الحالة الثانية $E < V_o$

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم x = 0 لن تتغير، وبالتالي سوف نستخدم المعادلتين (1) و(2). معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من المستقيم x = 0 هي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+V_o\psi_{II}=E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}=\beta^2\psi_{II}, \quad \beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(V_o-E) \tag{8}$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x)=C\,e^{-\beta x}+D\,e^{\beta x} \tag{9}$$

الدالة $e^{\beta x}$ هي دالة موجية تزايدية في المدى $\{0,\infty\}$ بمعنى أن $\lim_{x\to\infty} e^{\beta x}=\infty$ وبالتالي لا تحقق شروط ميكانيكا الكم، لهذا نضع $D=0$. الآن عند الحد x = 0 نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$\because \psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)$$
$$\therefore A+B=C \tag{10}$$

ولمشتقتها:

$$\because \psi'_I(x=0)=\psi'_{II}(x=0)$$
$$\therefore k(A-B)=-\beta C \tag{11}$$

بحل المعادلتين (10) و(11) نحصل على:

$$B=\left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A,$$
$$C=\left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A \tag{12}$$

مثال: استخدم التحويلات القطبية التالية:

$$k=r\cos\delta, \qquad \beta=r\sin\delta,$$
$$r=\sqrt{k^2+\beta^2}, \qquad \delta=\tan^{-1}\left(\frac{\beta}{k}\right)=\sqrt{\frac{V_o-E}{E}} \tag{13}$$

لتبسيط المعادلة (12)

الحل: الثابت B يبسط كالتالي:

$$B=\left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A=\left(\frac{\cos\delta-i\sin\delta}{\cos\delta+i\sin\delta}\right)A$$
$$=\frac{re^{-i\delta}}{re^{i\delta}}A \tag{14}$$
$$=e^{-2i\delta}A$$

الثابت C يبسط كالتالي:

$$C=\left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}-1+1\right)A$$
$$=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}+1\right)A \tag{15}$$
$$=\left(e^{-2i\delta}+1\right)A$$

ولنا هنا بعض الملاحظات:

1- الشعاع الساقط والمنعكس لهما نفس الشدة، بمعنى أن:

$$|B|^2 = B^* B = \left(\frac{k - i\beta}{k + i\beta}\right) \times \left(\frac{k + i\beta}{k - i\beta}\right) |A|^2$$
$$= |A|^2$$

وهذا يعني أن جميع الجسيمات الساقطة بطاقة $E < V_o$ سوف تنعكس كلياً عندما تصل إلى الحائل، ويتساوى معامل الانعكاس بالوحدة (بمعني أن $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$). وبالتالي سوف ينعدم معامل النفاذية، أي أن "$T = 0$".

2- باستخدام المعادلات (13) و(14) يمكننا وضع الدوال الموجية بالصورة:

$$\psi_I(x) = 2Ae^{-i\delta}\cos(kx + \delta), \qquad (16)$$

$$\psi_{II}(x) = \left(2A\cos\delta\, e^{-i\delta}\right) e^{-\beta x} \qquad (17)$$

3- كلاسيكياً تعتبر المنطقة (II) منطقة غير مسموح تواجد الجسيمات بها، وذلك لأن طاقة الحركة $(T = E - V_o)$ سوف تصبح كمية سالبة نظراً لأن $E < V_o$.

4- من المعادلة (17) نستنتج أن:

أ- كثافة التيار في المنطقة (II) منعدمة لأن الدالة حقيقية.

ب- احتمالية وجود الجسيمات في المنطقة (II) تعطى بالمعادلة:

$$P_{II}(x) = |\psi_{II}|^2 = \left(2A\cos\delta\right)^2 e^{-2\beta x} \qquad (15)$$

وهذه تعطي قيماً مقبولة عند $x = 0$ وتقل تدريجيا (أسياً) مع زيادة المسافة. انظر الشكل 2.III.1 b.

5- تنعدم الدالة $\psi_{II}(x)$ تماماً عندما $V_o \to \infty$، وتأخذ الدالة $\psi_I(x)$ بالشكل:

$$\psi_I(x) = A\sin kx$$

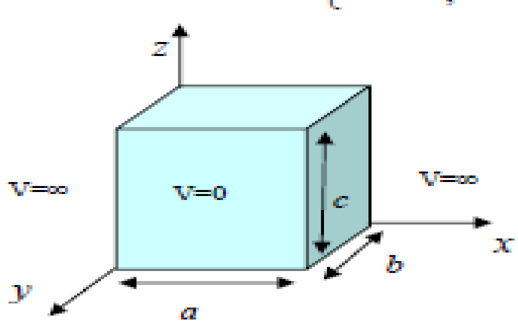
حيث إنها يجب أن تنعدم عندما $x = 0$.

6- باستطاعتنا استنتاج المعادلة (12) مباشرةً وذلك بتغيير $i\alpha \to -\beta$ في المعادلة (7).

