الباب الثالث

معادلة شرودنجر الموجية وتطبيقاتها

The Schrödinger's Wave Equation and its Applications

الفصل	العنوان	الصفحة
١	معادلة شرودنجر في بعد واحد	٥٩
٢	معادلة شرودنجر المستقرة (غير الزمنية)	٦٠
٣	كثافة التيار الاحتمالية (Probability current density)	٦٢
٤	تطبيقات معادلة شرودنجر في بعد واحد	٦٤
	i- دراسة حركة جسيم حر (Motion of free particle)	٦٤
	ii- دراسة حركة جسيم داخل صندوق (مغلق تماماً)	٦٥
	iii- الجهد الدرجي (Step potential)	٧٠
	iv- حاجز الجهد المستطيل (Rectangular potential barrier)	٧٦
٥	تطبيق معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد	٨٣
٦	تمارين عامة (General exercises)	٨٦
(A.٣)	المعادلة التفاضلية البسيطة (Simple differential equation)	٨٧
(B.٣)	الجهود المتماثلة كرويا (Spherically symmetric potentials)	٨٨
	أ- تبسيط مسألة القوى المركزية	٨٨
	ب- حركة الجسيم الحر (Motion of free particle)	٩٠

الباب الثالث

معادلة شرودنجر الموجية وتطبيقاتها

من خلال دراستنا السابقة، للبابين الأول والثاني، عَلمنا أن قوانين نيوتن وصفت مسار وحركة الجسم التقليدي، ومعادلات ماكسويل وصفت حركة الموجات التقليدية الكهرومغناطيسية. والآن نحن نحتاج إلى وصفة رياضية تأخذ في الاعتبار الصفة الازدواجية للمادة، هذه الوصفة الرياضية يجب أن تأخذ في الاعتبار وصف الدالة الموجية ψ كما عرفناها بالسابق.

في هذا الباب سنتناول الوصفة الرياضية التي قدمها شرودنجر (١٩٢٦) وسميت بالميكانيكا الموجية أو ميكانيكا الكم مع تطبيقاتها البسيطة. وثمّةَ وصفة أخرى سميت بطريقة المصفوفات الميكانيكية وبدأها العالمان هيزنبرج وبورن في نفس العام، وسوف نتناولها في باب آخر. وبالطبع فنحن هنا سوف نتعامل مع النظام المجهري فقط. وتبعاً للنظام الفيزيائي المجهري يوجد هناك كميات (قيم) فيزيائية هي القيم التي يمكن قياسها أو حسابها مثل طاقة الحركة T، طاقة الوضع V أو الطاقة الكلية E... إلخ.

1- معادلة شرودنجر في بعد واحد

علمنا من الفرضية الثانية لميكانيكا الكم أن لكل كمية فيزيائية يمكن قياسها، كطاقة الحركة T والطاقة الكلية E، يكون هناك مؤثر، وحتى الآن لم نعرف كيفية حساب هذا المؤثر، ولحساب المؤثرات نتبع الخطوات التالية (للسهولة سنأخذ الحركة في اتجاه واحد فقط وهو اتجاه x):

أ- نبدأ بمعادلة الموجة المستوية المصاحبة للجسيم الحر على الصورة:

$$\psi = e^{i(kx-\omega t)} = e^{i(p_x x - Et)/\hbar} = e^{ip_x x/\hbar}\, e^{-iEt/\hbar} = f(x) f(t) \qquad (١)$$

حيث طاقة الجسيم هي $E=\hbar\omega$ و $p_x=\hbar k$ هي كمية حركته الخطية.

ب- للحصول على المؤثر $\hat{E}$، نفاضل المعادلة (١) بالنسبة للزمن، فنحصل على:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\psi \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi \qquad (٢)$$

وهي معادلة مميزة على الصورة $\hat{E}\psi = E\psi$ ولذلك فإن:

$$\boxed{\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} \qquad (٣)$$

ج- للحصول على المؤثر $\hat{p}_x$ ، فإننا نفاضل المعادلة (١) بالنسبة إلى x لنجد:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}p_x\, e^{i(p_x x - Et)/\hbar}$$
$$= \frac{i}{\hbar}p_x\psi \qquad (٤)$$
$$\Rightarrow \qquad \boxed{\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi}$$

حيث حصلنا على معادلة مميزة على الصورة $\hat{p}_x\psi = p_x\psi$ ، وتعطينا المؤثر

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$$

ومنها نجد $\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x\hat{p}_x = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

د- نقارن الآن بين ميكانيكا الكم والميكانيكا التقليدية، حيث إن:

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (٥)$$

وتصبح معادلة شرودنجر في الشكل العام هي $\hat{H}\psi = \hat{E}\psi$ حيث $\hat{H}$ يدعى هاميلتونيان (مؤثر هاميلتوني)

$$\boxed{\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}\right)}, \qquad \boxed{\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} \qquad (٦)$$

٢- معادلة شرودنجر المستقرة (غير الزمنية)

بدءاً بمعادلة شرودنجر التفاضلية:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}\right)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \qquad (١)$$

نجد أنها تعتمد على الزمن، ونحن في دراستنا هذه نبحث عن دوال وقيم مميزة مستقرة (أي أنهن لا يعتمدن على الزمن). لهذا سوف نحاول فصل معادلات الزمن عن معادلات المكان باستخدام إحدى الطرق، وهي طريقة فصل المتغيرات، والطريقة كالتالي:

أ- نفترض إمكانية فصل الدالة $\Psi(x,t)$ إلى:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\psi(t) \tag{٢}$$

حيث $\psi(t)$ هي دالة تعتمد على الزمن و $\psi(x)$ هي دالة تعتمد على المكان.

ب- فاضل الدالة (٢) مرة بالنسبة للزمن، ومرتين بالنسبة للمكان، فنحصل على:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\psi(x)\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} \tag{3a}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=\psi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} \tag{3b}$$

ج- بالتعويض من المعادلتين (a٣) و(b٣) في المعادلة (١) والقسمة على $\psi(x)\,\psi(t)$ نجد:

$$\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\hat{V}\psi(x)\right\}=\frac{1}{\psi(t)}\left\{i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\right\} \tag{٤}$$

د- في المعادلة (٤) نجد أن الطرف الأيسر يعتمد على المتغير "x" فقط، بينما الطرف الأيمن يعتمد على المتغير "t" فقط. من نظريات المعادلات التفاضلية تعلمنا أن ذلك ممكن فقط في حالة كون كل طرف يساوى كمية ثابتة، سوف نفترضها "c"، ولهذا

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}=c\psi(t) \tag{5a}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\hat{V}\psi(x)=c\psi(x) \tag{5b}$$

ه- تكامل المعادلة (5a) يعطي الدالة الزمنية

$$\psi(t)=e^{-ict/\hbar} \tag{٦}$$

بافتراض أن ثابت التكامل هو الوحدة وذلك للسهولة.

و- لحساب الثابت c نقارن المعادلتين (٦) و(٥) فنجد أن الثابت c ما هو إلا الطاقة الكلية E للجسيم ونحن نعلم أنها كمية محفوظة (ثابتة).

ز- أخيراً نحصل على معادلة شرودنجر التي لا تعتمد على الزمن، وهي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(x)\right]\psi(x)=0 \qquad (٧)$$

المعادلة (٧) تمثل حركة جسيم، يتحرك بطاقة كلية E وطاقة وضع (طاقة كامنة) V، ولا تعتمد على الزمن، ولذلك يقال عنها: إنها تمثل حالة مستقرة.

٣- كثافة التيار الاحتمالية

في هذا الجزء سوف نقوم بتعريف كثافة التيار الاحتمالية، والكثافة الاحتمالية، وحفظها لما لهما من أهمية في دراسة احتمالية تواجد الجسيمات في المناطق الممنوعة من وجهة النظر التقليدية.

تم سابقاً (الباب الأول الفصل ٨) تعريف المقدار:

$$\rho d\tau=|\psi(r,t)|^2\,d\tau$$

بأنه كثافة الاحتمال وهو يمثل احتمال تواجد الجسيم في عنصر الحجم $d\tau$، حيث الدالة المعيرة $\psi(r,t)$ ترافق الجسيم المتحرك في عنصر الحجم.

