معادلة شردونجر الزمنية : Time dependent Schrodinger equation

لإيجاد معادلة الأمواج المصاحبة لجسيم ما نبدأ أولا بمعادلة موجة توافقية مستوية plane harmonic matter wave طولها λ وتنتشر فى الاتجاه الموجب لـ x .

معادلة هذه الموجة هى :

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

حيث Ψ هى الكمية التى تتذبذب . (وهى الإزاحة 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 :

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

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

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

بمفاضلة المعادلة (١) لإيجاد المعادلة التفاضلية لـ Ψ .

١ – بالنسبة إلى t :

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

٢ – بالنسبة إلى x :

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

وبالمفاضلة مرة ثانية :

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

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

ومن معادلة (2) $E = \frac{p^2}{2m} + V$ يمكن وضع المعادلة التفاضلية التى تعطى المعادلة الموجية على الصورة :

$$\frac{d\Psi}{dt} = a\frac{d^2\Psi}{dx^2} + bV\Psi \qquad \ldots\ldots (3)$$

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

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

حيث A & B ثوابت

بمفاضلة المعادلة (4) وبالتعويض فى معادلة (3)

وبمساواة معاملات حدود الجيب وجيب التمام كل على حدة ، ولذلك 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 :

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

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

هذه المعادلات تنطبق على المعادلة (2) إذا كان :

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

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

بحذف a أو b نحصل على :

$$A^2 = - B^2$$

$$A = \pm i B$$

وباعتبار $A = - i B$ نجد أن

$$\therefore a = \frac{i h}{4 \pi m}$$

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

وتصبح المعادلة الموجية (3)

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

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

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 :

تمثل الدالة Ψ فى معادلة شرودنجر تلك الكمية التى تتذبذب فى الفراغ (الابعاد الثلاثة) وأيضا على مدى الأزمنة المختلفة . ويجب أن يتحقق ثلاثة شروط لهذه الدالة Ψ :

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

(ii) يجب أن تكون Ψ محدودة وأحادية القيمة

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

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

أما عندما نعالج مثل هذه المشاكل فى الضوء (البصريات) حيث تكون الطبيعة الموجية للفوتونات هى المطلوبة فإننا 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 $|\Psi|^2$.

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 والدالة Ψ حالة موجة موقوفة stationary wave يظهر فيها الزمن فى حد منفصل sperate factor أى أن :

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

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

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

حيث $X(x, y, z)$ تمثل السعة الموجية وتتوقف على إحداثيات المكان فقط . بإجراء التفاضل جزئيا مرة بالنسبة للزمن ومرتين بالنسبة لإحداثيات المكان ، نحصل على :

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

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

بالتعويض فى معادلة شرودنجر الزمنية ذات البعد الواحد

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

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

هذه هي معادلة شرودنجر الغير زمنية للبعد الواحد . أمـا اذا استخدمنـا الأبعـاد الثلاثة $x \; y \; z$ تصبح المعادلة :

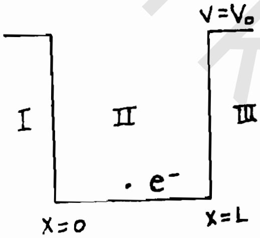
$$\nabla^2 X + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) X = 0$$

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

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

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

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



شكل (٦ - ١)

لحل 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 الإلكترونى .

∴ 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 :

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

حيث A & B ثوابت ،

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

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 دوال أسية :

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

حيث D & C 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 مالا نهاية ، وهذا طبعا غير جائز ، لذلك يجب أن يتلاشى الثابت $\therefore C = 0$

وتكون المعادلة الموجية فى المنطقة I هى :

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

وبالمثل فى المنطقة III عندما تؤول $x \longrightarrow \infty$ فإن الحد $D e^{w' x}$ يتلاشى فقط إذا تلاشت (D) أى أن $D = 0$ ، فى هذه الحالة تكون معادلة الموجة فى المنطقة III هى :

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

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

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

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

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

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)_{x=L} = -\,\omega^{\backslash} C\, e^{-\omega L} = -\,\omega^{\backslash}\, \Psi \qquad ..\ (5)$$

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 فى ω ، بينما باستخدام المعادلة (5) نجد أن :

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

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

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

$$V_0 \longrightarrow \infty \qquad \omega^{\backslash} \longrightarrow \infty$$

ونتيجة لذلك فإن قيمة Ψ عند $x = 0$ أو عند $x = L$ تقترب من الصفر كلما ازدادت قربا قيمة V_0 من مالا نهاية ويكون تغير الدالة Ψ داخل بئر الجهد خاضعا لدالة الجيب ، شكل (٦ – ٢)

قيم الطاقة Eigen values :

يمكن إيجاد مستويات الطاقة فى بئر جهد لا نهائى العمق للإلكترون ($V_0 = \infty$) باستخدام المعادلة (1) والتعويض فيها بشروط الحدود . boundary conditions .

