الباب السادس

معادلة شرودنجر الزمنية : Time dependent Schrodinger equation

لايجاد معادلة الأمواج المصاحبة لجسيم ما نبدأ اولا بمعادلة موجة توافقيـــة مستوية plane harmonic matter wave طولهـــا λ وتنتشر فى الاتجاه الموجب لـ x

معادلة هذه الموجة هى

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

حيث Ψ هى الكمية التى تتذبذب . (وهى الازاحة فى حالة الأمواج الميكانيكية).

لكن من النظرية الكمية $E = h\,f$ ومن فرض دى برولى $\lambda = \frac{h}{p}$

حيث E طاقة الجسيم ، p كمية حركته ،

وبالتعويض فى المعادلة الموجية نحصل على :

$$\therefore \quad \Psi = A \sin \frac{2\pi}{h} (Et - p\,x)$$

اذا كانت V هى طاقة الموضع للجسيم تكـــون الطاقة الكلية لـــه

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

بمفاضلة المعادلة (١) لإيجاد المعادلة التفاضلية لـ Ψ

١ — بالنسبة الى t

$$\therefore \quad \frac{d\,\Psi}{d\,t} = \frac{2\pi}{h}\, E\, A \cos \frac{2\pi}{h}\,(Et - px)$$

٢ — بالنسبة الى

$$\frac{d\Psi}{dx} = -\frac{2\pi}{h}\, p\, A \cos \frac{2\pi}{h}\,(Et - px)$$

وبالمفاضلة مرة ثانية

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

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

ومن معادلة (٢) $E = \frac{p^2}{2m} + V$ يمكن وضع المعادلة التفاضلية

التى تعطى المعادلة الموجية على الصورة :

« ونحصل على هذه المعادلة بالتجربة » .

$$\frac{d\,\Psi}{dt} = a\,\frac{d^2\Psi}{dx^2} + bV\,\Psi$$

حل هذه المعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية والتى تصف الموجة يكون على الصورة :

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

حيث A & B ثوابت .

بمفاضلة المعادلة (٤) وبالتعويض فى معادلة (٣)

وبمساواة معاملات حدود الجيب وجيب التمام كل على حدة ، وذلك لتتحقق المعادلة لجميع قيم t ، نحصل على :

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

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

ومنها :

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

&

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

هذه المعادلات تنطبق على المعادلة (٢) اذا كان :ـ

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

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

بحذف a أو b نحصل على : $A^2 = -B^2$

$$A = \pm\, i\,B$$

وباعتبار $A = -\,i\,B$ نجد أن $\therefore\quad a = \dfrac{i\,h}{4\pi m}$

$$b = \frac{2\pi}{i\,h}$$

وتصبح المعادلة الموجية (٣)

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{ih}{4\pi m}\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2\pi}{i\;h}\,V\,\psi$$

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

وتعرف هذه المعادلة بمعادلة شرودنجر الزمنية فى اتجاه واحد .

وتجمع هذه المعادلة للأمواج المادية matter waves خصائص التدفق الحرارى heat flow فى الجوامد وخصائص أخرى تشابه انتشار الموجات الميكانيكية (الصوتية) فى الأوساط المرنة .

المعنى الطبيعى للدالة Ψ :ـ

تمثل الدالة Ψ فى معـــادلة شرودنجر تلك الكمية التى تتـــذبذب فى الفراغ (الأبعاد الثلاثة) وأيضـــا على مدى الأزمنة المختلفة . ويجب أن يتحقق ثلاثة شروط لهذه الدالة Ψ :ـ

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

(ii) يجب أن تكون Ψ محدودة وأحادية القيمة (ii)

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

عند ما نعالج تجربة تكون فيها الحالة الجسيمية للمادة هى الأساس ، كما هو الحال فى تجارب التشتت scattering ، يكون مربع القيمـــة المطلقة للدالة $|\Psi|^2$ متناسبا مع عدد الجسيمات التى تعبر وحدة المساحات العمودية على اتجاه حركتها فى الثانية الواحدة .