دعونا نسأل أنفسنا! إذا تغير الزمن، ماذا يحدث للقيمة ρ لو تغيرت بالنقصان في مكان ما؟ للإجابة عن هذا السؤال يجب أن نحدد أولاً: أن مجموع الاحتمالات في الحجم المعرف له القيمة ١، بمعنى أن:

$$\int_V \rho d\tau=\int_V|\psi(r,t)|^2\,d\tau=1 \quad\Rightarrow\quad \frac{d}{dt}\int_V \rho d\tau=0$$

من ثم فإن أي تغير بالنقصان في منطقة بالحجم المعرف سوف يتبعها زيادة في منطقة أخرى بنفس الحجم. هذا التغير (أو الانتقال أو التدفق) في كثافة الاحتمال، من منطقة إلى أخرى، يمكن النظر على أنها "تيار للكثافة الاحتمالية". لذلك سوف نشتق صيغة أساسية لقانون حفظ الكثافة الاحتمالية. مع ملاحظة أن هذا الاشتقاق مبني على فرضية عدم وجود خلق أو إفناء للجسيمات، ومن ثم هذا لا يتحقق في التفاعلات النسبية ذات السرعات العالية، التي تصل قريباً من سرعة الضوء.

نبدأ بمعادلة شرودنجر للدالة الموجية ψ والمرافق المركب لها ψ^* واللتان تكتبان بالصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (١)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* = -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \qquad (٢)$$

بضرب المعادلة (١) من اليسار بالدالة ψ^*، والمعادلة (٢) من اليسار بالدالة ψ، ثم بالطرح ينتج:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) = i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) \qquad (٣)$$

إذا أخذنا في الاعتبار المعادلتين التاليتين:

$$\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) = \nabla.\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right) \qquad (٤)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right) = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \qquad (٥)$$

واعتمدنا الرمزين التاليين:

كثافة التيار:

$$\boxed{\boldsymbol{J} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)} ،$$

والكثافة الاحتمالية:

$$\boxed{\rho = \psi^*\psi} ،$$

فإن المعادلة (٣) تأخذ الصورة

$$\nabla \cdot \boldsymbol{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \qquad (٦)$$

وهي تشبه معادلة الاستمرارية (الاتصال) في ديناميكا الموائع، والتي تعبر هنا عن قانون حفظ الجسيمات.

مثال: احسب كثافة التيار للدالة $\psi(x) = A\, e^{ikx}$ حيث A ثابت.

الحل:

$$\boldsymbol{J} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right) = \frac{\hbar}{m} I_m \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

$$= \frac{\hbar}{m} I_m \left(A^* e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} A e^{ikx}\right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = v\ |A|^2 = \rho v$$

واجب منزلي: للدالة $\psi(x) = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$ حيث A, B ثوابت، اثبت أن كثافة التيار هي $\boldsymbol{J} = v\left(|A|^2 - |B|^2\right)$.

٤- تطبيقات معادلة شرودنجر في بعد واحد

i-دراسة حركة جسيم حر (بمعنى أن $V = 0$)

معادلة شرودنجر لجسيم حر، في بعد واحد، تكتب على الصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\,\psi(x)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 \psi,$$

وحلها هو $\psi(x) = A\, e^{\pm i k x/\hbar}$ حيث إن A هو ثابت التكامل و $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$.

نلاحظ هنا أن k تأخذ قيماً حقيقية، حيث إنها مرتبطة بطاقة الحركة فقط.

وكمثال توضيحي دعونا نسترجع المسألة الرئيسة في ميكانيكا الكم، ألا وهي دراسة حركة جسيم داخل صندوق مغلق تماماً.

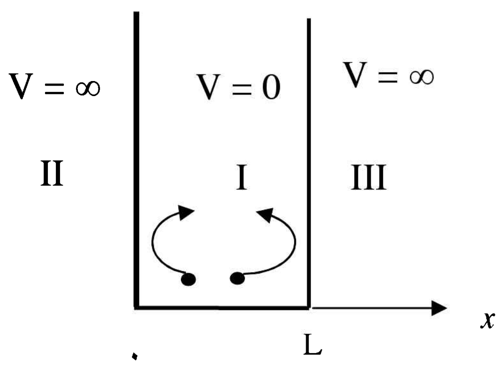
---

ii- دراسة حركة جسيم داخل صندوق مغلق تماماً

في هذا المثال سوف ندرس حركة جسيم في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le L \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases} \qquad (1)$$

وهذا المثال ينطبق عملياً على حركة إلكترون حر بداخل قطعة معدنية، لها طاقة توتر سطحي يفوق الطاقة الحركية للإلكترون، ومن ثم فإن الإلكترون يتحرك داخل المعدن، ولا يتمكن من الهروب منه، إلا بإعطائه طاقة خارجية. ولحل هذه المسألة نلاحظ من شكل ١ أن حركة الجسيم حرة، ولكنها مقيدة في المدى $0 \le x \le L$ حيث إن الجهد $V = \infty$ خارج هذا المدى هو المسؤول عن انعكاس الجسيم من حائل الجهد.



شكل(١) جسيم داخل صندوق مغلق تماماً

والطريقة المثلى لحل هذه النوعية من المسائل هو اتباع التالي:

أولاً: كتابة معادلة شرودنجر في المنطقة التي يمكن أن يتواجد فيها الجسيم.

من الشكل (٦) نجد أن الجسيم يتواجد في المنطقة (I) فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر تأخذ الصورة:

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= E\psi_I \\ \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= -k^2\psi_I, \end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ و m هو كتلة الجسيم و E هي الطاقة الكلية. المنطقتان $(II), (III)$ غير مسموح للجسيم بالانتقال أو بالتواجد فيهما نتيجة الجهد $V = \infty$ من ثم فإن دالة الموجة تتلاشى عند $x = 0$ و $x = L$ ، بمعنى أن:

$$\psi_{II}(x = 0) = \psi_{III}(x = L) = 0.$$

ثانياً: نقترح حلاً للمعادلة (المعادلات) المعطاة في الفقرة الأولى. نلاحظ هنا أن المعادلة(٢) تمثل معادلة حركة توافقية بسيطة وحلها يمكن وضعه بأي من الصور الثلاث التالية:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \tag{3}$$

$$\psi_I(x) = a\,e^{ikx} + b\,e^{-ikx} \tag{4.a}$$

$$\psi_I(x) = A'\sin(kx + \gamma) \tag{4.a}$$

حيث $i = \sqrt{-1}$ و a, b, A, A', B, γ ثوابت تعين بواسطة الشروط الحدودية أو الشروط العيارية.

ثالثاً: اختر أحد الحلول، وليكن الحل المعرف بالمعادلة (٣).

رابعاً: استخدم الشروط الحدودية للتخلص من الثوابت غير المنطقية. مثلاً الشرط:

$$\psi_I(0) = 0 \tag{5}$$

يتيح لنا التخلص من الثابت B وتؤول المعادلة (٣) إلى الدالة المميزة:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) \tag{6}$$

خامساً: نبدأ في حساب الثوابت A, k

أ- لحساب الثابت k استخدم الشرط الحدي $\psi_I(x = L) = 0$ ، بمعنى:

$$\left.\begin{aligned} \because \quad \psi_I(x = L) &= 0 \\ \therefore \quad A\sin(kL) &= 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{7}$$

حيث n يعرف بأنه عدد كمي.

ب- لحساب الثابت A استخدم شرط المعايرة كالتالي:

$$\left.\begin{array}{l} \because \quad \int_0^L |\psi_I|^2\, dx = 1 \\ \therefore A^2 \underbrace{\int_0^L \sin^2(k_n x)dx}_{\frac{L}{2}} = 1 \end{array}\right\} \Rightarrow A = \sqrt{2/L} \qquad (8)$$

وتصبح الدالة المميزة على الصورة:

$$\psi_I(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x), \qquad n = 1,2,3,\cdots \qquad (٩)$$

ملاحظات:

أ- بمعلومية k_n نستطيع أن نحسب الطاقة الكلية E_n وهي:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = n^2 \underbrace{\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)}_{E_1} = n^2 E_1, \qquad n = 1,2,3,\cdots \qquad (١٠)$$

وهي قيم مكماة (غير متصلة). وتعد القيمة $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ هي طاقة المستوى الأرضي للجسيم.

ب- القيمة $n = 0$ أهملت؛ لأنها تعطي حلاً صفرياً للطاقة، ومعناه أن الجسيم لا يتحرك. وأيضاً تعطي حلاً صفرياً للدالة ومربعها، أي: $|\psi_I(0 < x < L)|^2 = 0$، وهو حل غير فيزيائي، لأننا نعرف أن الجسيم موجود ولهُ طاقة حركة.

ج- القيم السالبة ل n تعطي نمطاً مماثلاً للقيم الموجبة المقابلة.

د- قيم الطاقة تتناسب مع n^2.

