

الباب السادس

معادلة شرودنجر الزمنية: Time dependent Schrodinger equation

لإيجاد معادلة الأمواج المصاحبة لجسيم ما نبدأ أولاً بمعادلة موجة توافقية مستوية plane harmonic matter wave طولها λ وتنتشر في الاتجاه الموجب لـ x . معادلة هذه الموجة هي:

$$\Psi = A \sin 2 \pi \left(f t - \frac{x}{\lambda} \right) \quad \dots (1)$$

حيث Ψ هي الكمية التي تتذبذب. (وهي الإزاحة في حالة الأمواج الميكانيكية). لكن من النظرية الكمية $E = h f$ ومن فرض دي برولى $\lambda = \frac{h}{p}$ ، حيث E طاقة الجسيم ، p كمية حركته . وبالتعويض في المعادلة الموجية نحصل على :

$$\therefore \Psi = A \sin \frac{2 \pi}{h} (E t - p x)$$

إذا كانت V هي طاقة الموضع للجسيم تكون الطاقة الكلية له .

$$E = \frac{p^2}{2 m} + V \quad \dots (2)$$

بمفاضلة المعادلة (١) لإيجاد المعادلة التفاضلية لـ Ψ .

١ - بالنسبة إلى t :

$$\therefore \frac{d\Psi}{d t} = \frac{2 \pi}{h} E A \cos \frac{2 \pi}{h} (E t - p x)$$

٢ - بالنسبة إلى x :

$$\frac{d\Psi}{d x} = - \frac{2 \pi}{h} p A \cos \frac{2 \pi}{h} (E t - p x)$$

وبالمفاضلة مرة ثانية :

$$\therefore \frac{d\Psi}{dt^2} = - \frac{4\pi^2}{h^2} E^2 A \sin \frac{2\pi}{h} (Et - px)$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = - \frac{4\pi^2}{h^2} p^2 A \sin \frac{2\pi}{h} (Et - px)$$

ومن معادلة (2) $E = \frac{p^2}{2m} + V$ يمكن وضع المعادلة التفاضلية التي تعطى المعادلة

الموجبة على الصورة :

$$\frac{d\Psi}{dt} = a \frac{d^2\Psi}{dx^2} + b V \Psi \quad \dots (3)$$

حل هذه المعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية ، والتي تصف الموجة يكون على

الصورة :

$$\Psi = A \sin \frac{2\pi}{h} (Et - px) + B \cos \frac{2\pi}{h} (Et - px) \quad \dots (4)$$

حيث A & B ثوابت

بمفاضلة المعادلة (4) وبالتعويض في معادلة (3)

وبمساواة معاملات حدود الجيب وجيب التمام كل على حدة ، ولذا نتحقق المعادلة

لجميع قيم t نحصل على :

$$- \frac{2\pi}{h} E B = - a \frac{4\pi^2}{h^2} p^2 A + b V A$$

$$\frac{2\pi}{h} E A = - a \frac{4\pi^2}{h^2} p^2 B + b V B$$

ومنها :

$$E = a \frac{2\pi}{h} \frac{A}{B} \cdot p^2 - \frac{bh}{2\pi} \frac{A}{B} \cdot V$$

$$E = - a \frac{2\pi}{h} \frac{B}{A} p^2 + \frac{bh}{2\pi} \frac{B}{A} \cdot V$$

هذه المعادلات تنطبق على المعادلة (2) إذا كان :

$$a \frac{2\pi}{h} \frac{A}{B} = \frac{1}{2m} ; - \frac{bh}{2\pi} \frac{A}{B} = 1$$

$$- a \frac{2\pi}{h} \frac{B}{A} = \frac{1}{2m} ; \frac{bh}{2\pi} \frac{B}{A} = 1$$

$$A^2 = - B^2 \quad \text{بحذف } a \text{ أو } b \text{ نحصل على :}$$

$$A = \pm i B$$

$$\therefore a = \frac{ih}{4\pi m} \quad \text{وباعتبار } A = -i B \quad \text{نجد أن}$$

$$b = \frac{2\pi}{ih}$$

وتصبح المعادلة الموجية (3)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{ih}{4\pi m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2\pi}{ih} V \Psi$$

$$\therefore - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \quad \dots (5)$$

وتعرف هذه المعادلة بمعادلة شرودنجر الزمنية في اتجاه واحد . وتجمع هذه المعادلة للأمواج المادية matter waves خصائص التدفق الحرارى heat flow في الجوامد وخصائص أخرى تشابه انتشار الموجات الميكانيكية (الصوتية) في الأوساط المرنة .

