معادلة شرودينجر

Schrödinger's Equation

1. مقدمة:

تعرف معادلة شرودينجر بأنها المعادلة التفاضلية الموجية(من المرتبة الثانية) التي يعطي حلها الدالة الموجية التي تصف سلوك الجسيمات المادية(الواقعة في مجال جهد ما) اعتمادا على طبيعتها المادية.ويشترط بالدارس أن يكون على معرفة بالمعادلات التفاضلية الجزئية وبمبادئ التفاضل والتكامل والمؤثرات بالرياضيات ،وفي البداية سيعتقد الدارس أننا ندرس مواضيع رياضيات معقدة جدا لأنك بحاجة إلى كل الرياضيات ،ومع التعامل المستمر مع ميكانيكا الكم ستشعر أنك بحاجة إليه دوما بل ربما سيصبح صديقك المخلص الذي يلبي لك كل ما تحتاج إليه في الفيزياء المعاصرة.

2. معادلة شرودينجر العامة(التابعة للزمن والموضع):

للحصول على معادلة شرودينجر يتم الاعتماد على عدة طرق وسوف أذكر البعض منها وعلى الطالب أن يجتهد في الاستنتاج لأكثر من طريقة لكي يتمكن من التعامل مع هذه المعادلة التي سترافقنا في ميكانيكا الكم بشكل دائم فهي الهواء الذي يستنشقه هذا الفرع الحساس من فروع الفيزياء، من هذه الطرق:

A. من الهاملتوني الكلاسيكي للطاقة :

يعرف الهاملتوني في الفيزياء الكلاسيكية بأنه الطاقة الكلية وكلاسيكيا تعرف الطاقة الكلية بأنها مجموع الطاقة الحركية وطاقة الوضع ، وتعطى بالعلاقة التالية :

$$E = T + U(r) = \frac{1}{2}mv^2 + U(r) = \frac{m^2v^2}{2m} + U(r)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(r) \qquad (1)$$

نحتاج من المعادلة (1) قيمة الطاقة الكلية E وكمية الحركة p ، للجسم المادي الموصوف بفرضية دوبري ، وهذه المعلومات من المفترض أن نجدها بالدالة الموجية التي تصف الجسيم (راجع المعنى الفيزيائي للدالة الموجية)، والتي أعطيت سابقا بالعلاقة التالية :

$$\psi(r,t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r} - Et)} \qquad (2)$$

والمهم جدا جدا أن نفتش عن طريقة رياضية مناسبة نطبقها على العلاقة (2) نحصل من خلالها على قيمتي الطاقة وكمية الحركة، ويلاحظ أن الطريقة المناسبة هي تفاضل العلاقة (2) بالنسبة للموضع للحصول على كمية الحركة وللسهولة نأخذ حالة البعد الواحد(x) وبعد ذلك نعمم على الأبعاد الثلاثة ،كما يلي:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = A\,\frac{ip}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p.x-Et)} = \frac{ip}{\hbar}\psi(x,t) \qquad (3)$$

نشتق العلاقة (3) مرة ثانية للحصول على مربع كمية الحركة p في العلاقة (1) وليس تربيع العلاقة (3) كما يلي:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = A\,\frac{ip}{\hbar}.\frac{ip}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p.x-Et)} = \frac{-p^2}{\hbar^2}\psi(x,t)$$

$$p^2 = \frac{-\hbar^2}{\psi(x,t)}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \qquad (4)$$

ونشتق العلاقة (2) بالنسبة للزمن للحصول على الطاقة E ،كما يلي:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = A\,\frac{-iE}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p.x-Et)} = \frac{-iE}{\hbar}\psi(x,t) \Rightarrow$$

$$E = \frac{-\hbar}{i\,\psi(x,t)}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \qquad (5)$$

نعوض العلاقتين (4) و (5) في العلاقة (1) فنجد:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

$$\frac{-\hbar}{i\,\psi(x,t)}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m\,\psi(x,t)}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x) \Rightarrow$$

$$\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x,t) \qquad (6)$$

وبكتابة العلاقة (6) بالأبعاد الثلاثة ، ووضعها كما نجدها بالكتب (بتبديل أوضاع الحدود ،الحد اليميني يصبح يساري والعكس):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(r,t)}{\partial r^2} + U(r)\psi(r,t) = \frac{-\hbar}{i}\frac{\partial \psi(r,t)}{\partial t} \qquad (6)$$

تمثل العلاقة (6) معادلة شرودينجر العامة ،وهي كما تبدو معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية ،اشتقت من معالجة الدالة الموجية للجسيم المادي ،ومن المفترض أن حلها يعطي الدالة الموجية المتمثلة بالعلاقة(2)، ويفترض بهذه المعادلة أن تعطي وصفا كاملا للجسيم المادي (المجهري)بشكل صحيح .