أما عند ما نعالج مثل هذه المشاكل فى الضوء (البصريات) حيث تكون الطبيعة الموجية للفوتونات هى المطلوبة فاننا نعتبر شدة الضوء (عدد الفوتونات التى تعبر وحدة المساحات فى الثانية) متناسبة مع $|\Psi|^2$

الحالة العيارية Normalization condition

مربع الدالة Ψ يعطى درجة احتمال وجود جسيم فى مكان معين فى لحظة معينة .

وتعرف كثافة الاحتمال probability density بالمقدار $|\Psi|^2$.

وبديهى 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 .

عند ما تستوفى الدالة الموجية Ψ هذا الشرط يقال عنهـا انها حالة عادية normalization conditioon

الحـــالة العمودية : Orthogonality condition

عند ما يتلاشى قيمة التكامل السابق : أى أن

يكون الجسيم غير

$$\iiint |\psi|^2 \; dx\,dy\,dz = 0$$

موجود على الاطلاق وتسمى الحالة عندئذ بالحالة العمودية orthogonal

معادلة شرودنجر الغير زمنية :
Time independent Schrodinger equation

عند معالجة الحالات الموقوفة او الكمية Stationary or quantum states تمثل المعادلة الموجية والدالة Ψ حالة موجة موقوفة stationary wave يظهر فيها الزمن فى حد منفصل sperate factor اى ان

$$\Psi = X(x,y,z) \cdot e^{-iwt}$$

$$= X(x,y,z) \cdot e^{-2\pi i f t}$$

$$= X(x,y,z) \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} \cdot Et}$$

حيث $X\ (x, y, z)$ تمثل السمة الموجية وتتوقف على احداثيات المكان فقط باجراء التفاضل جزئيا مرة بالنسبة للزمن ومرتين بالنسبة لاحداثيات المكان نحصل على

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{2\pi i}{h} E\, e^{-\frac{2\pi i}{h} Et} \,.\, X$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = e^{-\frac{2\pi i}{h} Et} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} \quad ; \quad ..etc..$$

بالتعويض فى معادلة شرودنجر الزمنية ذات البعد الواحد

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

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

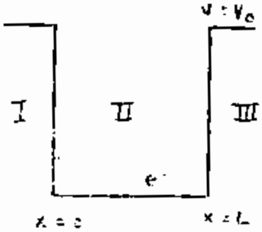
هذه هى معادلة شرودنجر الغير زمنية للبعد الواحد . أما اذا استخدمنا الابعاد الثلاثة $z \quad y \quad x$ تصبح المعادلة :

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

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

وواضح من هذه المعادلة انه اذا كانت $V > E$ تعطى المعادلة حلولا على شكل دالة الجيب اما اذا كانت $V < E$ فان الدالة Ψ تكون على شكل دالة اسيه .

الالكترون فى بئر جهد قائم : Electron in a square potential well



شكل (٦ — ١)

اذا اعتبرنــا الكترون حر يتحرك فى الاتجــاه الموجب لـ x بسرعة ثابتة تكون طاقة موضعه مساوية للصفر حيث لاتؤثر عليه اى قــوى خارجية . امــا اذا اثرت على الالكترونقوى تلزمه على الوجود والحركة فقط

فى المنطقة بين $x = o$ & $x = L$ فان طاقة الوضع تكون كبيرة ويمكن تشبيه الوضع بأن الالكترون ساقط فى بئر للجهد potential well ارتفاعه يساوى طاقة الموضع للالكترون V_0

لحل معادلة شرودنجر فى هذه الحالة نفرض ثلاثة مناطق I , II , III كما فى الرســـم .