المعنى الطبيعي للدالة Ψ :

تمثل الدالة Ψ في معادلة شرودنجر تلك الكمية التي تتذبذب في الفراغ (الأبعاد

الثلاثة) وأيضا على مدى الأزمنة المختلفة . ويجب أن يتحقق ثلاثة شروط لهذه الدالة Ψ :

$$(i) \iiint_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx dy dz \quad \text{لابد أن يكون التكامل محدودا}$$

(ii) يجب أن تكون Ψ محدودة وأحادية القيمة

(iii) يجب أن تكون دوال متصلة $\frac{\partial \Psi}{\partial z}$, $\frac{\partial \Psi}{\partial y}$, $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$

عندما نعالج تجربة تكون فيها الحالة الجسيمية للمادة هي الأساس ، كما هو الحال في تجارب الاستطارة scattering ، يكون مربع القيمة المطلقة للدالة $|\Psi|^2$ متناسبا مع عدد الجسيمات التي تعبر وحدة المساحات العمودية على اتجاه حركتها في الثانية الواحدة .
 أما عندما نعالج مثل هذه المشاكل في الضوء (البصريات) حيث تكون الطبيعة الموجية للفوتونات هي المطلوبة فإننا نعتبر شدة الضوء (عدد الفوتونات التي تعبر وحدة المساحات في الثانية) متناسبة مع $|\Psi|^2$

الحالة العيارية : Normalization condition

مربع الدالة Ψ يعطى درجة احتمال وجود جسيم في مكان معين في لحظة معينة وتعرف كثافة الاحتمال probability density بالمقدار $|\Psi|^2$.
 وبدهى أن الاحتمال الكلى لوجود جسيم ما هو الوحدة . أى أن :

$$\iiint |\Psi|^2 dx dy dz = 1$$

حيث يكون التكامل على جميع القيم الممكنة لـ x, y, z .
 عندما تستوفى الدالة الموجية Ψ هذا الشرط يقال عنها : إنها حالة عيارية normalization condition .

الحالة العمودية : Orthogonality condition

عندما يتلاشى قيمة التكامل السابق ، أى أن :

$$\iiint |\Psi|^2 dx dy dz = 0$$

يكون الجسيم غير

موجود على الإطلاق وتسمى الحالة عندئذ بالحالة العمودية orthogonal

معادلة شرودنجر الغير زمنية :

Time independent Schrodinger equation

عند معالجة الحالات الموقوفة أو الكمية Stationary or quatum states تمثل المعادلة

الموجية والادلة Ψ حالة موجة موقوفة stationary wave يظهر فيها الزمن فى حد منفصل

separate factor أى أن :

$$\begin{aligned}\Psi &= X(x, y, z) \cdot e^{-i\omega t} \\ &= X(x, y, z) \cdot e^{-2\pi i f t} \\ &= X(x, y, z) \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} \cdot E t}\end{aligned}$$

حيث $X(x, y, z)$ تمثل السعة الموجية وتتوقف على إحداثيات المكان فقط . بإجراء

التفاضل جزئياً مرة بالنسبة للزمن ومرتين بالنسبة لإحداثيات المكان ، نحصل على :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{2\pi i}{h} E e^{-\frac{2\pi i}{h} E t} X \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= e^{-\frac{2\pi i}{h} E t} \cdot \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} : \dots \text{etc} \dots\end{aligned}$$

بالتعويض فى معادلة شرودنجر الزمنية ذات البعد الواحد

$$\therefore E e^{-\frac{2\pi i}{h} E t} \cdot X = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} e^{-\frac{2\pi i}{h} E t} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + V e^{-\frac{2\pi i}{h} E t} X$$

$$\therefore \frac{d^2 \Psi}{dx} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