IV تطبيق معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد

مثال: ادرس حركة جسيم داخل صندوق مقفل ذى ثلاثة أبعاد في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a,\ 0 < y < b,\ 0 < z < c \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$



شكل2.4 جسيم داخل صندوق (ذى ثلاثة أبعاد) طاقة الوضع (V) متناهية في الكبر إلا داخل الصندوق قيمتها صفر.

الحل: يتواجد الجسيم في المنطقة $(a,b,c) \rangle (x,y,z) \rangle (0,0,0)$ فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد تأخذ الصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \qquad (1)$$

و بذلك ψ سوف تعتمد على الإحداثيات الثلاث (x,y,z). لحل المعادلة (1) نستخدم طريقة فصل المتغيرات، و هي كالتالي:

1- نفترض أن

$$\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z) \qquad (2)$$

2- بالتعويض من (2) في (1) واستخدام $E=E_x+E_y+E_z$، والشروط الحدودية

$$\begin{aligned}\psi(0,y,z)&=\psi(a,y,z) && \text{for all } y,\ \text{and } z\\ \psi(x,0,z)&=\psi(x,b,z) && \text{for all } x,\ \text{and } z\\ \psi(x,y,0)&=\psi(x,y,c) && \text{for all } x,\ \text{and } y\end{aligned} \qquad (3)$$

بالإمكان الحصول على المعادلات التالية:

$$\begin{aligned}\frac{d^2X(x)}{dx^2}+k_x^2X(x)=0, &\quad k_x^2=\frac{2mE_x}{\hbar^2},\\ \frac{d^2Y(y)}{dy^2}+k_y^2Y(y)=0, &\quad k_y^2=\frac{2mE_y}{\hbar^2},\\ \frac{d^2Z(z)}{dz^2}+k_z^2Z(z)=0, &\quad k_z^2=\frac{2mE_z}{\hbar^2}.\end{aligned} \qquad (4)$$

بالتالي فنحن غيرنا من معادلة تفاضلية في ثلاثة متغيرات إلى ثلاث معادلات تفاضلية كل واحدة تعتمد على متغير واحد فقط. كل معادلة مشابهة لمعادلة جسيم في صندوق ذي بعد واحد $(2.II.9)$، ولذلك نحصل على الحلول التالية:

$$\begin{aligned}X(x)&=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin k_x x, \quad k_x=\frac{n_x\pi}{a}, \quad n_x=1,2,\cdots\\ Y(y)&=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin k_y y, \quad k_y=\frac{n_y\pi}{b}, \quad n_y=1,2,\cdots\\ Z(z)&=\sqrt{\frac{2}{c}}\sin k_z Z \quad k_z=\frac{n_z\pi}{c}, \quad n_z=1,2,\cdots\end{aligned} \qquad (5)$$

وأيضاً

$$E=E_x+E_y+E_z=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x{}^2}{a^2}+\frac{n_y{}^2}{b^2}+\frac{n_z{}^2}{c^2}\right) \qquad (6)$$

والدالة المميزة تصبح:

$$\psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{a}z\right), \qquad \begin{aligned}n_x&=1,2,\cdots\\ n_y&=1,2,\cdots\\ n_z&=1,2,\cdots\end{aligned} \qquad (7)$$

تعليقات:

1- من المعادلة (6) نرى أن قيم الطاقة غير متصلة (مكماة).

2- الأعداد (n_x, n_y, n_z) هي أعداد الكم في الاتجاهات الثلاثة. وهذه الأعداد مستقلة، أي لا يعتمد بعضها البعض الآخر.

3- شرط المعايرة يتطلب:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx\,dy\,dz = \int_0^a |X(x)|^2 dx \int_0^b |Y(y)|^2 dy \int_0^c |Z(z)|^2 dz = 1 \qquad (8)$$

4- في حالة المكعب $(a = b = c = L)$ فإن:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\underbrace{\left(n_x{}^2 + n_y{}^2 + n_z{}^2\right)}_{n^2} = n^2 E_1, \qquad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \qquad (9)$$

5- من المعادلة (9) سنعرف درجة الانتماء (أو التحلل) بأنها عدد الدوال التي لها (تنتمي إلى) نفس الطاقة. هذا الانتماء ناتج من تماثل المكعب ويزول تماماً بتغير أطوال الصندوق. والجدول التالي يصف درجات الانتماء الخاصة بالمكعب.

درجة الانتماء	n^2	n_x	n_y	n_z	ψ_{n_x,n_y,n_z}
1	3	1	1	1	$\psi_{1,1,1}$
3	6	1	1	2	$\psi_{1,1,2}$
	6	1	2	1	$\psi_{1,2,1}$
	6	2	1	1	$\psi_{2,1,1}$
3	9	1	2	2	$\psi_{1,2,2}$
	9	2	1	2	$\psi_{2,1,2}$
	9	2	2	1	$\psi_{2,2,1}$
3	11	1	1	3	$\psi_{1,1,3}$
	11	1	3	1	$\psi_{1,3,1}$
	11	3	1	1	$\psi_{3,1,1}$
1	12	2	2	2	$\psi_{2,2,2}$

H.W

س: اوجد حلول معادلة شرودينجر الغير المعتمده على الزمن لمتذبذب توافقي بسيط ؟