عند $x = 0$ ، $x = L$ تكون $\Psi = 0$

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

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

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

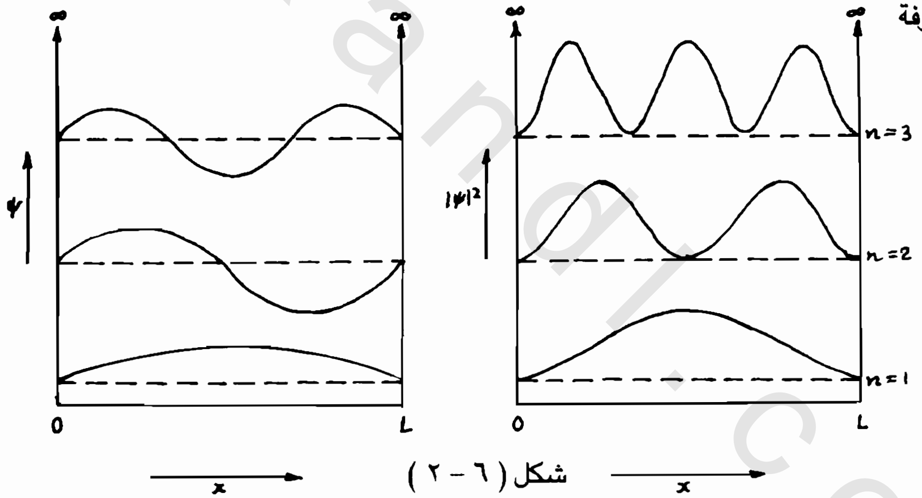
$$\text{at } x = L \quad 0 = A \sin \omega L + o$$

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

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

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

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

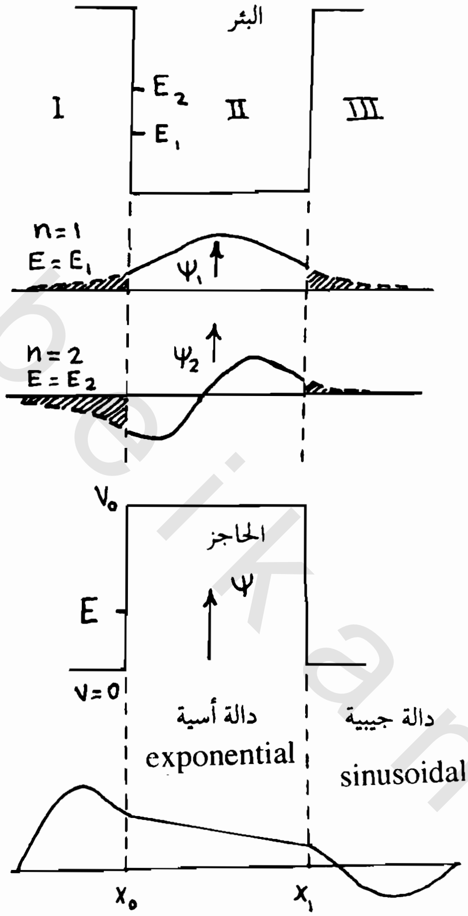


شكل (٦ - ٢)

ظاهرة الانفاق Tunnel effect

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 فى الاتجاه الموجب أو السالب ،

ولما كان لـ Ψ قيمة حقيقية داخل حاجزى الجهد Potential barrier III & I ، لذلك تكون لـ $|\Psi|^2$ 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)



شكل (٦-٣)

وتزداد هذه الظاهرة وضوحا كلما نقصت قيمة V_0 يمكن إذا للإلكترونات أن تخترق حاجزا سمكه ($x_1 - x_0$) وتعرف درجة احتمال النفاذ trsmission probability بأنها النسبة بين $|\Psi|^2$ مقدرة عند x_1 إلى $|\Psi|^2$ مقدرة عند البعد x_0 ، وتستخدم ظاهرة الانفاق فى الانبعاث المجالى للإلكترونات من الجوامد Field - ion microscope فى ميكروسكوب الانبعاث الأيونى المجالى .

مسائل وتمارين علي الباب السادس

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

٢ – احسب احتمال الأنفاق tunneling probability لإلكترون فى بئر جهد حيث $(V_0 - E) = 1\ ev$ واتساع حاجز الجهد $1\ ^\circ A$ وقارن بين هذه القيمة والقيمة المناظرة لإلكترون ساقط فى بئر عمقه 10 ev واتساع حاجز جهده $10\ ^\circ A$.

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 الإلكترون فى الحاجز إذا كان سمكه L يساوى 0.1 n m ، 1 n m .

الحل :

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

احتمال الأنفاق فى الحاجز هو

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

حيث

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

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 فى بئر جهد لحساب مستويات الطاقة لنيوترون موجود بنواة قطرها $2 \times 10^{-5}\ n\,m$.

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 بالمعادلة : $A = \sqrt{2/L}$

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

ثم أجرى التكامل .

٧ – متذبذب توافقى ذى بعد واحد دالته الموجية هى :

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

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 .

جـ – ما هى نسبة الاختلاف فى الطاقة إذا استخدمنا معادلة الطاقة اللانسبوية ؟

٩ – اشرح نظرية الأنفاق ، وبين كيف تستخدم لتفسير ظاهرة الإنبعاث الإلكترونى من الأقطاب الباردة ، كما فى ميكروسكوب المجال الأيونى ؟

١٠ – إذا كان ثابت القوة فى حركة توافقية بسيطة هو 0.1 J / m . اوجد التردد ، علماً بأن الكتلة المتذبذبة 1 kg . ماذا يكون العدد الكمى فى هذه الحالة إذا كانت الطاقة الكلية هى 0.1 J ؟ . وماذا يكون الفرق بين مستويى 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 فى هذا الحاجز .

١٢ – احسب الفرق بين مستويى الطاقة الأول والأرضى للإلكترون فى بئر جهد لا نهائى الارتفاع اتساعه

(١) 5 °A (٢) 1 cm

ماذا يكون طول الموجة المصاحبة لعملية الانتقال من المستوى الأول للمستوى الأرضى فى كل حالة ؟