هذه هي معادلة شرودنجر الغير زمنية للبعد الواحد . أما اذا استخدمنا الأبعاد

الثلاثة x y z تصبح المعادلة :

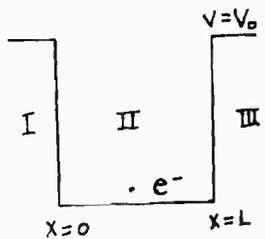
$$\nabla^2 X + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) X = 0$$

operator $\nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ ويسمى لابلاس أوبريتور حيث

وواضح من هذه المعادلة أنه إذا كانت $E > V$ تعطى المعادلة حلاً على شكل دالة الجيب ، أما إذا كانت $E < V$ فإن الدالة Ψ تكون على شكل دالة أسية .

Electron in a square potential well : الإلكترون في بئر جهد قائم :

إذا اعتبرنا إلكترون حر يتحرك في الاتجاه الموجب x بسرعة ثابتة تكون طاقته موضعه مساوية للصفر حيث لا تؤثر عليه أى قوى خارجية . أما إذا أثرت على الإلكترون قوى تلزمه على الوجود والحركة فى المنطقة بين $x = L$ & $x = 0$ داخل بئر جهد [شكل (٦-١)] . فإن طاقة الوضع تكون كبيرة وعندئذ يقال أن الإلكترون ساقط فى بئر الجهد potential well ارتفاعه يساوى طاقة الوضع للإلكترون V_0



شكل (٦-١) حل معادلة شرودنجر فى هذه الحالة نفرض ثلاث مناطق I , II , III كما فى الشكل .

داخل المنطقة II يكون الجهد ثابتا . ولكن للتبسيط يمكن اعتبار بدء قياس الجهد ، أى نقطة الأصل ، عند هذا الجهد الإلكتروني .

∴ يكون جهد الإلكترون اعتباريا يساوى صفراً ويكون الجهد عند قمة البئر مساويا لجهد الإلكترون (يجب أن يساوى الجهد هنا بالقياس المطلق صفرا حيث إن الإلكترون يكون حرا تماما ، ولا يرتبط إطلاقا بالقوى الجاذبة) .

وبهذه الطريقة نضع فى معادلة شرودنجر لهذا الإلكترون $V = 0$ فتصبح :

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{8 \pi^2 m E}{h^2} \Psi = 0$$

ولهذه المعادلة الحل العام الآتى :

$$\Psi = A \sin \omega x + B \cos \omega x \quad \dots (1)$$

$$\omega^2 = \frac{8 \pi^2 m E}{h^2} \quad \text{حيث } A \text{ \& } B \text{ ثوابت ،}$$

داخل المنطقة III ، I يكون الجهد V_0 أكبر كثيرا من E خاصة فى حالة الآبار

العميقة ، لذلك توضع معادلة شرودنجر على الصورة :

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (V_0 - E) \Psi = 0$$

الحل العام للمعادلة يعطى بوال أسية :

$$\therefore \Psi = C e^{-\omega x} + D e^{\omega x}$$

حيث C & D ثوابت ،

$$\omega^2 = \frac{8 \pi^2 m (V_0 - E)}{h^2}$$

لكن من أحد شروط الدالة Ψ أن تكون دائما محدودة ، لذلك فبالنسبة للمنطقة I عندما

تؤول x إلى $-\infty$ فان الحد $C e^{-\omega x}$ يؤول إلى ما لا نهاية ، وهذا طبعا غير جائز ، لذلك

$$\therefore C = 0$$

يجب أن يتلاشى الثابت

وتكون المعادلة الموجية فى المنطقة I هى :

$$\Psi = D e^{\omega x} \quad \dots (2)$$

وبالمثل فى المنطقة III عندما تؤول $x \rightarrow \infty$ فإن الحد $D e^{\omega x}$ يتلاشى فقط

