الباب الثالث

معادلة شرودنجر

Schrödinger Equation

Generated by CamScanner

١ - مبدأ التناظر

من المسلمة الثالثة فإن دالة الموجة $\Psi(q,t)$ لنظام كمي تحقق معادلة شرودنجر على الصورة :

$$\mathcal{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \qquad (86)$$

لجسيم واحد كتلته m يتحرك في مجال الجهد $V(\underline{r},t)$ ، فإن هذه المعادلة تصبح :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} \qquad (87)$$

نفرض وجود حل على الصورة الآتية :

$$\Psi(\underline{r},t) = A(\underline{r},t)\, e^{iS(\underline{r},t)/\hbar} \qquad (88)$$

حيث S تسمى تكامل التأثير Action integral (في الميكانيكا الكلاسيكية) . بالتعويض في المعادلة (87) ، نجد أن :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 A - \frac{i\hbar A}{2m}\nabla^2 S - \frac{i\hbar}{m}\underline{\nabla} A\cdot\underline{\nabla} S + \frac{A}{2m}(\underline{\nabla} S)^2 +$$

$$+VA = -\frac{\partial S}{\partial t}A + i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}$$

في النهاية عندما $\hbar \to 0$ ، فإن هذه المعادلة تصير :

$$(\underline{\nabla} S)^2 + 2mV = -2m\frac{\partial S}{\partial t} \qquad (89)$$

في حالات المجالات المحافظة - حيث يكون النظام الديناميكي في حالة مستقرة - فإن Ψ لا تعتمد على الزمن صراحة . بالتالي فإن كلاً من A و S تكون دوال في $\underline{r}$ فقط . في هذه الحالة يكون ...

المعـ.. (٦) ب.. : E ، الطاقة الكلية للنظام ، وتصبح (89)

على الصورة :

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2 = 2m\,(E - V) \qquad (90)$$

المعادلات (89) .. ، (90) هي معادلات هاملتون - جاكوبي للنظام الكلاسيكي المناظر . وهذا يعني أنه عندما $\hbar \to 0$ ، فإن التغير في الدالة الموجية (88) يتبع القوانين الكلاسيكية . كذلك فإن أقواس التبادل (50) تتلاشى كلها ، ويمكن إستبدال المؤثرات الكمية بالمتغيرات الدينامكية الكلاسيكية ، ويعرف هذا بمبدأ التناظر Correspondence Principle .

٢. <u>معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن :</u>

تستخدم معادلة شرودنجر لوصف الحالات المستقرة للنظام الكمي الغير معتمدة على الزمن (58) والتي يمكن كتابتها على الصورة :

$$\mathcal{H}\psi = E\psi \qquad (91)$$

في حالة جسيم واحد فإن المعادلة تصبح :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \qquad (92)$$

وعندما يتحرك الجسيم في خط مستقيم - مثلا المحور x - فإن المعادلة تأخذ الصورة البسيطة :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

أو:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \qquad (93)$$

حيث V و ψ دوال في x فقط.

في هذه الحالة، فإن الكثافة الإحتمالية $\rho(x)$ تعطى بالعلاقة

$$\rho(x) = \psi^*(x)\,\psi(x) = |\psi(x)|^2, \qquad (94)$$

وكثافة التيار الإحتمالى j يكون في الإتجاه الموجب لمحور x ومقداره:

$$j = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi^*}{dx}\right) = \frac{\hbar}{m} I_m\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx}\right) \qquad (95)$$

حيث "I_m" تعني الجزء التخيلي من المقدار داخل القوسين.

إذا كان j_I كثافة التيار الساقط، j_R المنعكس و j_T المار،

فإن معامل الإنعكاس R ومعامل المرور T يعرفان كما يأتي:

$$R = j_R/j_I \quad ; \quad T = j_T/j_I \qquad (96)$$

ولكي يكون للمعادلة (93) حل تتفق مع الشروط الطبيعية، فإنه

يتضح من (94) و (95) أن الدالة ψ و المشتقة الأولى $\frac{d\psi}{dx}$ يجب

أن يكونا محدودتين ومتصلتين في المنطقة التي تحدث فيها الحركة.

