسته خیلی سنگین تراز الکترون است مکان مرکز جرم تفاوت بسیارکمی با مکان هسته دارد. هم چنین $\vec{P}$ تکانه کل و $\vec{p}$ یک نوع تکانه نسبی الکترون نسبت به هسته رانشان می دهد. درواقع اگربه یاد بیاوریم که $\vec{P}_1 = M_1\vec{v_1}$ و $\vec{P}_2 = M_2\vec{v_2}$، آنگاه معلوم می شود که $\vec{p} = \mu(\vec{v_1} - \vec{v_2})$ که درآن μ جرم کاهش یافته است که مطابق با تعریف برابراست با

$$\mu = \frac{M_1M_2}{M_1 + M_2}. \tag{40}$$

ازآنجا که $M_1 << M_2$ جرم کاهش یافته تنهااندکی از جرم الکترون یعنی M_1 کمتراست. حال می توانیم هامیلتونی را برحسب متغیرهای جدید بنویسیم. یک محاسبه ساده نشان می دهد که هامیلتونی برحسب متغیرهای جدید برابراست با

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \tag{41}$$

که درآن $M = M_1 + M_2$ جرم کل و μ جرم کاهش یافته است. بدین ترتیب هامیلتونی مجموع دو هامیلتونی است که باهم جابجامی شوند ودردرسهای گذشته دیده ایم که ویژه توابع انرژی دراین حالت برابرند با حاصلضرب ویژه توابع هامیلتونی های جداگانه و ویژه مقادیر انرژی نیز عبارتند ازمجموع ویژه انرژی ها. اما هامیلتونی $\frac{P^2}{2M}$ هامیلتونی یک ذره آزاد است که ویژه توابع آن امواج تخت هستند. بنابراین شکل کامل ویژه حالت ها برای وقتی که جرم واقعی هسته و امکان حرکت آن را نیز در نظر می گیریم به صورت زیراست:

$$\Psi_{P,n,l,m}(R, r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}P\cdot R}\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi). \tag{42}$$

دراین رابطه R مکان مرکز جرم (که تقریبا بر مکان هسته منطبق است)، P تکانه مرکز جرم و r فاصله الکترون تا هسته است. این رابطه بیان می کند که همچنان که مرکز جرم یا هسته حرکت آزاد خود را ادامه می دهند، مثلاً دریک گاز هیدروژن، الکترون درون اتم در اوربیتال های مجاز و با انرژی های گسسته قرار دارد. این انرژی ها درست همان هایی است که برای یک اتم هیدروژن ایده‌آل بدست آوردیم با این تفاوت که می بایست در روابط مربوطه، مثلاً در ثابت رایدبرگ، جرم الکترون را با جرم کاهش یافته جایگزین کرد.

۳ ضمیمه ۱

دراین ضمیمه بعضی از انتگرال های شعاعی را محاسبه می کنیم. هدف ما محاسبه متوسط عمومی زیراست:

$$\langle R^q \rangle_{n,l,m} = \int_0^\infty r^{q+2} |R_{n,l}(r)|^2 dr. \tag{43}$$

توابع موج شعاعی برای اتم هیدروژن همگی به صورت $P(r)e^{-pr/a_0}$ هستند که درآن $P(r)$ یک چند جمله‌ای و p یک عدد صحیح است. بنابراین کافی است که مقداریک انتگرال کلی به شکل زیر را حساب کنیم:

$$I(k,p) = \int_0^\infty r^k e^{-pr/a_0} dr, \tag{44}$$

که درآن k و p اعداد صحیح هستند. فرض می کنیم که $k \geq 0$، یعنی $q \geq -2$. با انتگرال گیری جزء به جزء رابطه تکرارِ زیر را بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} I(k,p) &= \left[-\frac{a_0}{p} e^{-pr/a_0} r^k \right]_0^\infty + \frac{ka_0}{p} \int_0^\infty r^{k-1} e^{-pr/a_0} dr \\ &= \frac{ka_0}{p} I(k-1,p). \end{aligned} \tag{45}$$

اما $I(0,p)$ به سادگی به دست می آید:

$$I(0,p) = \int_0^\infty e^{-pr/a_0} dr = \frac{a_0}{p}. \tag{46}$$

در نتیجه رابطه کلی زیر بدست می آید:

$$I(k,p) = k! \left(\frac{a_0}{p} \right)^{k+1}. \tag{47}$$

با استفاده از این رابطه خواهیم داشت:

$$\langle 1/R \rangle_{1s} = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} dr = \frac{4}{a_0^3} I(1,2) = \frac{1}{a_0}, \tag{48}$$

$$\begin{aligned} \langle 1/R \rangle_{2s} &= \frac{4}{8a_0^3} \int_0^\infty r \left[1 - \frac{r}{2a_0} \right]^2 e^{-r/a_0} dr \\ &= \frac{1}{2a_0^3} \left[I(1,1) - \frac{1}{a_0} I(2,1) + \frac{1}{4a_0^2} I(3,1) \right] \\ &= \frac{1}{4a_0}. \end{aligned} \tag{49}$$

چند انتگرال مفید دیگر باهمین روش محاسبه می شوند:

$$\begin{aligned}
\langle 1/R\rangle_{2p} &= \frac{1}{4a_0},\\
\langle 1/R^2\rangle_{1s} &= \frac{2}{a_0^2},\\
\langle 1/R^2\rangle_{2s} &= \frac{1}{4a_0^2},\\
\langle 1/R^2\rangle_{2p} &= \frac{1}{12a_0^2}.
\end{aligned} \tag{50}$$