إذا تلاشت (D) أى أن $D = 0$ ، فى هذه الحالة تكون معادلة الموجة فى المنطقة III

هى :

$$\Psi = C e^{-\omega x} \quad \dots (3)$$

$$\frac{d \Psi}{d x} \quad \text{أيضا من شروط الدالة } \Psi \text{ أن تكون متصلة وكذلك}$$

∴ عند حدود بئر الجهد $X = L$ أو $X = 0$ وباستعمال معادلة (1)

$$\therefore \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_{x=L} = A \omega \cos \omega L - B \omega \sin \omega L \quad \dots (4)$$

أما إذا استخدمنا المعادلة (3) للحصول على نفس المقدار :

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_{x=L} = -\omega' C e^{-\omega' L} = -\omega' \Psi \quad \dots (5)$$

يجب أن تكون المعادلتان السابقتان (4) ، (5) متطابقتين

إذ أنهما يمثلان نفس القيمة . ولكن إذا ألت V_0 إلى ∞ فإن المعادلة (4) لا تتغير حيث

إن قيمة V_0 لا تظهر في ω ، بينما باستخدام المعادلة (5) نجد أن :

$$\left(\frac{\delta \Psi}{\delta x} \right)_{x=L} \longrightarrow \infty$$

تؤول إلى ما لا نهاية ما لم تؤول Ψ إلى الصفر . حيث إن :

$$\omega' = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

$$V_0 \longrightarrow \infty \quad \omega' \longrightarrow \infty$$

ونتيجة لذلك فإن قيمة Ψ عند $x = 0$ أو عند $x = L$ تقترب من الصفر كلما ازدادت

قربا قيمة V_0 من ما لا نهاية ويكون تغير الدالة Ψ داخل بئر الجهد خاضعا لدالة الجيب ،

شكل (٦ - ٢)

قيم الطاقة Eigen values :

يمكن إيجاد مستويات الطاقة في بئر جهد لا نهائى العمق للإلكترون ($V_0 = \infty$)

باستخدام المعادلة (1) والتعويض فيها بشروط الحدود . boundary conditions .

عند $x = 0$ ، $x = L$ تكون $\Psi = 0$

$$\therefore B = 0 \quad , \quad \sin \omega L = 0$$

$$\Psi = A \sin \omega x + B \cos \omega x$$

$$\text{at } x = 0 \quad \therefore 0 = B$$

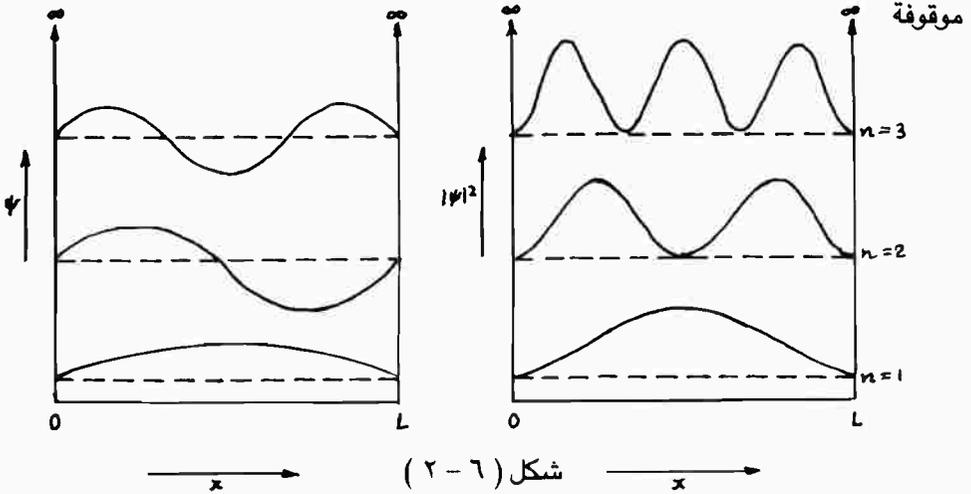
$$\text{at } x = L \quad 0 = A \sin \omega L + 0$$