كذلك فإن شرط التعامد المعياري للدوال الموجية يكون:

$$\int_{-L}^{L} \psi_m^*\,\psi_n\,dx = \delta_{mn} \qquad (97)$$

حيث $2L$ طول حيز الحركة (في ... $L \to \infty$)

تطبيقات على الحركة في خط مستقيم :

١) الجسيم الحر Free Particle

في هذه الحالة يكون الجهد ثابتا أو مساويا للصفر . بوضع

$$P = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)} = \hbar k \qquad (98)$$

فإن الحل العام للمعادلة الموجية (93) يكون على الصورة :

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \qquad (99)$$

ويكون الدالة الموجية التي تصف الحالات المستقرة للجسيم على الصورة :

$$\psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

ولكي يكون هذا الحل مقبولا (حيث يمثل الجسيم بموجة مستوية متقدمة) فإن k يجب أن يكون عددا حقيقيا ، وهذا يتطلب أن يكون $E-V \geq 0$ هذا الشرط يعني أن طاقة الحركة للجسيم يجب أن يكون كمية موجبة (كما هو متوقعا كلاسيكيا) . وهي نفس النتيجة التي نحصل عليها بوضع $V=0$. من ذلك يتضح أن طيف الطاقة يكون متصلا .

يلاحظ أن الحل (99) يتكون من جزئيه : الأول يمثل موجة متقدمة في الإتجاه الموجب (ψ^+) والآخر في الإتجاه العكسي (ψ^-) .

لإيجاد الكثافات الإحتمالية المناظرة :

$$\rho^+ = |\psi^+|^2 = |A|^2 \;;\; \rho^- = |\psi^-|^2 = |B|^2 .$$

وللتيارات الاحتمالية:

$$j^{+} = \frac{\hbar}{m}|A|^{2} \quad , \quad j^{-} = \frac{\hbar}{m}|B|^{2}$$

(يطلق على j^{+} التيار الاحتمالي الساقط incident و j^{-}
التيار الاحتمالي المنعكس reflected).

يلاحظ أن الدوال $\{e^{\pm ikx}\}$ لا تكون قابلة للتكامل التربيعي
في الحيز $(-\infty,\infty)$ ، وبالتالي لا تحقق شرط التعامد المعياري (٩٦)،
وإنما تحقق الشرط (٧٠) اللازم في حالة الطيف المتصل.

من وجهة نظر طبيعية فإنه يبدو مستحيلا وجود هذا الجسيم الحر حيث
يوجد دائما حيزا محدودا يتحرك داخله الجسيم ، ويصل الجهد إلى مالانهاية
عند جدار هذا الحيز ، مما يجعل الجهد متغيرا (وليس ثابتا) في مدى الحركة.
لذلك فإنه في وجود الحيز المحدود ، فإن ψ تحقق شروطا دورية ،
أي تأخذ نفس القيمة عند نقطتين المسافة بينهما تساوي المدى L
للحيز ، ويكون:

$$\psi(x) = \psi(x+L)$$

وعلى سبيل المثال ، للدوال $e^{\pm ikx}$ يكون:

$$e^{\pm ikx} = e^{\pm ik(x+L)}$$

أي أنه

$$e^{\pm ikL} = 1$$

$$\cos kL = 1 \quad , \quad \sin kL = 0$$

ومنه :

$$k = \frac{2\pi}{L} n \quad ; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

أي أنه k يأخذ قيما منفصلة ، ويكون الطيف منفصلا ، حيث تعطى الطاقة الكلية E بالصيغة :

$$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m L^2} n^2$$

وفي هذه الحالة يمكن معايرة الدوال الموجية في المدى $[0, L]$ ، فإذا كانت $\psi = C e^{ikx}$ ، فإن (٩٦) تعطى :

$$\int_0^L |C|^2 dx = 1$$

ومنه :

$$|C| = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

من ذلك نرى أنه بوضع شروط دورية على الدالة الموجية ، فإن الطيف يصبح منفصلا ، كما يمكن تطبيق الشرط المعياري (٩٦) لتعيين القيم المطلقة للثوابت الاختيارية في الحل العام للمعادلة الموجية.