هـ- المسافة بين مستويات الطاقة "ΔE" تزداد مع زيادة n تبعاً للعلاقة:

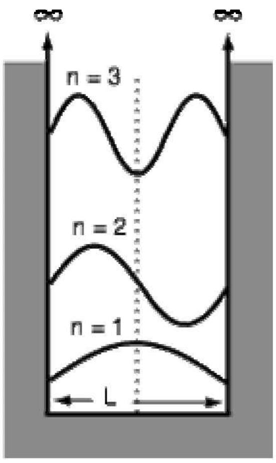
$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (n+1)^2 E_1 - n^2 E_1 = (2n+1)E_1$$

(انظر الشكل ٢ a)

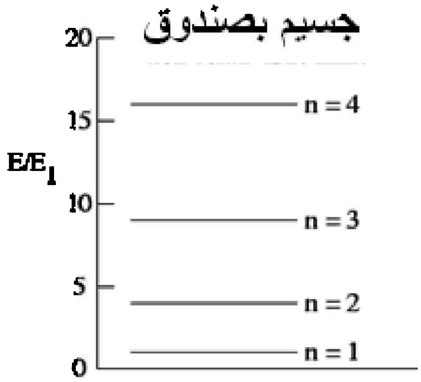
و- عند حساب متوسط الإزاحة $<x>$ نجد أن:

$$\langle x \rangle = \int_0^L x\, |\psi_I|^2\, dx = \frac{2}{L}\int_0^L x \sin^2(k_n x)dx = \frac{2}{L}\left(\frac{L^2}{4}\right) = \frac{L}{2} \qquad (١١)$$

ويفسر هذا فيزيائياً: بأن كثافة الاحتمال (وأيضاً الدالة) متماثلتان حول مركز الصندوق، أي : عند $\frac{L}{2}$. لهذا فإن احتمالية وجود الجسيم في النصف الأيمن من الصندوق يكون مساوياً لاحتمالية وجوده في النصف الأيسر. (انظر الشكل b٢)



(b)



(a)

شكل (٢) لجهد الشكل (١) a-الطاقات المسموح بها b- الدوال المسموح بها

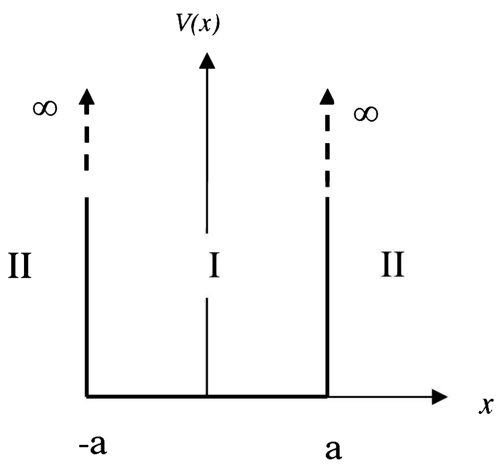
خ. متوسط كمية الحركة الخطية $\langle \hat{p} \rangle$ تحسب كالتالي:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L \psi_I^* \hat{p}\, \psi_I \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin(k_n x)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\sin(k_n x)\right) dx = 0 \qquad (١٢)$$

وتفسر المعادلة (١٢) فيزيائياً: بأن انعدام متوسط كمية الحركة الخطية، لا تعني أن الجسيم لا يتحرك، ولكن تعني أن احتمالية تحرك الجسيم للشمال يكون مساوياً لاحتمالية تحركه لليمين؛ وذلك لأن كمية الحركة الخطية هي كمية متجهة وليست قياسية.

مثال: ادرس حركة جسيم في مجال جهد متماثل؛ كما بالشكل ويوصف كالآتي:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| > a \end{cases}$$



الحل:

نتيجة لقيم الجهد اللانهائية خارج المنطقة (I)، لذلك ينعدم تواجد الجسيم بالمنطقتين (II) ، (III). بالمنطقة (I) نجد أن معادلة شرودنجر غير الزمنية تأخذ الشكل:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I, \qquad (١)$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. الحل العام للمعادلة (١) هو:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \qquad (٢)$$

حيث A و B ثوابت تعين من خلال الشروط الفيزيائية. من شروط انعدام الدالة عند الحدود (a) و $(-a)$ نجد أن:

$$\psi_I(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A\cos(ka) + B\sin(ka) = 0, \quad (٣)$$

$$\psi_I(-a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A\cos(ka) - B\sin(ka) = 0 \quad (٤)$$

بجمع المعادلتين (٣) و (٤) ينتج أن:

$$2A\cos(ka) = 0$$
$$\Rightarrow \quad A = 0 \ \text{ or } \ \cos(ka) = 0 \qquad (٥)$$

بطرح المعادلتين (٣) و (٤) ينتج أن:

$$2B\sin(ka) = 0$$
$$\Rightarrow \quad B = 0 \ \text{ or } \ \sin(ka) = 0 \qquad (٦)$$

ونحن هنا لا نبغي أن نساوي الثوابت A و B بالصفر، حيث إننا سنحصل على دالة $\psi_I(x)$ لا فائدة لها فيزيائياً. وأيضاً لا نود وضع الدوال $\sin(ka)$ و $\cos(ka)$ مساوية للصفر لبعض قيم k و E. وعليه يكون عندنا حلان وهما:

$$A = 0 \quad B \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \sin(ka) = 0, \qquad \text{(i)}$$
$$B = 0 \quad A \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \cos(ka) = 0 \qquad \text{(ii)}$$

في الحل الأول نجد أن:

$$\sin(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\pi,2\pi,3\pi,\cdots=n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح زوجي.

في الحل الثاني نجد أن:

$$\cos(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\frac{\pi}{2},3\frac{\pi}{2},5\frac{\pi}{2},\cdots=n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح فردي.

ومنه نصل إلى الخلاصة الآتية، وهي:

$$\psi_I(x)=\begin{cases} A\sin(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is even} \\ \\ B\cos(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is odd} \end{cases}$$

$$k_n^2=\frac{2mE_n}{\hbar^2}, \qquad \Rightarrow \qquad E_n=\frac{k_n^2\hbar^2}{2m}=n^2\underbrace{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}_{E_1}=n^2E_1$$

$$A=B=\sqrt{\frac{1}{a}}$$

---

iii- الجهد الدرجي (جهد العتبة)

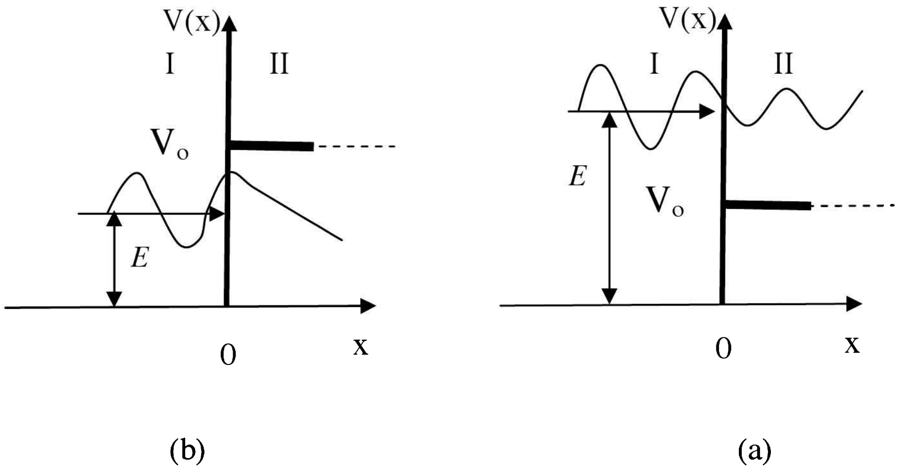
نحن هنا بصدد دراسة حزمة متجانسة من الجسيمات تتحرك في اتجاه حاجز جهد على الصورة:

$$V(x)=\begin{cases} 0, & x<0 \\ V_o, & x\geq 0 \end{cases}$$

في حالتين وهما أن تكون طاقة الجسيم الكلية E أكبر من V_o أو أصغر من V_o حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد (انظر الشكل ٣). ومنها علينا أن نجد معادلات التيار: الساقط، والمنعكس، والنافذ، ومعامل الانعكاس، ومعامل النفاذية.

دعونا نسأل: ما هي وجهة النظر الكلاسيكية لهذا الجهد؟ قبل أن نبدأ في حل المسألة من وجهة نظر ميكانيكا الكم، دعونا نستعرض مثالاً بسيطاً من الحياة، لنتصور الحل الكلاسيكي. نحن في شبابنا وصحتنا لا نُعير اهتماماً لارتفاع درجات

السلالم، التي سنرمز لها بالرمز V_o، لأن طاقاتنا، التي سنرمز لها بالرمز E، أعلى بكثير مما هو عليه درجات السلم، بمعنى أن $E > V_o$. لكن عند الكبر، مرحلة الوهن، نفكر كثيراً في ارتفاع درجات السلالم، وغالباً ما نتراجع، وذلك لأن طاقاتنا أصبحت أقل بكثير من ارتفاع درجات السلالم، بمعنى أن $E < V_o$. الآن النظرة سوف تختلف تماماً من وجهة نظر ميكانيكا الكم، وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات.