$$\therefore \omega L = n \pi$$

$$\therefore \frac{n^2 \pi^2}{L^2} = \omega^2 = \frac{8 \pi^2 m E}{h^2}$$

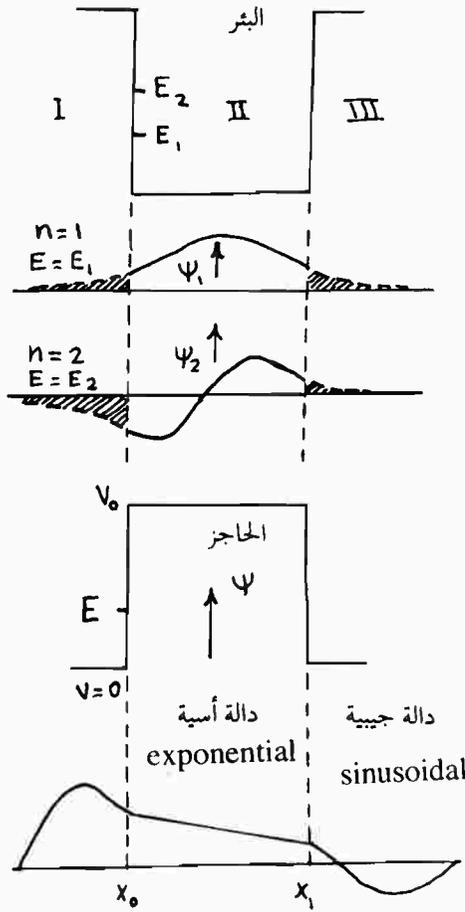
$$\therefore E_n = \frac{n^2 h^2}{8 m L^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

حيث n هو العدد الكمي وتعطى هذه المعادلة مستويات الطاقة للإلكترون في حالته الموقوفة .
وجود الاعداد الكمية ومستويات الطاقة المتفرقة discrete energy levels يميز دائما حل
جميع حالات الجسيمات التي يحددها حيز محبوس من الفراغ حيث تكون موجتها المصاحبة



Tunnel effect ظاهرة الانفاق

عندما تكون طاقة الموضع للإلكترون V_0 صغيرة أى أنه عندما يكون عمق بئر الجهد صغيرا نجد أننا إذا استخدمنا شروط الحدود boundary conditions لإيجاد الدالة الموجية Ψ هناك فإن قيمتها لا تتلاشى بل توجد قيم لـ Ψ داخل كل من المنطقتين I & III ،
تقل حسب دالة أسية ، كلما ازدادت x سواء في الاتجاه الموجب أو السالب ،



ولما كان Ψ قيمة حقيقية داخل حاجزى الجهد Potential barrier III & I ، لذلك تكون $|\Psi|^2$ قيمة حقيقية . أي احتمال حقيقى لوجود الإلكترون خارج بئر الجهد ، وهذا هو الجديد فى الموضوع فالنظرية الكلاسيكية لا تدع أى احتمال لوجود الجسيم خارج بئر الجهد ، بينما ثبت بواسطة الميكانيكا الموجية وجود احتمال لأن يخترق الجسيم حاجز بئر الجهد ويتواجد فى المنطقة المحرمة كلاسيكيا ، وتسمى هذه الظاهرة بظاهرة الانفاق Tunnel effect .

انظر شكل (٦ - ٣)

وتزداد هذه الظاهرة وضوحا كلما نقصت قيمة V_0 شكل (٦-٣)

يمكن إذا للإلكترونات أن تخترق حاجزا سمكه $(x_1 - x_0)$ وتعرف درجة احتمال النفاذ transmission probability بأنها النسبة بين $|\Psi|^2$ مقدره عند x_1 إلى $|\Psi|^2$ مقدره عند البعد x_0 ، وتستخدم ظاهرة الانفاق فى الانبعاث المجالى للإلكترونات من الجوامد Field - ion microscope فى ميكروسكوب الانبعاث الأيونى المجالى .

مسائل وتعارين علي الباب السادس

١ - أثبت أن $\cos 2 \pi (px / h)$ هو حل لمعادلة شرودنجر في بعد واحد .

