4. كيف نتعامل مع معادلة شرودينجر ونجهزها للحل؟ (بعض الأوضاع الخاصة):

لكي نحل معادلة شرودينجر لابد من البحث وإيجاد المقادير الفيزيائية التالية:

أ- أول عمل نقوم به هو إيجاد طاقة الوضع **U(r)**، وسنجد من خلال الأمثلة أدناه كيفية إيجادها.

ب- حل المعادلة التفاضلية وإيجاد الدالة الموجية $\psi(r)$ التي تحقق الشروط الحدية (راجع الفيزياء النظرية- المعادلات التفاضلية الجزئية).

ت- ايجاد قيم الطاقة E المتوافقة مع الشروط الحدية.

مثال **1**: معادلة شرودينجر لجسيم حر.

في الجسيم الحر مجموع القوى الخارجية الموثرة علية تساوي الصفر وهذا يعني أن طاقة الوضع تساوي الصفر أي:

$$\sum_i F_i = 0$$

$$U(r) = -\int \sum_i F_i \, dr = 0 \qquad (23)$$

ومنه نكتب ونجهز معادلة شرودينجر للحل كما يلي:

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

$$U(r) = 0 \Rightarrow$$

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

$$\nabla^2\psi(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(r) = 0 \qquad (24)$$

العلاقة (24) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية نحلها وفق قواعد حل المعادلات التفاضلية ونجد من خلالها الدالة الموجية والطاقة بحيث تحقق الشروط الحدية (الشروط المفروضة على الحل والتي يفرضها وضع الجسيم فيما اذا كان حرا او مقيدا).

مثال **2**: معادلة شرودينجر لجزيئة(ذرة) تهتز (تتذبذب) بحركة توافقية على المحور **x**:

كل الجزيئات أو الذرات في المواد تهتز حول وضع التوازن ، وبفرض جزيئة كتلتها m تهتز على المحور x حول وضع توازنها الذي نعتبره مبدأ الإحداثيات ،وللسهولة نفرض أن الحركة اهتزازية توافقية ومن خلال هذا الوضع نستطيع إيجاد مستويات الطاقة التي يمكن ان تتواجد بها الجزيئة باستخدام معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن على المحور x للتبسيط.

أولا نوجد قيمة طاقة الوضع للمذبذب التوافقي على المحور xكما يلي:

$$U(x) = -\int_0^x F.dx = -\int_0^x -kx.dx = k\int_0^x x.dx$$

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 \qquad (25)$$

ثانيا نعوض العلاقة (25) في معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن في حال البعد الواحد x كما يلي:

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

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x) \qquad (26)$$

المعادلة (26) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية والمطلوب حلها لإيجاد الدالة الموجية والطاقة كما ذكرنا أعلاه.

مثال 3 : معادلة شرودينجر لإلكترون ذرة الهيدروجين:

تتألف ذرة الهيدروجين من بروتون حوله إلكترون ومعلوم أن طاقة الوضع للإلكترون حول النواة تعطى من خلال قانون كولوم بالعلاقة التالية :

$$U(r) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (27)$$

حيث r بعد الإلكترون عن النواة مع العلم أننا يجب أن نستخدم الأبعاد الثلاثة r(x.y.z) ، نعوض العلاقة (27) في معادلة شرودينجر كما يلي:

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

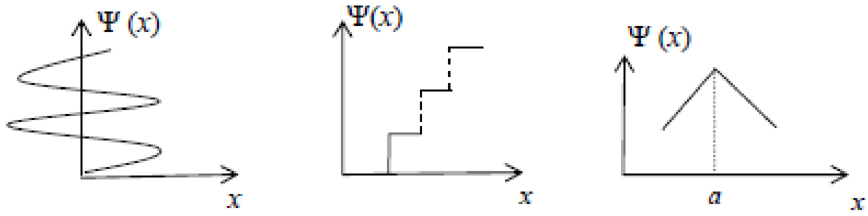
$$U(r) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi(r) = E\psi(r) \qquad (28)$$

المعادلة (28) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية والمطلوب إيجاد الدالة الموجية والطاقة التي تتفق مع الشروط الحدية،والحل ليس سهلا وستجدون صعوبة بالغة التعقيد في الوصول إلى الحل .

امثله محلوله :

مثال: وضح، لماذا لا تحقق الأشكال الآتية شروط ميكانيكا الكم؟



(c) (b) (a)

الحل: الأشكال السابقة لا تحقق شروط ميكانيكا الكم للأسباب التالية:

(a) الميل (المشتقة الأولى) للدالة $\Psi(x)$ غير متصل عند النقطة $x=a$.