شكل (٣) (a) الحالة الأولى $E > V_o$ (b) الحالة الثانية $E < V_o$

الحالة الأولى $E > V_o$ مرحلة الشباب

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم x = 0 تعرف:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (1)$$

والحل العام لها هو:

$$\psi_I(x) = A \underbrace{e^{ikx}}_{\text{Incident wave}} + B \underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \qquad (2)$$

الدالة e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى دالة ساقطة (Incident wave)، e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني، وتسمى دالة منعكسة (Reflected wave). A هي سعة الموجة الساقطة، و B هي سعة الموجة المنعكسة من حائط الجهد.

معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من الحائل ($x = 0$) تعرف بالتالي:

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II} \\
&\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -\alpha^2\psi_{II}, \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_o)
\end{aligned}
\tag{٣}
$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x) = C\ e^{i\alpha x} + D\ e^{-i\alpha x} \tag{٤}$$

$e^{i\alpha x}$ هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى موجة نافذة (Transmitted wave). وحيث إنه لا يوجد حائط جهد في المنطقة اليمنى، لكي ترتد منه الأشعة، فلهذا نضع $D = 0$. والآن عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$
\begin{aligned}
&\because \psi_I(x = 0) = \psi_{II}(x = 0) \\
&\therefore \quad A + B = C
\end{aligned}
\tag{٥}
$$

ولمشتقتها الأولى:

$$
\begin{aligned}
&\because \psi'_I(x = 0) = \psi'_{II}(x = 0) \\
&\therefore\ ik(A - B) = i\alpha C
\end{aligned}
\tag{٦}
$$

حل المعادلتين (٥) و(٦) يعطي:

$$B = \left(\frac{k - \alpha}{k + \alpha}\right)A, \qquad C = \left(\frac{2k}{k + \alpha}\right)A \tag{٧}$$

بالإمكان تعريف:

كثافة التيار الساقط = $|A|^2 = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = v_1|A|^2$ ،

وكثافة التيار المنعكس = $|B|^2 = \frac{\hbar k}{m}|B|^2 = v_1|B|^2$ ،

وكثافة التيار النافذ = $|C|^2 = \frac{\hbar\alpha}{m}|C|^2 = v_2|C|^2$

حيث $v_1 = \hbar k / m$ و $v_2 = \hbar\alpha / m$. ومن ثم فإن:

معامل الانعكاس (R) =	كثافة التيار المنعكس / كثافة التيار الساقط	= $\left(\frac{k-\alpha}{k+\alpha}\right)^2$

معامل النفاذية (T) =	كثافة التيار النافذ / كثافة التيار الساقط	= $\frac{4k\alpha}{(k+\alpha)^2}$

أ- من العلاقتين السابقتين نجد أن $T + R = 1$ وهو قانون حفظ الجسيمات.

ب- الفيزياء التقليدية تمنع أي انعكاس عندما $E > V_o$ وهذا غير منطبق في قوانين ميكانيكا الكم، وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات.

الحالة الثانية $E < V_o$ مرحلة الوهن

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم $x = 0$ لن تتغير، ومن ثم سوف نستخدم المعادلتين (١) و(٢). معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من المستقيم $x = 0$ هي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \beta^2\psi_{II}, \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E) \qquad (٨)$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x) = C\ e^{-\beta x} + D\ e^{\beta x} \qquad (٩)$$

الدالة $e^{\beta x}$ هي دالة موجية تزايدية في المدى $\{0, \infty\}$ بمعنى أن $\lim_{x\to\infty} e^{\beta x} = \infty$ ومن ثم لا تحقق شروط ميكانيكا الكم، لهذا نضع $D = 0$. الآن عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$\because \psi_I(x = 0) = \psi_{II}(x = 0)$$
$$\therefore A + B = C \qquad (١٠)$$

ولمشتقتها:

$$\because \psi'_I(x=0)=\psi'_{II}(x=0)$$
$$\therefore k(A-B)=-\beta C \qquad (١١)$$

بحل المعادلتين (١٠) و(١١) نحصل على:

$$B=\left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A,$$
$$C=\left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A \qquad (١٢)$$

مثال: استخدم التحويلات القطبية التالية:

$$k=r\cos\delta, \qquad \beta=r\sin\delta,$$
$$r=\sqrt{k^2+\beta^2}, \qquad \delta=\tan^{-1}\left(\frac{\beta}{k}\right)=\sqrt{\frac{V_o-E}{E}} \qquad (١٣)$$

لتبسيط المعادلة (١٢)

الحل: الثابت B يبسط كالتالي:

$$B=\left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A=\left(\frac{\cos\delta-i\sin\delta}{\cos\delta+i\sin\delta}\right)A$$
$$=\frac{re^{-i\delta}}{re^{i\delta}}A \qquad (١٤)$$
$$=e^{-2i\delta}A$$

الثابت C يبسط كالتالي:

$$C=\left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}-1+1\right)A$$
$$=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}+1\right)A \qquad (١٥)$$
$$=\left(e^{-2i\delta}+1\right)A$$

ولنا هنا بعض الملاحظات:

أ- الشعاع الساقط والمنعكس لهما نفس الشدة، بمعنى أن:

$$|B|^2 = B^*B = \left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)\times\left(\frac{k+i\beta}{k-i\beta}\right)|A|^2$$

$$= |A|^2$$

وهذا يعني أن جميع الجسيمات الساقطة بطاقة $E < V_o$ سوف تنعكس كلياً عندما تصل إلى الحائل، ويتساوى معامل الانعكاس بالوحدة (بمعنى أن $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$). ومن ثم سوف ينعدم معامل النفاذية، أي أن "$T = 0$".

ب- باستخدام المعادلات (١٣-١٥) يمكننا وضع الدوال الموجية بالصورة:

$$\psi_I(x) = 2Ae^{-i\delta}\cos(kx+\delta), \qquad (١٦)$$

$$\psi_{II}(x) = \left(2A\cos\delta\, e^{-i\delta}\right)e^{-\beta x} \qquad (١٧)$$

المعادلة (١٦) هي معادلة موجات موقوفة.

ج- كلاسيكياً تعد المنطقة (II) منطقة محظورة على الجسيمات، وذلك لأن طاقة الحركة $(T = E - V_o)$ سوف تصبح كمية سالبة نظراً لأن $E < V_o$.

د- من المعادلة (١٧) نستنتج أن:

- كثافة التيار في المنطقة (II) منعدمة؛ لأن الدالة حقيقية.
- احتمالية وجود الجسيمات في المنطقة (II) تُعطَى بالمعادلة:

$$P_{II}(x) = |\psi_{II}|^2 = \left(2A\cos\delta\right)^2 e^{-2\beta x} \qquad (١٨)$$

وهذه تعطي قيماً مقبولة عند $x = 0$ وتقل تدريجياً (أسياً) مع زيادة المسافة. انظر: الشكل (٣)b.

ه- تنعدم الدالة $\psi_{II}(x)$ تماماً عندما $V_o \to \infty$، وتأخذ الدالة $\psi_I(x)$ بالشكل:

$$\psi_I(x) = A\sin kx$$

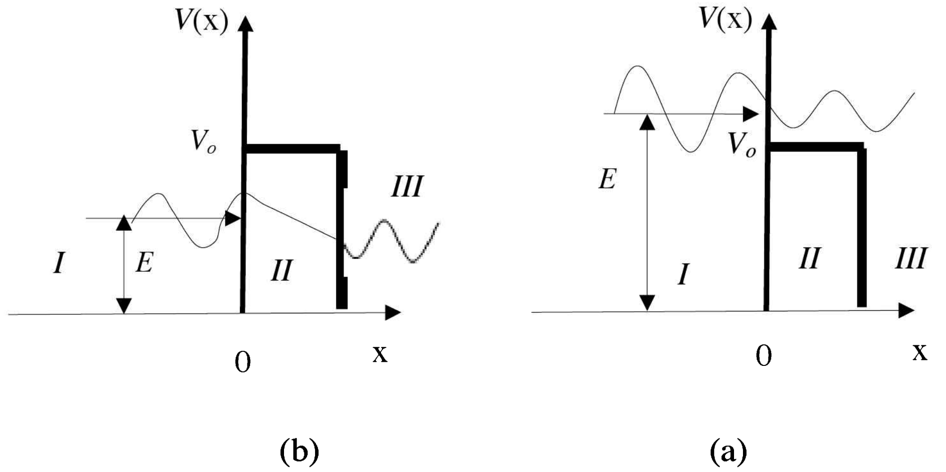
إذ يجب أن تنعدم عندما $x = 0$.