داخل المنطقة II يكون الجهد ثابتا . ولكن للتبسيط يمكن اعتبار بدء قياس الجهد ، اى نقطة الاصل ، عند هذا الجهد الالكترونى .
∴ يكون جهد الالكترون اعتباريا يساوى صفر ويكون الجهد عند قمة البئر مساويا لهد الالكترون (يجب أن يساوى الجهد هنا بلقياس المطلق صفرا حيث أن الالكترون يكون حرا تماما ولايرتبط اطلاقا بالقوى الجاذبة)

وبهذه الطريقة نضع فى معادلة شرودنجر لهذا الالكترون $V = O$ فتصـــبح

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

ولهذه المعادلة الحل العام الاتى :

$$\psi = A \sin \omega x + B \cos \omega x \qquad \ldots (1)$$

حيث A & B ثوابت ،

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

داخل المنطقة III I يكون الجهد Vo اكبر كثيرا من E خاصة في حالة الابار 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 دوال اسيه

$$\therefore \psi = C\,e^{-\omega' x} + D\,e^{\omega' x}$$

حيث C & D ثوابت ،

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

لكن من احد شروط الدالة Ψ ان تكون دائما محدودة لذلك فبالنسبة المنطقة I عندما تؤول $x \longrightarrow -\infty$ فان الحد $C e^{-\omega' x}$ يؤول الى مالا نهاية وهذا طبعا غير جائز لذلك يجب ان يتلاشى الثابت ، $\therefore C = 0$

وتكون المعادلة الموجية فى منطق I هى

$$\Psi = D e^{w' x} \quad \ldots\ldots (2)$$

وبالمثل فى المنطقة III عندما تؤول $x \rightarrow \infty$ فان الحد

$D e^{w' x}$ يتلاشى فقط اذا تلاشت (D) اى ان $D = 0$ فى هذه الحالة وتكون معادلة الموجه فى المنطقة III هى

$$\Psi = C \quad e^{-w' x} \quad \ldots\ldots (3)$$

أيضا من شروط الدالة Ψ أن تكون متصلة وكذلك $\frac{d\Psi}{dx}$

$\therefore$ عند حدود بئر الجهد $X = L$ او $X = o$ وباستعمال معادلة(١)

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

اما اذا استخدمنا المعادلة (٣) للحصول على نفس المقدار

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

يجب أن تكون المعادلتين السابقتين (٤) ، (٥) متطابقتين

اذ انهما يمثلان نفس القيمة . ولكن اذا آلت V_0 الى ∞ فان المعادلة (٤) لاتتغير حيث ان قيمة V_0 لاتظهر فى ω بينما باستخدام المعادلة (٥) نجد ان

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)_{x = L} \rightarrow \infty$$

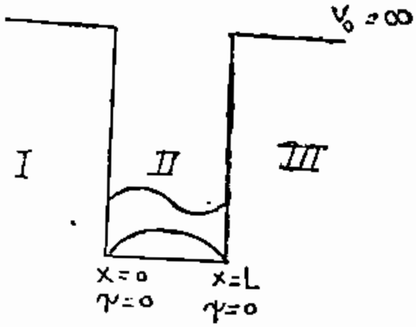
تؤول الى مالانهاية ما لم تؤول Ψ الى الصفر . حيث أن

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

$$V_0 \longrightarrow \infty \qquad \omega' \longrightarrow \infty$$

ونتيجة لذلك فان قيمة Ψ عند $x = o$ او عند $x = L$ **تقترب من الصفر كلما ازدادت قيمة V_0 قربا من ما لا نهاية** ويكون تغير الدالة Ψ داخل بئر الجهد خاضعا لدالة الجيب

قيم الطاقة Eizen values



يمكن ايجاد مستويات الطاقة فى بئر جهد لانهائى العمق للالكترون باستخدام المعادلة $(V_0 = \infty)$ (۱) والتعويض فيها بشروط الحدود boundary conditions ∴

شــكل (٦ ــ ٢)

عند $X = o$ ، $X = L$ تكون $\Psi = o$

$$\sin \omega L = o \quad ، \quad \therefore B = o$$

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

$$\text{at } x = o \quad \therefore O = B$$

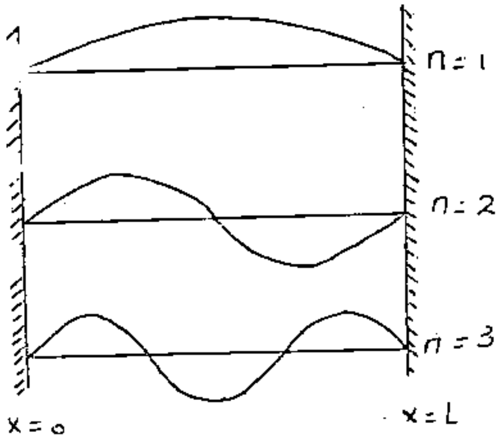
$$\text{at } x = L \qquad O = A \sin \omega L + O$$