٢) الحاجز الجهدي : Potential barrier

نعتبر جسيما كتلته m يتحرك في مجال الجهد الآتي :

$$V(x) = 0 \qquad x < 0 \qquad (١٠٠)$$

$$= V_0 \qquad x > 0$$

حيث V_0 ثابت . يلاحظ أن دالة الجهد ليست ثابتة في كل $(-\infty,\infty)$ لذلك نفرض أن $\psi^{I}(x)$ هي الدالة الموجية لقيم $x<0$ و ψ^{II} لقيم $x>0$. بالتعويض في معادلة شرودنجر (93) نحصل على :

$$\frac{d^2\psi^{I}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\,\psi^{I} = 0 \qquad x<0 \qquad (101)$$

$$\frac{d^2\psi^{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E-V_0)\,\psi^{II} = 0 \qquad x>0 \qquad (102)$$

كل من المعادلتين (101) و (102) تناظران حركة جسيم حر ، فيكون الحل العام - كما في (99) - على الصورة الآتية :

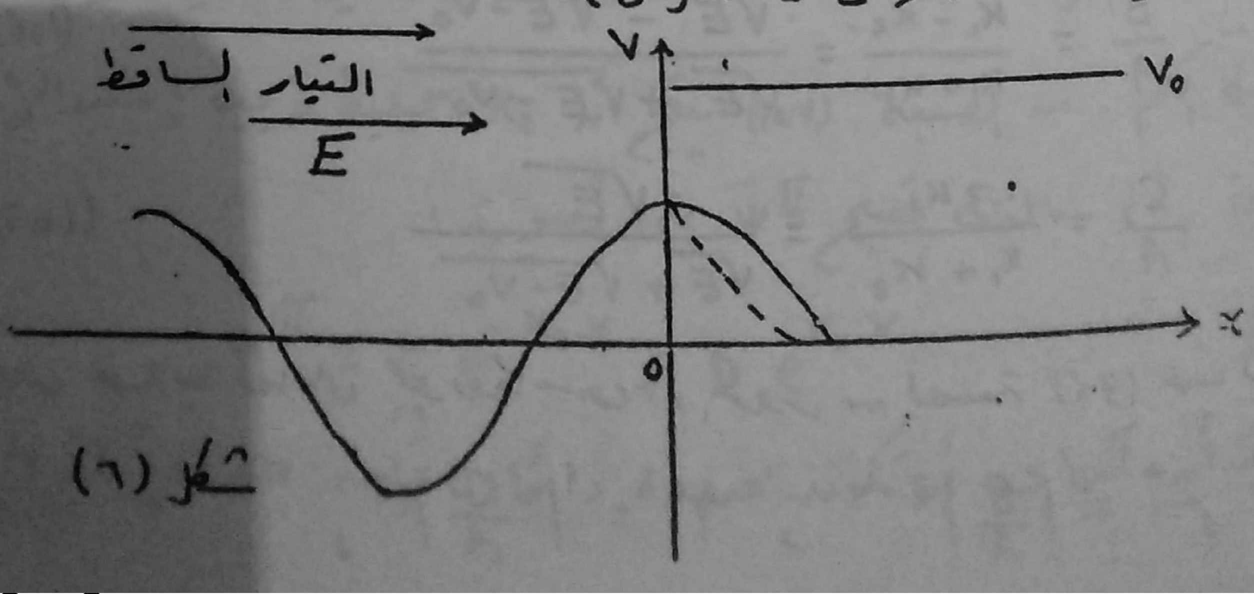
$$\psi^{I}(x) = A\,e^{ik_1x} + B\,e^{-ik_1x} \;,$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \quad \text{،} \quad x<0 \qquad (103)$$

$$\psi^{II}(x) = C\,e^{ik_2x} + D\,e^{-ik_2x} \;,$$

$$E-V_0 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \quad \text{،} \quad x>0 \qquad (104)$$