و- يمكن استنتاج المعادلة (١٢) مباشرةً؛ وذلك بتغيير $i\alpha \to -\beta$ في المعادلة (٧).

iv- حاجز الجهد المستطيل

دراسة حزمة متجانسة من الجسيمات تتحرك في اتجاه حاجز جهد على الصورة:

$$V(x)=\begin{cases}V_o, & 0<x<a\\ 0, & a\le x\le 0\end{cases}$$



شكل (٤) (a) الحالة الأولى $E>V_o$ (b) الحالة الثانية $E<V_o$

في كلتا الحالتين وهما أن تكون طاقة الجسيم الكلية E أكبر من V_o أو أصغر من V_o حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد (انظر الشكل ٤). ومنها سوف نستنتج معادلات التيار: الساقط، والمنعكس، والنافذ، ومعامل الانعكاس، ومعامل النفاذية.

الحالة الأولى $E<V_o$

معادلة شرودنجر اللازمنية في المنطقة (I)، $-\infty\le x\le 0$، تعطي كالآتي:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2}=-k^2\psi_I, \qquad (١)$$

حيث $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$. والحل العام للمعادلة (١) هو:

$$\psi_I(x)=A\underbrace{e^{ikx}}_{\text{Incident wave}}+B\underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \qquad (٢)$$

e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى دالة ساقطة، e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني، وتسمى دالة منعكسة. A هي سعة الموجة الساقطة و B هي سعة الموجة المنعكسة من حائط الجهد.

معادلة شرودنجر غير الزمنية في منطقة حاجز الجهد (II) ، $0 \le x \le a$ ، تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \alpha^2\psi_{II} \qquad (٣)$$

حيث $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E)$. والحل العام للمعادلة (٣) هو:

$$\psi_{II}(x) = C\ e^{\alpha x} + D\ e^{-\alpha x} \qquad (٤)$$

$e^{\alpha x}$ هي دالة أسية تزايدية، تمثل اضطراباً منعكساً غير متذبذب يتحرك خلال الحائل في الاتجاه السالب للمتغير x . $e^{-\alpha x}$ يعبر دالة أُسية تناقصية، تمثل اضطراباً غير متردد يتحرك خلال الحائل مع زيادة المتغير x. ونظراً لقيم x المحددة بين 0 و a فإنه لن يتم إهمال أي من الحدود.

معادلة شرودنجر غير الزمنية في المنطقة (III) ، $a \le x \le \infty$ ، تعطي كالآتي:

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = -k^2\psi_{III}, \qquad (٥)$$

وحل المعادلة (٥) العام هو:

$$\psi_{III}(x) = G\underbrace{e^{ikx}}_{\text{Transmitted wave}} + K\cancel{\underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}}} \qquad (٦)$$

e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى موجة نافذة (Transmitted wave). e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني، وتسمى دالة مرتدة. G هي سعة الموجة الساقطة و H هي سعة الموجة المرتدة من ∞. وبما إنه لا توجد موجة مرتدة من ∞ فإننا نستطيع وضع $K = 0$.

وعليه فإن الحلول المقبولة هي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= C\,e^{\alpha x} + D\,e^{-\alpha x} \\ \psi_{III}(x) &= G\,e^{ikx} \end{aligned} \tag{٤}$$

الآن: عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدوال:

$$\begin{aligned} &\because \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \\ &\therefore \quad A + B = C + D \end{aligned} \tag{٥}$$

ولمشتقاتها:

$$\begin{aligned} &\because \psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0) \\ &\therefore \quad ik(A - B) = \alpha C - \alpha D \end{aligned} \tag{٦}$$

عند الحد $x = a$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدوال:

$$\begin{aligned} &\because \psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a) \\ &\therefore \quad Ce^{\alpha a} + De^{-\alpha a} = Ge^{ika} \end{aligned} \tag{٧}$$

ولمشتقاتها:

$$\begin{aligned} &\because \quad \psi'_{II}(x=a) = \psi'_{III}(x=a) \\ &\therefore \quad \alpha Ce^{\alpha a} - \alpha De^{-\alpha a} = ikGe^{ika} \end{aligned} \tag{٨}$$

حصلنا هنا على أربع معادلات، ولكن لخمسة مجاهيل. ومن خلال حل المعادلات (٥ ، ٦، ٧، ٨) لكل من A و B بدلالة G نحصل على:

$$\begin{aligned} A &= \left[\cosh(\alpha a) + \frac{i}{2}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)\sinh(\alpha a)\right] Ge^{ika} \\ B &= -\frac{i}{2}\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)\sinh(\alpha a) Ge^{ika} \end{aligned} \tag{٩}$$

من تعريف كثافة التيار الساقط = $\mathrm{v}_1 |A|^2$ ، وكثافة التيار المنعكس = $\mathrm{v}_1 |B|^2$ ، وكثافة التيار النافذ = $\mathrm{v}_2 |G|^2$ حيث $\mathrm{v}_i = \hbar k_i / m$ ، نجد أن معامل الانعكاس (R) يأخذ الصورة:

$$R = \frac{BB^*}{AA^*} = \left(\frac{B}{A}\right)\left(\frac{B^*}{A^*}\right) = \frac{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k}+\frac{k}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)}{\cosh^2(\alpha a) + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k}-\frac{k}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)}$$

$$= \frac{\frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)}{1+\frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)} = \left[1+\frac{4E(V_o - E)}{V_o^2 \sinh^2(\alpha a)}\right]^{-1} \qquad (١٠)$$

وذلك باستخدام قيم α و k.

ومعامل النفاذية (T) يأخذ الشكل التالي:

$$T = \frac{GG^*}{AA^*} = \left(\frac{G}{A}\right)\left(\frac{G^*}{A^*}\right) = \left(1+\frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)\right)^{-1} \qquad (١١)$$

ونقف هنا لسرد بعض التعليقات، وهي:

أ- من العلاقتين (١٠) و (١١) وجدنا أن $T + R = 1$ وهو قانون حفظ الجسيمات.

ب- للمقارنة بالنظرية التقليدية نضع $\hbar = 0$ لنجد أن α و k تؤولان إلى ∞. ومنهما يؤول $R \to 1$ و $T \to 0$، كما هو متوقع من تصرف الجسيمات التقليدية.

ج- من معامل النفاذية نجد أن $T = 0$ عندما $E = 0$. ومع ازدياد طاقة الحركة الابتدائية للجسيم بحيث إن $0 < E < V_o$ نجد أن T تصبح لها قيمة أقل من الواحد الصحيح. هذا يعني أن الجسيمات قد تمر خلال حائل الجهد V_o حتى وإن كانت طاقة الحركة الابتدائية للجسيم أقل من V_o. وهذا غير محتمل في قوانين الميكانيكا التقليدية، وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات. وهذه هي ظاهرة التأثير النفقي (Tunneling effect). وللعلم يوجد ظواهر فيزيائية كثيرة لا تفسر إلا بظاهرة التأثير النفقي منها :

- $\Leftarrow$ انبعاث الإلكترونات من سطح المعادن الباردة نتيجة تأثير مجال خارجي.
- $\Leftarrow$ الدايود (الثنائي) النفقي (Tunnel diodes) في الدوائر الكهربائية.
- $\Leftarrow$ التوصيل الكهربي للمواد العازلة.
- $\Leftarrow$ التأثير النفقي في الأنوية ومنها انحلال جسيمات α من المواد المشعة.
- $\Leftarrow$ التأثير النفقي في فيزياء الجوامد.

⇐ التأثير النفقي في المواد فائقة التوصيل.

د- إذا زادت الطاقة E ، نجد أن الكمية $(V_o - E)$ تقل، و تقل معها α. ومع ثبوت عرض الجهد a نجد أن $\sinh^2(\alpha a)$ تقل أسرع من $(V_o - E)$. لذلك فإن T تزداد مع زيادة E. إذا زاد عرض الجهد a فإن $\sinh^2(\alpha a)$ تزداد بسرعة ولذلك تقل معها T بسرعة.

مثال: استنتج معادلة تقريبية لمعامل النفاذية، وذلك عند تحقق الشرط $\alpha a >> 1$.