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

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

$$\therefore \quad E_n = \frac{n^2 h^2}{8 m L^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

(6) . . . حيث n هو العدد الكمى وتعطى هذه المعادلة مستويات الطاقة للالكترون فى حالته الموقوفة . ووجود الاعداد الكمية ومستويات الطاقة المتفرقة للطاقة discrete energy levels يميز دائما حل جميع حالات الجسيمات التى يحددها حيز محدود من الفراغ حيث تكون موجتها المصاحبة موقوفة

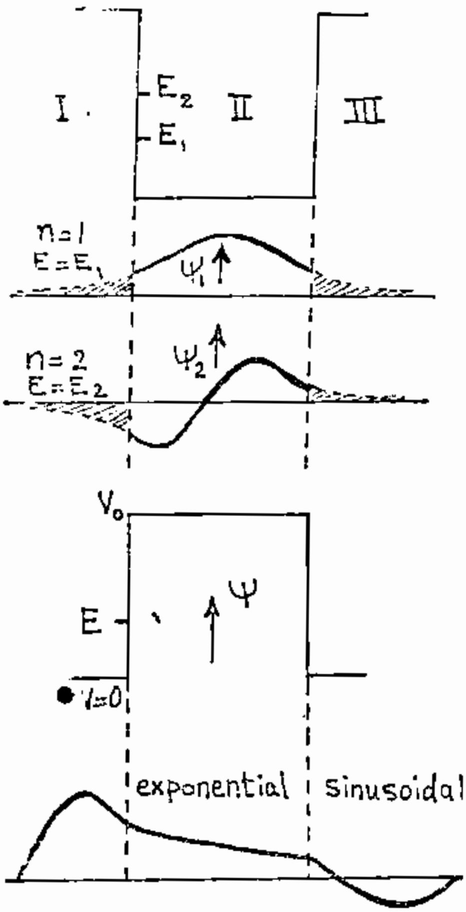


شـــكل (٦ — ٣)

ظاهرة الانفاق Tunnel effect

عندما تكون طاقة الموضع للالكترون V_0 صغيرة اى انه عندما يكون عمق بئر الجهد صغيرا نجد أننا اذا استخدمنا شروط الحدود boundary conditions لايجـــاد الدالة الموجية Ψ هنـــاك فان قيمتهـــا لا تتلاشى بل

توجد قيم لـ Ψ داخل كل من المنطقتين I & III تقل حسب دالة اسيه كلما ازدادت x سواء فى الاتجاه الموجب أو السالب



ولما كان لـ Ψ قيمة حقيقية داخل حاجزى الجهد Potential barrier لذلك تكون لـ I & III قيمة حقيقية $|\psi|^2$. أى احتمال حقيقى لوجود الالكترون خارج بئر الجهد وهذا هو الجديد فى الموضوع فالنظرية الكلاسيكية لاتدع اى احتمال لوجود الجسيم خارج بئر الجهد بينما ثبت بواسطة الميكانيكا الموجية وجود احتمال لان يخترق الجسيم حاجز بئر الجهد ويتواجد فى المنطقة المحرمة كلاسيكيا وتسمى هذه الظاهرة بظاهرة الأنفاق Tunnel effect

شكل (٦ — ٤)

وتزداد هذه الظاهرة وضوحا كلما نقصت قيمة V_0

يمكن اذا للالكترونات أن تخترق حاجزا سمكه $(x_1 - x_0)$ وتعرف درجة احتمال النفاذ transmission probability بانها النسبة بين $|\Psi|^2$ مقدرة عند x_1 الى $|\Psi|^2$ مقدرة عند البعد x_0 وتستخدم ظاهرة الانفاق فى الانبعاث المجالى للالكترونات من الجوامد فى ميكروسكوب الانبعاث الابونى المجالى Field — ionamicroscoope