معادلة الموجة لشرودنجر: Schrödinger equation

نفترض ان خيطاً يهتز وله تردد مقداره ν . ويصنع موجة متحركة بأتجاه X وبسرعة مقدارها V_x وان ارتفاع الموجة يساوي y . ومن جهة نظر الميكانيك الكلاسيكي نجد ان

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2}\,\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad \ldots\ldots\ldots\,.\,.\ 19$$

حيث t هي الزمن اللازم للموجة للوصول الى النقطة x . وان حل هذه المعادلة يمكن الحصول عليه وكما تمثله المعادلة التالية:

$$y = f_1(x)\, f_2(t) \quad \ldots\ldots\ldots \quad 20$$

حيث $f_1(x)$ هي دالة للمسافة x ، و $f_2(t)$ دالة للزمن فقط كما يلي:

$$f_2(t) = A \sin(2\pi\, \upsilon\, t) \ \ldots\ldots\ldots\,.\,.\,21$$

حيث A تمثل اعلى ارتفاع للموجة، وبتعويض معادلة 21 في معادلة 20 نحصل على:

$$y = f_1(x)\, A \sin(2\pi\nu t) \ \ldots\ldots\ 22$$

فأذا تم تفاضل معادلة 22 مرتين نسبة الى x وبثبوت t نحصل على:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = f_2(t)\, \frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2} \quad \ldots\ldots\,. \quad 23$$

وبتفاضل معادلة 22 مرتين بثبوت x نحصل على:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = -\,4\pi^2\, \nu^2\, f_1(x)\, (A \sin 2\pi\, \nu\, t)$$

$$= -\,4\pi^2\, \nu^2\, f_1(x)\, f_2(t) \quad \ldots\,.\,. \ 24$$

وبتعويض المعادلتين 23 و 24 بالمعادلة 19 نحصل على:

$$\frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2} = -\,\frac{4\pi^2\, \nu^2}{V_x^2}\, f_1(x) \ \ldots\ldots\ldots\ldots\,. \quad 25$$

وبما ان x $\lambda = \frac{V_x}{\nu}$ (الطول الموجي) ، فأن معادلة 25 تصبح بعد التعويض:

$$\frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} f_1(x) \quad \dots\dots\dots\dots .\ 26$$

معادلة 26 تطبق على تحرك الموجة بأتجاه x فقط. فأذا اعتبرنا تحرك الموجة على ثلاث اتجاهات، عندئذ $f_1(x)$ يمكن ان يعوض عنها بـ ψ حيث $\psi = \psi(x, y, z)$ وبالتعويض في معادلة 16 نحصل على:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi \quad \dots\dots\dots .\ 27$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi \quad \dots\dots\dots\dots\dots\ 28$$

حيث ∇^2 (يسمى بعامل ديل او عامل لابلاس) ويمثل:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \dots\dots\dots\dots\ 29$$

وحسب فرضية دي برولي *De Broglie*، أن الموجة التي طولها λ يمكن ان تعتبر كجسيم ذو كتلة m تتحرك بسرعة او حسب العلاقة $\lambda = \frac{h}{m\,v}$ وبالتعويض في معادلة 28 نحصل على:

$$\nabla^2 \psi = -\frac{4\pi^2 m^2 v^2}{h^2} \psi \quad \dots\dots\dots\dots .\ 30$$

وأخيرا فأن الطاقة الكلية للجسيم E ، هي مجموع الطاقة الحركية والطاقة الكامنة:

$$E_k = \frac{1}{2} m\,v^2$$

$$E = E_k + U$$

$$E_k = (E - U) = \frac{1}{2} m\,v^2$$

$$m\,v^2 = 2\,(E - U) \quad \dots\dots\dots .\ 31$$

وبتعويض معادلة 31 بالمعادلة 30 نجد ان:

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U)\,\psi = 0 \dots\dots .\ 32$$

وهذه معادلة الموجة لشرودنجر والتي تطبق في تفسير سلوك المادة من وجهة نظر الميكانيك الكمي.

الجسيم الحر The free particle

نفترض جسيم كتلته m يتحرك بسرعة v وطاقته الكامنة تساوي صفر $U=0$ وبالتعويض في معادلة 32 نحصل على :

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0$$

وبالقسمة على

$$\frac{1}{\psi}\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E = 0 \quad \ldots\ldots\ldots \quad 33$$

وفي محاور نظام كارتيزي فأن الطاقة الكلية للجسيم يمكن اعتبارها على انها تتكون من مركبات E_x, E_y, E_z وحسب المحاور الثلاثة بحيث ان :

$$E = E_x + E_y + E_z \quad \ldots\ldots\ldots \quad 34$$

كما يمكن تطبيق ذلك على دالة الموجة **ψ** حيث

$$\psi = \psi_x \psi_y \psi_z \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad 35$$

وبتعويض المعادلتين 34 و 35 بالمعادلة 33 مع الاخذ ب ∇^2 على أساس المعادلة 29 نحصل على المعادلة التالية:

$$\left(\frac{1}{\psi_x}\frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m E_x}{h^2}\right) + \left(\frac{1}{\psi_y}\frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} + \frac{8\pi^2 m E_y}{h^2}\right) + \left(\frac{1}{\psi_z}\frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m E_z}{h^2}\right) = 0 \quad \ldots\ldots\ldots 36$$

حيث كل حد بين قوسين هو دالة لمتغير واحد فقط. وبما ان كل متغير يمكن ان يتغير بشكل مستقل ، اذن كل حد من هذه الحدود يجب ان يساوي صفر. وبذلك يمكننا الحصول على ثلاثة معادلات تفاضلية ولكل منها متغير خاص يجب حله. ان حل المعادلة 36 يعطينا ثلاثة حلول هي :

$$\psi_x = A_x \sin\left(\frac{2\pi x}{h}\sqrt{2mE_x}\right) \quad \ldots\ldots\ldots \quad 37-a$$

$$\psi_y = A_y \sin\left(\frac{2\pi y}{h}\sqrt{2mE_y}\right) \quad \ldots\ldots\ldots \quad 37-b$$

$$\psi_z = A_z \sin\left(\frac{2\pi z}{h}\sqrt{2mE_z}\right) \quad \ldots\ldots\ldots \quad 37-c$$

حيث ان كل من A_x , A_y , A_z هي ثابت وللوصول الى الظروف المحددة فأنه يجب ان يكون لدينا ظروف محددة *Boundary Conditions* .

$$E_x = \frac{1}{2} m v_x^2 \quad \ldots\ldots\ldots \quad 38-a$$

$$E_y = \frac{1}{2} m v_y^2 \quad \ldots\ldots\ldots \quad 38-b$$

$$E_z = \frac{1}{2} m v_z^2 \quad \ldots\ldots\ldots \quad 38-c$$

حيث ان V_x , V_y , V_z هي مركبات السرعة V على المحاور الثلاثة، وبضرب المعادلات فأن معادلة 38 سوف تقودنا الى ان الطاقة الكلية سوف تساوي :

$$E = \frac{1}{2} m \left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2\right) = \frac{1}{2} m v^2 \quad \ldots\ldots\ldots \quad 39$$

ان المعادلة 39 يحصل عليها عندما الطاقة الكامنة تساوي صفر وعندئذ تصبح الطاقة الكلية تساوي الطاقة الحركية كما جاء في المعادلة.