الحل: عند تحقق الشرط $\alpha a >> 1$ نجد أن:

$$e^{-a\alpha} \to 0, \quad \sinh^2(a\alpha) = \left(\frac{e^{a\alpha} - e^{-a\alpha}}{2}\right)^2 \approx \frac{1}{4} e^{2a\alpha} >> 1$$

ومن ثم فإن:

$$\begin{aligned} T &= \left(1 + \frac{V_o^{\,2}}{4E(V_o - E)} \sinh^2(\alpha a)\right)^{-1} \\ &\approx \frac{4E(V_o - E)}{V_o^{\,2}} \sinh^{-2}(\alpha a) \approx \frac{16E(V_o - E)}{V_o^{\,2}} e^{-2\alpha a} \\ &= \underline{\frac{16}{V_o}(1 - \frac{E}{V_o}) e^{-2a\alpha}} \end{aligned}$$

الحالة الثانية $E > V_o$

معادلات شرودنجر في المنطقتين (I) و (III) لن تتغير، ومن ثم سوف نستخدم المعادلتين (٢) و(٦). ومعادلة شرودنجر غير الزمنية في منطقة حاجز الجهد (II)، $0 \le x \le a$، سوف تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -\beta^2\psi_{II} \qquad (١٢)$$

حيث $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_o)$. والحل العام للمعادلة (١٢) هو:

$$\psi_{II}(x) = C\ e^{i\beta x} + D\ e^{-i\beta x} \tag{١٣}$$

لذلك نجد أن مجموعة الحلول المقبولة هي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A\ e^{ikx} + B\ e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= C\ e^{i\beta x} + D\ e^{-i\beta x} \\ \psi_{III}(x) &= G\ e^{ikx} \end{aligned} \tag{١٤}$$

وبتطبيق الشروط الحدودية للدوال ومشتقاتها وهي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x=0) &= \psi_{II}(x=0) \\ \psi'_I(x=0) &= \psi'_{II}(x=0) \\ \psi_{II}(x=a) &= \psi_{III}(x=a) \\ \psi'_{II}(x=a) &= \psi'_{III}(x=a) \end{aligned} \tag{١٥}$$

ووضع $\alpha = i\beta$ بالمعادلتين (١٠) و (١١) نحصل على:

$$R = \left[1 + \frac{4E(E - V_o)}{V_o^2 \sin^2(\beta a)}\right]^{-1} \tag{١٦}$$

$$T = \left(1 + \frac{V_o^2}{4E(E - V_o)}\sin^2(\beta a)\right)^{-1} \tag{١٧}$$

ولنا هنا بعض التعليقات وهي:

أ- من العلاقتين (١٦) و (١٧) نجد أن $T + R = 1$ وهو قانون حفظ الجسيمات. للقيمة $E \to V_o$ نجد أن $\sin(\beta a) \approx \beta a$ ومنها نحصل على:

$$T = \left(1 + \frac{mV_o a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1}$$

ب- مع ازدياد طاقة الجسيم $E\left(E > V_o\right)$ نجد أن معامل النفاذية يتذبذب، كما يتضح من المعادلة (١٧).

ج- من المعادلة (١٧) نجد أن $T = 1$ عندما يتحقق الشرط:

$$\beta a = n\pi, \qquad n = 1,2,3,\cdots$$ ،

ومنه:

$$\sqrt{\frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2}}\, a = n\pi$$

أو:

$$\frac{2\pi}{\lambda} a = n\pi \qquad \Rightarrow \qquad a = n\frac{\lambda}{2}$$

وهذا يعني أن عرض الحائل يتساوى مع أعداد صحيحة من نصف الطول الموجي لدى-برولیه داخل الحائل. وبتربيع المعادلات السابقة نحصل على:

$$E = V_o\left[1 + n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{8mV_o a}\right]$$

د- من المعادلة (١٧) نجد أيضاً أن T تصل إلى نهاية صغرى عندما يتحقق الشرط:

$$\beta a = (2n+1)\frac{\pi}{2}, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$ ،

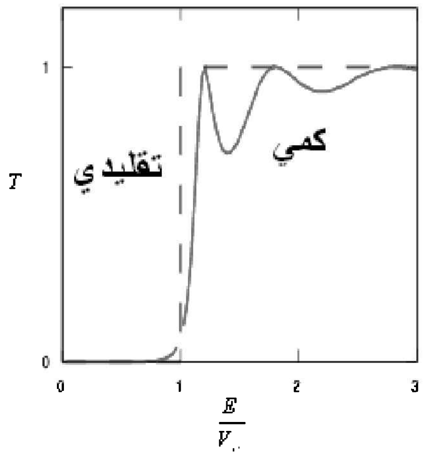
ومنها نحصل على:

$$E = V_o\left[1 + (2n+1)^2\frac{\pi^2\hbar^2}{8mV_o a}\right]$$

وأقل قيمة لمعامل النفاذية:

$$T = T_{\min} = \left(1 + \frac{V_o^{\,2}}{4E(E - V_o)}\right)^{-1}$$

حتى مع وجود الشرط $(E > V_o)$ قد تنعكس الجسيمات من الحائل، وهذه نتيجة من نتائج ميكانيكا الكم.

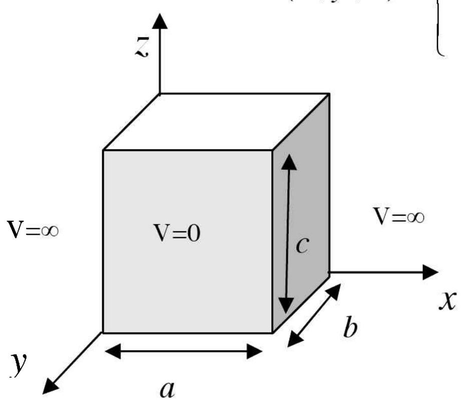


الشكل السابق يوضح تغير معامل النفاذية مع $(\frac{E}{V_o})$ في ميكانيكا الكم، المنحنى المتصل، وفي النظرية التقليدية، المنحنى المتقطع. نلاحظ أن سلوك معامل النفاذية في ميكانيكا الكم يعطي قيماً في المدى $(\frac{E}{V_o} < 1)$.

٥- تطبيق معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد

مثال: ادرس حركة جسيم داخل صندوق مقفل ذي ثلاثة أبعاد في مجال جهد يوصف بالتالي (انظر الشكل ٥):

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0\langle x\langle a,\ 0\langle y\langle b,\ 0\langle z\langle c \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$



شكل (٥) جسيم داخل صندوق (ذي ثلاثة أبعاد)

طاقة الوضع (V) خارج الصندوق متناهية في الكبر، وفي داخله مساوية للصفر.

الحل: الجسيم لا يوجد إلا في المنطقة $(a,b,c) \rangle (x,y,z) \rangle (0,0,0)$ فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد في هذه المنطقة تأخذ الصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \qquad (١)$$

وبذلك ψ سوف تعتمد على الإحداثيات الثلاث (x, y, z). لحل المعادلة (١) نستخدم طريقة فصل المتغيرات، وهي كالتالي:

أ- نفترض أن

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \qquad (٢)$$

ب- بالتعويض من (٢) في (١) واستخدام $E = E_x + E_y + E_z$ ، والشروط الحدودية

$$\begin{aligned} \psi(0,y,z) &= \psi(a,y,z) \quad \text{for all } y\text{, and } z \\ \psi(x,0,z) &= \psi(x,b,z) \quad \text{for all } x\text{, and } z \\ \psi(x,y,0) &= \psi(x,y,c) \quad \text{for all } x\text{, and } y \end{aligned} \tag{٣}$$

بالإمكان الحصول على المعادلات التالية:

$$\begin{aligned} \frac{d^2X(x)}{dx^2} + k_x^2X(x) = 0, \quad k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}, \\ \frac{d^2Y(y)}{dy^2} + k_y^2Y(y) = 0, \quad k_y^2 = \frac{2mE_y}{\hbar^2}, \\ \frac{d^2Z(z)}{dz^2} + k_z^2Z(z) = 0, \quad k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2}. \end{aligned} \tag{٤}$$

من ثم فقد تم تحويل المعادلة التفاضلية ذات المتغيرات الثلاث إلى ثلاث معادلات تفاضلية، كل واحدة تعتمد على متغير واحد فقط. ونجد أن كل معادلة من المعادلات (٤) مشابهة لمعادلة جسيم في صندوق ذي بعد واحد، لذلك نحصل عند استخدامنا للشروط الحدودية:

$$\begin{aligned} \psi(0,y,z) = \psi(a,y,z) = 0 \\ \psi(x,0,z) = \psi(x,b,z) = 0 \\ \psi(x,y,0) = \psi(x,y,c) = 0 \end{aligned}$$

على الحلول التالية:

$$\begin{aligned} X(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin k_x x, \quad k_x = \frac{n_x\pi}{a}, \quad n_x = 1,2,\cdots \\ Y(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}}\sin k_y y, \quad k_y = \frac{n_y\pi}{b}, \quad n_y = 1,2,\cdots \\ Z(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}}\sin k_z Z \quad k_z = \frac{n_z\pi}{c}, \quad n_z = 1,2,\cdots \end{aligned} \tag{٥}$$

وأيضاً

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^{\ 2}}{a^2} + \frac{n_y^{\ 2}}{b^2} + \frac{n_z^{\ 2}}{c^2}\right) \tag{٦}$$

والدالة المميزة تصبح:

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{a}z\right), \quad \begin{matrix} n_x = 1,2,\cdots \\ n_y = 1,2,\cdots \\ n_z = 1,2,\cdots \end{matrix} \tag{٧}$$

تعليقات:

أ- من المعادلة (٦) نرى أن قيم الطاقة غير متصلة (أي مكممة)،

ب- الأعداد (n_x, n_y, n_z) هي أعداد الكم في الاتجاهات الثلاثة. وهذه الأعداد مستقلة، أي: لا يعتمد بعضها على البعض الآخر.