حيث A ، B ، C و D ثوابت . يلاحظ أن هذا الحل يكون موجودا فقط عندما $E>0$ - شكل (٦) -



شكل (٦)

سندرس حالتان:

٢) عندما $E > V_0$: كلاسيكيا ، فإنه جميع الجسيمات تتمكن من المرور خلال حاجز الجهد عند $x=0$. هذا الوضع يختلف في ميكانيكا الكم.

الحد الأول في ψ^{I} يمثل موجة متقدمة إلى اليمين والحد الثاني موجة متقدمة إلى اليسار ، وبالمثل بالنسبة إلى ψ^{II} . وحيث أنه المصدر موجود عند $-\infty$ ، فإنه لا يوجد حركة للجسيمات إلى اليسار عندما $x>0$.
∴ بالتالي فإن $D=0$. لتعيين الثوابت A ، B و C ، نطبق شروط الإتصال عند $x=0$:

$$\psi^{I}\Big|_{x=0} = \psi^{II}\Big|_{x=0} \;;\; \frac{d\psi^{I}}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi^{II}}{dx}\Big|_{x=0} \qquad (105)$$

من ذلك ينتج أنه:

$$A + B = C$$

$$k_1(A-B) = k_2 C$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0}} \quad , \qquad (106)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0}} \qquad (107)$$

ويمكن حساب معاملي الإنعكاس والمرور من الصيغة (96) حيث نجد:

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \quad , \quad T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 , \qquad (108)$$

حيث يمثل R شدة الموجة المنعكسة بالنسبة للساقطة ، وشدة الموجة المارة خلال حاجز الجهد بالنسبة للساقطة . وفي نفس الوقت ، فإن R و T يمثلان كثافة الإحتمال النسبية للجسيمات المنعكسة والمارة بالنسبة للجسيمات الساقطة ، حيث يمكن التأكد دائماً أنه :

$$R + T = 1 \tag{109}$$

يلاحظ من الصيغ (106) و (١٠٧) أنه عندما $E \to \infty$ ، فإن :

$$B \to 0 \quad و \quad C \to A$$

في هذه الحالة تمر جميع الجسيمات خلال الحاجز الجهدي ، كما هو الحال في الميكانيكا الكلاسيكية .

ب) عندما $E < V_0$: كلاسيكياً ، فإن الجسيمات لا تستطيع المرور خلال الحاجز الجهدي ، لأنه في هذه الحالة يكون

$$E - V_0 = \frac{P^2}{2m} < 0$$

أي أن طاقة الحركة تكون سالبة . سنرى أن هذا يكون صحيحاً أيضاً في ميكانيكا الكم . من الصيغة (١٠٤) ينتج أن K_2 تخيلية ويجب إستبدالها بالقيمة iK_2 . بالتالي تصبح ψ^{II} على الصورة :

$$\psi^{II} = C e^{-K_2 x} + D e^{K_2 x} \tag{110}$$

وحيث أن ψ^{II} يجب أن تكون محدودة دائماً ، فإن $D = 0$ (كما في م) ..

(الخط المتقطع في شكل (٦) يمثل الدالة ψ^{II}).

في هذه الحالة نستنتج من الصيغة (106) أنه :

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{K_1 - iK_2}{K_1 + iK_2}\right|^2 = 1 \qquad (111)$$

أي أن جميع الجسيمات تنعكس عند $x=0$. بالرغم من ذلك فإنه يوجد

إحتمال لإختراق الجسيمات الحاجز الجهدي ! وذلك لأن :

$$|\psi^{II}|^2 = |C|^2 e^{-2K_2 x} = |A|^2 \frac{4E_0}{V_0} e^{-2K_2 x}$$

وهذه تمثل درجة إحتمال إختراق الحاجز لمسافة $x>0$.