ويمكن كتابة العلاقة (6) بلغة <u>الطاقة في ميكانيكا الكم</u> كما يلي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial r^2}+U(r)\psi(r,t)=\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+U(r)\right]\psi(r,t)=\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t)\Rightarrow$$

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+U(r)$$

$$\hat{E}=\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{H}\psi(r,t)=\hat{E}\psi(r,t) \qquad (7)$$

تمثل العلاقة (7) معادلة شرودينجر العامة بلغة ما يسمى بالمؤثرات ،يسمى المقدار $\hat{H}$ هاملتوني الطاقة بلغة ميكانيكا الكم أو مؤثر الهاملتوني بلغة المؤثرات(راجع المؤثرات) ويسمى المقدار $\hat{E}$ مؤثر الطاقة الكلية،أي أن الطاقة الكلية بلغة المؤثرات تساوي مؤثر الهاملتوني.

B. من المعادلة التفاضلية الموجية للفوتونات:

من المعلوم أن المعادلة التفاضلية الجزئية للفوتونات (الأمواج الكهرومغناطيسية)لها الشكل التالي :

$$\nabla^2\varphi(r,t)=\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi(r,t)}{\partial t^2} \qquad (8)$$

ويعطي حل هذه المعادلة التفاضلية الدالة الموجية التالية:

$$\varphi(r,t)=Be^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r}-Et)} \qquad (9)$$

العلاقة (9) معادلة موجة تعطي وصفا ماديا للفوتون ، وبما أن الفوتون يمثل الشكل المادي من المثنوية(موجة-جسيم) وفق فرضية دوبري،إذن يمكن اعتبار العلاقة (8) معادلة تفاضلية تعطي الوصف المزدوج للجسيم المادي بعد استبدال سرعة الضوء c بالسرعات المعممة للجسيم المادي v والتي لايمكن لسرعاتها أن تصل لسرعة الضوء(نظرية اينشتاين) ، وبالتالي يمكن ببعض المعالجات الرياضية البسيطة الحصول على معادلة شرودينجر بالمفهوم اللانسبيوي (سرعة الجسيمات اقل من سرعة الضوء) كما يلي :

$$\nabla^2\psi(r,t)=\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \qquad (10)$$

يفترض بالمعادلة التفاضلية (10)أن تعطينا حلا يتمثل بالدالة الموجية للجسيم المدروس الذي سرعته أصغر من سرعة الضوء ولها الشكل:

$$\psi(r,t)=A\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r}-Et)} \qquad (11)$$

ولا نستغرب أن العلاقة (10) تمثل معادلة شرودينجر العامة ويمكن إرجاعها للعلاقة (6) أو (7) وذلك من خلال العمليات الرياضية التالية:

- نشتق العلاقة (11) مرتين بالنسبة للزمن فنجد:

$$\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t}=A\,\frac{-iE}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(p.r-Et)}=\frac{-iE}{\hbar}\psi(x,t)\Rightarrow$$
$$\frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial t^2}=A\,\frac{-iE}{\hbar}.\frac{-iE}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(p.r-Et)}=\frac{-E^2}{\hbar^2}\psi(r,t) \qquad (12)$$

- نعوض العلاقة (12) في العلاقة (10) فنجد :

$$\nabla^2\psi(r,t)=\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$
$$\frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial t^2}=\frac{-E^2}{\hbar^2}\psi(r,t)\Rightarrow$$
$$\nabla^2\psi(r,t)=\frac{1}{v^2}\frac{-E^2}{\hbar^2}\psi(r,t) \qquad (13)$$