٢ - احسب احتمال الأنفاق tunneling probability لإلكترون في بئر جهد حيث

$(V_0 - E) = 1 \text{ eV}$ واتساع حاجز الجهد 1 \AA وقارن بين هذه القيمة والقيمة المناظرة

لإلكترون ساقط في بئر عمقه 10 eV واتساع حاجز جهده 10 \AA .

٣ - جسم صغير كتلته 1 mg يتحرك بين حائطين المسافة بينهما 1 cm أوجد أقل

سرعة للجسم .

٤ - يسقط إلكترون طاقته 30 eV على حائل (بئر جهد) مربع ارتفاعه 40 eV ، ما

احتمال نفاذ tunnel probability للإلكترون في الحاجز إذا كان سمكه L يساوي 0.1 nm

، 1 nm ،

الـ حل :

$$U - E = 10 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$T = e^{-2KL}$$

احتمال الأنفاق في الحاجز هو

$$K = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{(h/2\pi)}$$

حيث

وبالتعويض نجد أن الاحتمال يزداد من القيمة 8.49×10^{-15} إلى القيمة 0.0392

عندما يقل سمك الحاجز من 1 إلى 0.1 نانومتر .

٥ - استخدم نموذج جسم ساقط في بئر جهد لحساب مستويات الطاقة لنيوترون

موجود بنواة قطرها $2 \times 10^{-5} \text{ nm}$.

هل الفروق بين مستويات الطاقة حقيقية ؟ .

٦ - الدالة الموجية Ψ لجسيم يتحرك فى بئر جهد ذى بعد واحد هى :

$$\Psi(x) = A \sin(n\pi x/L)$$

استخدم الحالة العيارية normalization condition لإثبات أن الثابت A يعطى

$$A = \sqrt{2/L} \text{ بالمعادلة :}$$

normalization condition $\int_0^L |\Psi|^2 dx = 1$: الحل

ثم أجرى التكامل .

٧ - متذبذب توافقى ذى بعد واحد دالته الموجية هى :

$$\Psi = A \times e^{-bx^2}$$

أثبت أن Ψ تحقق معادلة شرودنجر ثم أوجد الطاقة الكلية E وهل هذه هى الطاقة

الأرضية أم طاقة أول مستوى إثارة ؟ .

٨ - جسيم كتلته m_0 موجود فى بئر جهد اتساعه L . إذا كان اتساع البئر صغيرا

فإن الحركة تصير نسبوية وتصبح الطاقة $E = p^2 / 2 m_0$ غير حقيقية .

أ - أوجد قيم مستويات الطاقة للجسيم فى هذه الحالة .

ب - وإذا كانت $L = 10^{-12}$ m أوجد أقل طاقة حركة .

ج - ما هى نسبة الاختلاف فى الطاقة إذا استخدمنا معادلة الطاقة اللانصبوية ؟

٩ - اشرح نظرية الأنفاق ، وبين كيف تستخدم لتفسير ظاهرة الإنبعاث الإلكتروني من

الأقطاب الباردة ، كما فى ميكروسكوب المجال الأيونى ؟

١٠ - إذا كان ثابت القوة في حركة توافقية بسيطة هو 0.1 J / m . أوجد التردد ،

علماً بأن الكتلة المتذبذبة 1 kg . ماذا يكون العدد الكمي في هذه الحالة إذا كانت الطاقة الكلية هي 0.1 J ؟ . وماذا يكون الفرق بين مستويي الطاقة $(E_{n+1} - E_n)$

١١ - يسقط الكترون طاقته 5 ev على حاجز جهد ارتفاعه 6 ev وأتساعه 5°A .

أوجد درجة احتمال النفاذ في هذا الحاجز .

١٢ - احسب الفرق بين مستويي الطاقة الأول والأرضي للإلكترون في بئر جهد لا

نهائي الارتفاع اتساعه

$$(1) \quad 5^\circ \text{A} \quad (2) \quad 1 \text{ cm}$$

ماذا يكون طول الموجة المصاحبة لعملية الانتقال من المستوى الأول للمستوى الأرضي

في كل حالة ؟