ج- شرط المعايرة يتطلب:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dxdydz = \int_0^a |X(x)|^2 dx \int_0^b |Y(y)|^2 dy \int_0^c |Z(z)|^2 dz = 1 \qquad (٨)$$

د- في حالة المكعب $(a = b = c = L)$ فإن:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\underbrace{\left(n_x{}^2 + n_y{}^2 + n_z{}^2\right)}_{n^2} = n^2 E_1, \qquad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \qquad (٩)$$

هـ- من المعادلة (٩) سنعرف درجة الانتماء (أو التحلل) بأنها عدد الدوال التي لها (تنتمي إلى) نفس الطاقة. هذا الانتماء ناتج من تماثل المكعب، ويزول تماماً بتغير أطوال الصندوق. والجدول التالي يصف درجات الانتماء الخاصة بالمكعب.

درجة الانتماء	n^2	n_x	n_y	n_z	ψ_{n_x,n_y,n_z}
١	٣	١	١	١	$\psi_{1,1,1}$
٣	٦	١	١	٢	$\psi_{1,1,2}$
	٦	١	٢	١	$\psi_{1,2,1}$
	٦	٢	١	١	$\psi_{2,1,1}$
٣	٩	١	٢	٢	$\psi_{1,2,2}$
	٩	٢	١	٢	$\psi_{2,1,2}$
	٩	٢	٢	١	$\psi_{2,2,1}$
٣	١١	١	١	٣	$\psi_{1,1,3}$
	١١	١	٣	١	$\psi_{1,3,1}$
	١١	٣	١	١	$\psi_{3,1,1}$
١	١٢	٢	٢	٢	$\psi_{2,2,2}$

٦- تمارين عامة

١- جسيم يتحرك في بئر جهدي يعطى بالشكل:

$$V(x) = \begin{cases} -V_o, & 0 < x < a \\ 0, & a \le x \le 0 \end{cases}$$

حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد. ارسم بئر الجهد، واحسب معامل الانعكاس ومعامل النفاذية. ماهو شرط انعدام معامل الانعكاس؟

٢- جسيم يتحرك في بئر جهدي يعطى بالشكل:

$$V(x) = \begin{cases} V_o, & x \le 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \ge a \end{cases}$$

حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد. عندما $E < V_o$ أ- ارسم بئر الجهد، و احسب معامل الانعكاس ومعامل النفاذية.

٣- احسب الدالة والقيم المميزة لجسيم داخل صندوق مقفل ثنائي الأبعاد في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & 0 \langle x \langle a, 0 \langle y \langle b \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

٤- لجسيم يتحرك في مجال جهد:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha\, \delta(x); \qquad \alpha = \text{ positive constant}$$

حيث $\delta(x)$ هي دالة ديراك دلتا (انظر الملحق B). أثبت أن

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + k^2}, \quad T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{k^2}{\alpha^2 + k^2}$$

ملحق (3.A)

المعادلة التفاضلية البسيطة

سوف نستعرض هنا حلاً للمعادلة التفاضلية البسيطة من الرتبة الثانية في الصورة:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0 \qquad (١)$$

حيث k^2 قيمة ثابتة. لحل المعادلة (١) دعونا نستخدم التعويض:

$$\Psi = e^{mx} \qquad (٢)$$

لنحصل على المعادلة $m^2 + k^2 = 0$ التي لها الجذران $m = \pm i\ k$ حيث $i = \sqrt{-1}$. من ثم فإن الحل الخاص للمعادلة (١) يكون بالصورة e^{imx} أو e^{-imx} ، وبجمع الحلين نحصل على الحل العام وهو:

$$\Psi = A\ e^{imx} + B\ e^{-imx} \qquad (٣)$$

باستخدام المفكوك $e^{\pm ix} = \cos x \pm i \sin x$ نحصل على صيغة أخرى للحل العام بالصورة:

$$\begin{aligned}\Psi &= (A+B)\cos(mx) + (A-B)i\sin(mx)\\ &= C\cos(mx) + D\sin(mx)\end{aligned} \qquad (٤)$$

حيث A, B, C, D ثوابت اختيارية.

و بالمثل للمعادلة التفاضلية:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - m^2\Psi = 0 \qquad (٥)$$

يكون حلها العام بالصورة:

$$\begin{aligned}\Psi &= A\ e^{mx} + B\ e^{-mx}\\ &= C\cosh(mx) + D\sinh(mx)\end{aligned} \qquad (٦)$$

ملحق (3.B)

الجهود المتماثلة كروياً*

يقال عن طاقة الجهد $V(\boldsymbol{r})$ بأنها متماثلة كروياً (Spherically symmetric) إذا كانت $V(\boldsymbol{r})$ لا تتغير بالدوران (Rotationally invariant) ، ولهذا فإن $V(\boldsymbol{r})$ تعتمد فقط على المسافة $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ من مركز القوة، والتي ستختار كنقطة أصل للإحداثيات. من ثم فإن الأسطح المتساوية في الجهد تتكون من سطوح كرات مركزية (قشرة Shell) تبعد عن المركز بالمسافة الثابتة $|r|=\text{constant}$. ومميزات الجهد المركزي هي:

١- إن كمية الحركة المدارية L له تكون محفوظة (ثابتة)،

٢- منه نستطيع تعريف القوة المركزية بالمعادلة:

$$\boldsymbol{F}=-\nabla V(r)=-\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\partial V}{\partial r}$$

أ- اختزال (تبسيط) مسألة القوى المركزية:

لجسيم كتلته μ يتحرك في مجال قوة مركزية نجد أن الهملتونيان يعرف له كالتالي:

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}=\frac{P^2}{2\mu}+V(r)$$

وله صفة التبادل مع مؤثرات كمية الحركة المدارية، على سبيل المثال:

$$\left[\hat{H},\hat{L}\right]=\left[\hat{H},\hat{L}^2\right]=\left[\hat{H},\hat{L}_z\right]=0$$

وحيث إن:

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right]=0$$

لذلك فإن المؤثرات $\hat{L}^2$ ، $\hat{L}_z$ و $\hat{H}$ يصبح لهن دالة مميزة مشتركة. دعونا نعرف الدالة في الإحداثيات الكروية بالشكل التالي:

$$\Psi(\boldsymbol{r})=R(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

ومنها نجد أن معادلة شرودنجر (راجع ذرة الهيدروجين) تصبح:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\Psi=E\Psi$$

وتأخذ المعادلة القطرية الشكل:

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

وهي معادلة تفاضلية مبنية على فصل المتغيرات للمؤثر ∇^2 (ويُدعى لابلاسيان) في الإحداثيات الكروية.

من الملائم أيضاً أن نستخدم التعويض التالي:

$$u(r)=rR(r)$$

لنجد أن $u(r)$ تحقق المعادلة القطرية:

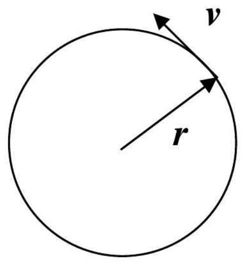
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}+V(r)\right]u=Eu$$

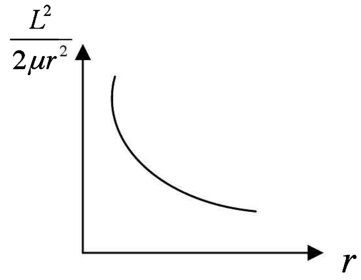
وهي متطابقة في الصيغة مع معادلة شرودنجر ذات البعد الواحد مع الاختلاف في تعريف الجهد المؤثر بالشكل:

$$V_{eff}(r)=V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}.$$

الحد الإضافي بالجهد، $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$، يسمى الجهد الطارد المركزي (Centrifugal potential). وظهور هذا الحد الإضافي بالجهد يمكن تفهمه من مبادئ الميكانيكا التقليدية كالتالي: لجسيم كتلته μ، يتحرك في مدار دائري نصف قطره r، تنشأ علية قوة طرد مركزية F_r تتجه قطرياً للخارج (كما بالشكل ١). قيمة القوة تحسب من المعادلة:

$$F_r = \mu \frac{v^2}{r} = \frac{L^2}{\mu r^3},$$





شكل (١) أ- الجهد الطارد المركزي ب- جسيم يتحرك في مدار دائري

حيث عرفنا $L = \mu vr$ بكمية الحركة الزاوية للمدار الدائري. ويعرف الجهد بالعلاقة $V(r) = \frac{L^2}{2\mu r^2}$ (نتيجةً لأن $F_r = -\frac{\partial V}{\partial r}$). وتبعاً لفروض ميكانيكا الكم، يجب أن نستعيض عن L^2 بالقيمة المميزة لها وهي $l(l+1)\hbar^2$.