- في العلاقة (13) لدينا:

$$E=\hbar\omega\Rightarrow\frac{E^2}{\hbar^2}=\omega^2$$
$$\frac{1}{v^2}\frac{E^2}{\hbar^2}\Rightarrow\frac{\omega^2}{v^2}=k^2 \qquad (14)$$

- نربط العلاقة (14) (حيث kالعدد ألموجي راجع سرعة الطور)بعلاقة الطاقة الكلية كما يلي:

$$E=T+U(r)=\frac{1}{2}mv^2+U(r)=\frac{m^2v^2}{2m}+U(r)$$

$$E=\frac{p^2}{2m}+U(r)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+U(r)\Rightarrow$$

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(r)\right] \qquad (15)$$

- نعوض (14) في (13) وبعد ذلك نعوض (15) في (13) فنجد :

$$\nabla^2\psi(r,t)=-\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(r)\right]\psi(r,t)\Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t)+U(r)\psi(r,t)=E\psi(r,t) \qquad (16)$$

العلاقة (16) عين العلاقة (6) بعد استبدال الجانب الأيمن بما يساويه في العلاقة (5) أي:

$$E=\frac{-\hbar}{i\psi(x,t)}\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t}\Rightarrow E\psi(r,t)=\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t)+U(r)\psi(r,t)=\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t}=E\psi(r,t) \qquad (17)$$

العلاقة (17) تمثل معادلة شرودينجر العامة وتصف سلوك الجسيمات المادية بشكل صحيح والتي تكتب بصورة المؤثرات :

$$\hat{H}\psi(r,t)=\hat{E}\psi(r,t)=E\psi(r,t) \qquad (18)$$

3. <u>معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن:</u>

في كثير من الحالات لانحتاج الزمن في معادلة شرودينجر ،فعند دراسة مستويات الطاقة للإلكترون المرتبط بنواة الذرة فان تلك الطاقة تتحدد ببعد الإلكترون عن النواة ولا تتعلق بالزمن ،وان أمواج الجسيم المادي المرتبط (واقع في بئر جهد) تشكل ما يشبه الأمواج المستقرة والتي تتعلق طاقتها بالموضع فقط.

في هذه الحالة ووفقا لقواعد فصل المتغيرات المستخدمة في حل المعادلات التفاضلية التي تحوي أكثر من متغير(الجزئية) فإننا نستطع كتابة الدالة الموجية كجداء دالتين أحداهما تتعلق بالموضع والأخرى تتعلق بالزمن ، وبالاستفادة من هذه الخاصة نستطع أن نستنتج المعادلة التفاضلية المستقلة عن الزمن كما في المعالجة الرياضية التالية:

- في النظام الآسي يمكن كتابة أي دالة كجداء دالتين بالشكل:

$$e^{y+x}=e^y.e^x=Y(y).X(x) \qquad (19)$$

- بالاستفادة من العلاقة (19) يمكن كتابة الدالة الموجية بالشكل التالي :

$$\psi(r,t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r} - Et)}$$

$$\psi(r,t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r})} . e^{\frac{i}{\hbar}(-Et)} \Rightarrow$$

$$\psi(r) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r})}$$

$$\phi(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(-Et)}$$

$$\psi(r,t) = \psi(r).\phi(t) \qquad (20)$$

- نعوض العلاقة (20) في العلاقة (16) فنجد

$$\psi(r,t) = \psi(r).\phi(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t) + U(r)\psi(r,t) = E\,\psi(r,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r).\phi(t) + U(r)\psi(r).\phi(t) = E\,\psi(r).\phi(t)$$

$$-\phi(t)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + U(r)\psi(r).\phi(t) = E\,\psi(r).\phi(t) \qquad (21)$$

- بالاختزال من الطرفين على الدالة المتعلقة بالزمن $\phi(t)$ في العلاقة(21) ، لان عملية التفاضل لاتخص الزمن بل الموضع نحصل على معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن بالشكل التالي :

$$-\phi(t)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + U(r)\psi(r).\phi(t) = E\,\psi(r).\phi(t) \Rightarrow$$

العلاقة (22) تمثل معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن وسوف نتعامل مع هذه المعادلة في ميكانيكا الكم 1 بالكامل والكثير من المواضيع في ميكانيكا الكم 2.