من الصيغ (106) و (107) يلاحظ أنه :

$$\lim_{V_0 \to \infty} B = -A \quad ; \quad \lim_{V_0 \to \infty} C = 0$$

بالتالي تصير (103) و (110) إلى الصور :

$$\psi^{I} = 2iA \sin K_1 x \quad ; \quad \psi^{II} = 0$$

وهذا يعني أن الدالة الموجية تنعدم عند الحاجز الذي يصل الجهد عليه إلى ∞ .

٣) التأثير السردابي : Tunnel effect

نفرض تيارا من الجسيمات ساقط من النقطة $x=-\infty$ ويتحرك في خط مستقيم ليصطدم بالحاجز الجهدي المعرف بدالة الجهد :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & 0<x<a \\ 0 & x>a \end{cases} \qquad (112)$$

نهتم هنا بالحالة عندما $E < V_0$ ، حيث ان المتوقع كلاسيكيا الا يمر اى جسيم خلال الحاجز الجهدى عند $x=0$. نفرض أن ψ^{I} ، ψ^{II} و ψ^{III} تمثل الدوال الموجية فى المناطق $x<0$ ، $0<x<a$ و $x>a$ على الترتيب ، حيث تكون معادلات شرودنجر هى :

$$\frac{d^2\psi^{I}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\,\psi^{I} = 0$$

$$\frac{d^2\psi^{II}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\,\psi^{II} = 0$$

$$\frac{d^2\psi^{III}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\,\psi^{III} = 0$$

حلول هذه المعادلات تكون :

$$\psi^{I} = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \qquad x<0$$

$$\psi^{II} = C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x} \qquad 0<x<a$$

$$\psi^{III} = F e^{ikx} \qquad x>a$$

حيث :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \; ; \; V_0 - E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \tag{113}$$

، والحل ψ^{III} لا يحتوى على الحد e^{-ikx} لأنه لا توجد أمواج منعكسة عندما $x>a$. الشروط الحدية للدوال الموجية عند كل من $x=0$ و $x=a$ تكون :

$$\psi^{I}\Big|_{x=0} = \psi^{II}\Big|_{x=0} \; ; \; \frac{d\psi^{I}}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi^{II}}{dx}\Big|_{x=0}$$

$$\psi^{II}\Big|_{x=a} = \psi^{III}\Big|_{x=a} \; ; \; \frac{d\psi^{II}}{dx}\Big|_{x=a} = \frac{d\psi^{III}}{dx}\Big|_{x=a}$$

ومن ٥ ، الشروط نحصل على

$$A + B = C + D$$

$$ik(A - B) = \alpha(C - D)$$

$$Ce^{\alpha a} + De^{-\alpha a} = Fe^{ika}$$

$$\alpha(Ce^{\alpha a} - De^{-\alpha a}) = ikFe^{ika}$$

بحل هذه المعادلات نستنتج أنه :

$$\frac{B}{A} = 2(\alpha^2 + k^2)\sinh \alpha a / \Delta$$

$$\frac{C}{A} = -2e^{-\alpha a}(k^2 - ik\alpha) / \Delta$$

$$\frac{D}{A} = 2e^{\alpha a}(k^2 + ik\alpha / \Delta$$

$$\frac{F}{A} = 4ik\alpha\, e^{-ika} / \Delta$$

$$\Delta = 4ik\alpha \cosh \alpha a - 2(\alpha^2 - k^2)\sinh \alpha a$$

لحساب التيار الاحتمالي الساقط نعوض في الصيغة (95) بالدالة

$\psi = Ae^{ikx}$ ، حيث نحصل على :

$$j_I = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

بالمثل للحصول على التيار المنعكس نعوض بالدالة $\psi = Be^{-ikx}$ ،

نحصل على :

$$j_R = -\frac{\hbar k}{m}|B|^2$$

(لاحظ الإشارة السالبة للتيار المنعكس)