على الرغم من تطابق المعادلة السابقة مع معادلة شرودنجر ذات البعد الواحد، فإن الشروط الحدودية المطلوبة للحل مختلفة تماماً, حيث r موجبة. ولتكون الدالة محددة في كل الأماكن فيجب أن نضع هنا الشرط الحدودي $u(0) = 0$ أي أنها تنعدم عند مركز القوى.

في حالة الموجة-s، وتعني أن $l = 0$، فإن المعادلة القطرية تؤول إلى:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \left[E - V(r)\right] u = 0$$

ب-حركة الجسيم الحر:

عندما نضع الجهد $V(r) = 0$، نجد أن حركة الجسيم الحر تتحقق بالمعادلة:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] R_{E,l}(r) = 0$$

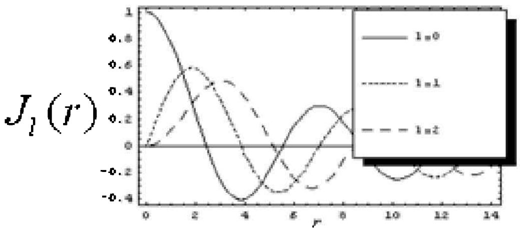
باستخدام المتغيرات $\rho = kr$ و $R_l(\rho) = R_{E,l}(r)$

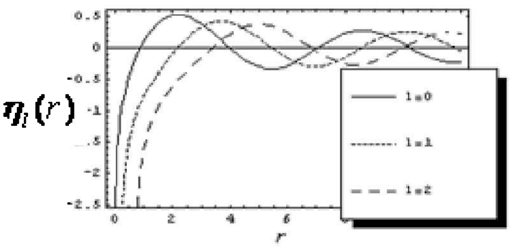
$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + (1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2})\right] R_l(\rho) = 0$$

وهي معادلة بسل التفاضلية الكروية، وحلها العام هو:

$$R_l(\rho) = AJ_l(kr) + B\eta_l(kr)$$

حيث A و B ثوابت اختيارية، J_l هي دالة بسل الكروية و η_l هي دالة نيومان و $E = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2$. الشكل التالي يوضح الدالتين $J_l(r)$ و $\eta_l(r)$ لقيم مختلفة للمسافة r.





والجدول التالي يوضح الدوال $J_l(x)$ ، $\eta_l(x)$ للمتغير x والدالة $P_l(\cos\theta)$ لقيم مختلفة للمتغير $\cos\theta$.

l	$P_l(\cos\theta)$	$j_l(x)$	$\eta_l(x)$
0	1	$\frac{\sin x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x}$
1	$\cos\theta$	$\frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$
2	$\frac{1}{4}(1+3\cos 2\theta)$	$\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3\cos x}{x^2}$	$-\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3\sin x}{x^2}$

وحيث إن الحل عند المركز يجب أن يكون منتظماً ومحدودَ القيمة (finite and regular) فيجب وضع $B = 0$. بالتالي فإن:

$$R_l(r) = Cj_l(kr)$$

وحيث إن القيم المميزة k هي قيم موجبة، لذلك نجد أن الطاقة $E = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2$ تأخذ جميع القيم الموجبة في المدى $\{0,\infty\}$، وتُمثّل بطيف مستمر (continuous spectrum).

وقد رأينا سابقاً أن الجسيم الحر، ذو كمية الحركة $\hbar k$ والطاقة $E=\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2$، يمكن تمثيله بواسطة موجة مستوية $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$. وحيث إن الدالة الكروية

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\varphi)=Cj_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

تكون دالة كاملة، فإننا نستطيع أن نضع الموجة المستوية $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ بدلالتها بالشكل:

$$e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}C_{lm}(k)\,j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

باختيارنا للمحور Z باتجاه المتجه $\boldsymbol{k}$، فإن:

$$e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}=e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}$$

ولا تعتمد على الزاوية φ . باستخدام التعويض $w=\cos\theta$ نجد:

$$\begin{aligned}e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}=e^{ikr\cos\theta}&=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(w)\\&=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}i^l j_l(kr)Y_{lm}^*(\hat{k})Y_{lm}(\hat{r})\\&\underset{r\to\infty}{\approx}\frac{1}{kr}\sum_l i^l\left(2l+1\right)\sin(kr-\frac{l\pi}{2})P_l(w)\end{aligned}$$

مثال: ادرس حركة جسيم، في الحالة $(l=0)$، داخل بئر جهدي كروي التماثل، ويعرف بالعلاقة الآتية:

$$V(r)=\begin{cases}0, & \text{for} \quad r<a\\ \infty, & \text{for} \quad r>a\end{cases}$$

الحل: يتحرك الجسيم بحرية ضمن المدى $0\le r<a$ وتأخذ الدالة الصورة العامة:

$$\begin{aligned}\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)&=R(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)\\&=\left[AJ_l(kr)+B\eta_l(kr)\right]Y_{l,m}(\theta,\varphi)\end{aligned}$$

حيث A و B ثوابت اختيارية، ولكن الثابت B يؤول للصفر، حيث إن الدالة محددة عند المركز$(r=0)$. وحيث إن الجسيم لا يستطيع اختراق الحاجز عند الحد $r\ge a$

وهذا ناتج عن كون الحاجز لا حد لارتفاعه، بمعنى أن $V(a) = \infty$. لذلك فإن الدالة يجب أن تختفي (تؤول للصفر) عند الحد $r \geq a$ ، ومنه نستنتج أن:

$$J_l(ka) = 0$$

المعادلة الأخيرة تتحقق لقيم متعددة لجذور دالة بسل الكروية، ولنفترضها χ_{nl} ، انظر الجدول الآتي:

رقم الجذر	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
١	3.14	4.493	5.763	6.99
٢	6.28	7.725	9.09	10.42
٣	9.43	10.90	12.32	13.70

ومنها نجد أن الطاقة تتحقق بالمعادلة:

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\chi_{nl}}{a}\right)^2$$

مثال: ادرس حركة جسيم داخل بئر جهدي كروي التماثل محدد العمق، ويعرف بالعلاقة الآتية:

$$V(r) = \begin{cases} -V_o, & \text{for} \quad r \leq a \\ 0, & \text{for} \quad r > a \end{cases}$$

الحل: باستخدام المعادلة الموجية نجد أن:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - V_0(r)u = Eu, \qquad r \leq a$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} = Eu, \qquad r > a$$

ومن دراستنا السابقة نجد أن الحل العام يمكن وضعه بالصورة:

$$u_{in}(r) = A\sin(k_{in}r) + B\cos(k_{in}r), \quad k_{in} = \sqrt{\frac{2\mu(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \qquad r \le a$$

$$u_{out}(r) = Ce^{-k_{out}r}, \qquad k_{out} = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \qquad r > a$$

حيث إن اهتمامنا يتجه نحو طاقة المدارات ذات المستويات المرتبطة (bound-state energy levels) ، التي تتحقق من الشرط $E < 0$. والشرط الحدودي $u_{in}(0) = 0$ يتطلب $B = 0$.

وحيث إن الدالة ومشتقاتها يجب أن تكون متصلة خلال الحد $r = a$ فنجد أن الشرط الحدودي:

$$\left.\frac{\left(\frac{du_{in}(r)}{dr}\right)}{u_{in}(r)}\right|_{r=a} = \left.\frac{\left(\frac{du_{out}(r)}{dr}\right)}{u_{out}(r)}\right|_{r=a}$$

يعطينا المعادلة:

$$k_{in}\cot k_{in} = -k_{out}$$

وبضرب المعادلة الأخيرة بالمقدار a واستعمال العلاقتين:

$$\xi = ak_{in}, \qquad \eta = ak_{out}$$

نصل إلى المعادلة:

$$\xi\cot\xi = -\eta, \qquad \eta^2 + \xi^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}a^2$$

واجب منزلي: ارسم الدالة $\xi\cot\xi = -\eta$ ومن الرسم أثبت أنه لا يوجد مدارات إلا إذا تحقق الشرط $V_0a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}$، ويوجد مستوى واحد مرتبط في حالة $\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu} < V_0a^2 \le \frac{9\pi^2\hbar^2}{8\mu}$ ، إلخ......