الفصل الثالث

تطبيقات معادلة شرودنجر

I. دراسة حركة جسيم حر (بمعنى أن $V=0$)

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

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

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

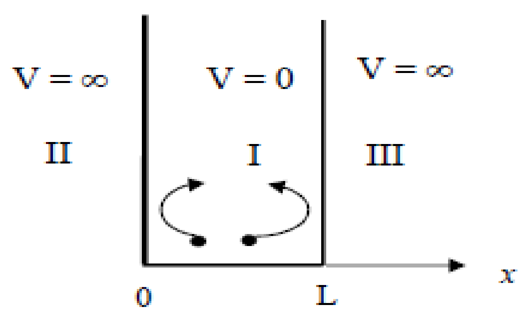
وحلها هو $\psi(x)=A\,e^{\pm ikx/\hbar}$ حيث إن A هو ثابت التكامل و $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$. نلاحظ هنا أن k تأخذ قيماً حقيقية حيث إنها مرتبطة بطاقة الحركة فقط.

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، وبالتالي فإن الإلكترون يتحرك داخل المعدن ولا يتمكن من الهروب منه، إلا بإعطائه طاقة خارجية. ولحل هذه المسألة نلاحظ من شكل (6) أن حركة الجسيم حرة ولكنها مقيدة في المدى $0\le x\le L$ حيث إن الجهد $V=\infty$ خارج هذا المدى هو المسئول عن انعكاس الجسيم من حائل الجهد.



شكل(6) 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 (6) نجد أن الجسيم يتواجد في المنطقة (I) فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر تأخذ الصورة:

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

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 $V=\infty$ بالتالي 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(2) تمثل معادلة حركة توافقية بسيطة وحلها إما:

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

أو

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

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

ثالثاً: اختر أحد الحلول وليكن الحل المعرف بالمعادلة (3).

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 (3) 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 العدد الكمي.

ب– لحساب الثابت A استخدم شرط العيارية كالتالي:

$$\left.\begin{aligned}\because\quad & \int_0^L|\psi_I|^2\,dx=1\\ \therefore\ & A^2\underbrace{\int_0^L\sin^2(k_nx)dx}_{\frac{L}{2}}=1\end{aligned}\right\}\Rightarrow A=\sqrt{2/L} \tag{8}$$

وتصبح الدالة المميزة على الصورة:

$$\psi_I(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x), \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{9}$$

ملاحظات:

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

$$E_n=\frac{p^2}{2m}=\frac{(\hbar k_n)^2}{2m}=n^2\underbrace{\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)}_{E_1}=n^2E_1, \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{10}$$

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

2- القيمة $n=0$ أهملت لأنها تعطى 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 وله طاقة حركة.

3- القيم السالبة تعطى نمطاً متماثلاً للقيم الموجبة.

4- قيم الطاقة تتناسب مع n^2.

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

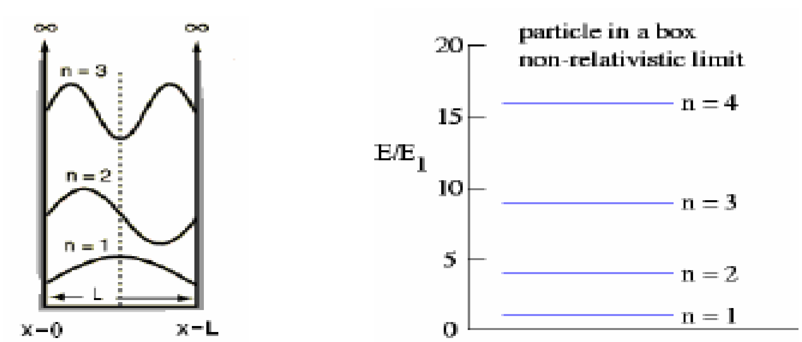
$$\Delta E=E_{n+1}-E_n=(n+1)^2E_1-n^2E_1=(2n+1)E_1$$

(انظر الشكل $7-a$)

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

$$\langle x\rangle=\int_0^L x\,|\psi_I|^2\,dx=\frac{2}{L}\int_0^L x\sin^2(k_nx)dx=\frac{2}{L}\left(\frac{L^2}{4}\right)=\frac{L}{2} \tag{11}$$

ويفسر هذا فيزيائياً بأن كثافة الاحتمال (وأيضاً الدالة) متماثلتان حول مركز الصندوق، أي عند $\frac{L}{2}$. ولهذا فإن احتمالية وجود الجسيم في النصف الأيمن من الصندوق يكون مساوياً لاحتمالية وجوده في النصف الأيسر. (انظر الشكل $7-b$)



(b) (a)

شكل (7) لجهد الشكل (6) a- الطاقات المسموح بها b- الدوال المسموح بها

7- متوسط كمية الحركة الخطية $\langle \hat{p} \rangle$ تحسب كالتالي:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L \psi_I^* \hat{p}\, \psi_I \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin(k_n x)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\sin(k_n x)\right)dx = 0 \qquad \textbf{(12)}$$

ويفسر المعادلة **(12)** فيزيائياً بأن انعدام متوسط كمية الحركة الخطية لا تعني أن الجسيمات لا تتحرك، ولكن تعني أن عدد الجسيمات التي تتحرك للشمال يكون مساوياً لعدد الجسيمات التي تتحرك لليمين. وذلك لأن كمية الحركة الخطية هي كمية متجهة وليست قياسية.