(b) الدالة $\Psi(x)$ غير متصلة.

(c) الدالة $\Psi(x)$ متعددة القيم حيث إن لكل قيمة x يوجد عدد لا نهائي من الدوال.

مثال: في المدى المحدد بين قوسين، وضح لماذا لا تحقق الدوال الموجية الآتية شروط ميكانيكا الكم؟

$$(a)\quad \psi_1 = e^{-x} \quad (-\infty, 0),$$
$$(b)\quad \psi_2 = e^{-|x|} \quad (-\infty, \infty),$$
$$(c)\quad \psi_3 = \frac{1}{x-4} \quad (0,5).$$

الحل:

(a) عندما $x \to -\infty$ فإن الدالة $\psi_1 \to \infty$ وتصبح غير محددة.

(b) الميل للدالة ψ_2 غير متصل عند النقطة $x=0$.

(c) عندما $x \to 4$ فإن الدالة $\psi_3 \to \infty$ وتصبح غير محددة.

مثال: لموجة عيارية (مصاحبة لجسيم) معرفة في المدى $(0,L)$ بالعلاقة:

$$\psi(x) = c\sin(bx)$$

حيث $b=\pi/L$، احسب:

أ- ثابت العيارية c،

ب- احتمالية وجود الجسيم في المدى $0 \to 0.5L$،

ت- احتمالية وجود الجسيم في المدى $0.25L \to 0.75L$.

الحل:

أ- ثابت العيارية يحسب من التكامل:

$$I=\int_0^L \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)dx = c^2\int_0^L \sin(bx)\sin(bx)dx$$

$$=c^2\int_0^L \sin^2(bx)dx = \frac{c^2}{2}\underbrace{\left|x-\frac{\sin(2bx)}{(2b)}\right|_0^L}_{=L}$$

$$=\frac{c^2}{2}(L)$$

وباستخدام شرط العيارية " $I=1$ " نجد أن:

$$c^2(\frac{L}{2})=1 \quad\Rightarrow\quad \boxed{c=\sqrt{\frac{2}{L}}}$$

لحساب احتمالية وجود الجسيم في مدى محدد نستخدم التعريف:

$$\text{Prob. }\{a\le x\le b\}=\int_a^b \psi^*_n(x)\,\psi_n(x)dx=\int_a^b \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$=\frac{2}{L}\int_a^b \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx=\left|\frac{x}{L}-\frac{1}{2\pi n}\sin(\frac{2n\pi x}{L})\right|_a^b$$

ب- و في المدى $0\to 0.5L$ ، نحصل على:

$$\text{Prob.}\{0\le x\le L/2\}=\left|\frac{x}{L}-\frac{1}{2\pi n}\sin(\frac{2n\pi x}{L})\right|_0^{L/2}$$

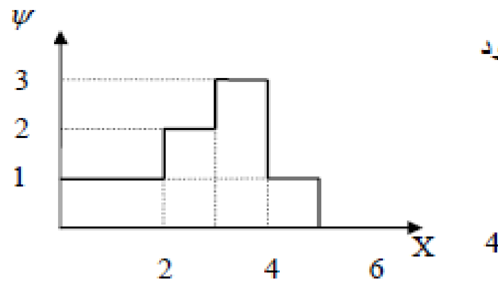
$$=\frac{1}{2} \qquad\qquad (\text{for all } n)$$

ت- و في المدى $0.25L\to 0.75L$ ، نحصل على:

$$\text{Prob. }\{0.25L\le x\le 0.75L\}=\left|\frac{x}{L}-\frac{1}{2\pi}\sin(\frac{2\pi x}{L})\right|_{0.25L}^{0.75L}$$

$$=0.818$$

مثال: للدالة الموجية المرسومة، احسب احتمالية وجود جسيم في المدى $X=\{2,4\}$.



الحل: بحساب احتمالية وجود جسيم في المدى $X=\{2,4\}$:

$$I=\sum_{i=2}^{4}\psi_i^2=9+4=13$$

ومقارنتها احتمالية وجود جسيم في المدى $X=\{0,5\}$:

$$II=\sum_{i=1}^{5}\psi_i^2=1+1+4+9+1=16,$$

نجد أن:

$$\text{Prob.}\ \{2\le X\le 4\}=\frac{I}{II}=\frac{\sum_{i=2}^{4}\psi_i^2}{\sum_{i=0}^{5}\psi_i^2}=\underline{\frac{13}{16}}$$