مسائل احادية البعد (تطبيقات على معادلة شرودنجر)

في هذا الفصل سنبين كيفية استخدام معادلة شرودنجر بشيء من التفصيل وكيفية اجراء حسابات واستخراج نتائج منها تحت الظروف التاليه:

1- الجسيمات تتحرك بسرع بطيئه قياسا لسرعة الضوء لتجنب التاثير النسبي

2- الحركه ببعد واحد والجسيمات تمتلك درجة حرارة واحدة

3- استخدام مفهوم الجهد الخارجي كوسيله لوصف تاثير القوى الخارجيه على الجسيمات مع علمنا اننا نستخدم موجات دي برولي وان طبيعة القوى المؤثره يجب ان تكون على شكل تداخل بين الامواج الا ان هذا يتطلب ادخال نظرية المجال وهذه خارج نطاق دراستنا وستكون دالة الجهد ذات بعد واحد $U(x)$.

عليه فمعادلة شرودنجر

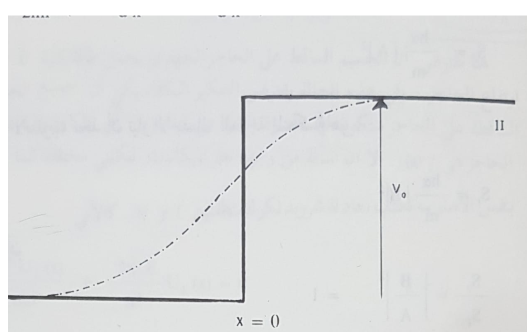
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi(x) = 0 \qquad .... \qquad (1-3)$$

أذ ان $\psi(x)$ هي دالة الموجه التي تمثل حالة جسيم كتلته m يتحرك على المحور x ضمن مجال احادي البعد دالة جهده $U(x)$.

ستكون دراستنا تتضمن نوعين من الجسيمات بعضها حره (ذات طاقه موجبه) والاخرى مقيده تحت تاثير قوى جذب ووتتواجد في مكان محددفي الفضاء.

أ- الجسينات الحره:

المثال الاول:



الشكل(3-1): يمثل دالة جهد من نوع جهد العتبه potential step المتغير فجأة وارتفاعه V_0

اذا كان لدينا دالة الجهد من النوع $U(x)=\begin{cases}0 & x\le 0\\ V_0 & x>0\end{cases}$ وهذه داله تتغير فجأة من صفر الى V_0 في المستوي الفاصل بين منطقتين كما في الشكل اعلاه. لنفرض ان جسيما يسقط على هذا الجهد من اليسار الى اليمين بطاقه كليه موجبه $E > 0$ والتي يمكن تمييز حالتين فيها(الاولى $E < V_0$ والحاله الثانيه $E > V_0$) وسندرس كل حاله على حده.

الحاله الاولى $E < V_0$:

في المنطقه الاولى تكون معادلة شرودنجر

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1(x)=0 \qquad .... \qquad (2\text{-}3)$$

اما في المنطقه الثانيه

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_2(x)=0$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\psi_2(x)=0 \qquad .... \qquad (3\text{-}3)$$

لنفرض ان $\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$ وان $\beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)$ نعوض في المعادلتين اعلاه

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\alpha^2\psi_1(x)=0 \qquad .... \qquad (4\text{-}3)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-\beta^2\psi_2(x)=0 \qquad .... \qquad (5\text{-}3)$$

الحل الرياضي للمعادله (3-4) هو

$$\psi_1(x)=Ae^{i\alpha x}+Be^{-i\alpha x} \qquad (6\text{-}3)$$

الحل الرياضي للمعادله (3-5) هو

$$\psi_2(x)=Ce^{\beta x}+De^{-\beta x} \qquad .... \qquad (7\text{-}3)$$

الثوابت D, C, B, A فيمكن ايجادها من تطبيق الشروط الحدوديه وهي:

1- الداله $\psi(x)$ ذات قيمه محدده ويجب ان تتلاشى في المالانهايه ومن ملاحظة الداله $\psi_1(x)$ نلاحظ انها تحقق الشروط مهما كانت قيمة x بينما الداله $\psi_2(x)$ فان قيمتها تكون مالانهايه اذا كانت $x=\infty$ بسبب الحد $Ce^{\beta x}$ لذلك من اجل تحقيق الشرط اعلاه نضع $C=0$

2- الداله $\psi(x)$ ومشتقتها الاولى مستمره في جميع نقاط الفضاء وعليه عندما تكون $x=0$ ينتج ان $\psi_1(0)=\psi_2(0)$ وكذلك $\frac{d\psi_1(x)}{dx}|_{x=0}=\frac{d\psi_2(x)}{dx}|_{x=0}$ وبتطبق شرطي الاستمراريه نحصل على

$$A+B=D$$
$$i\alpha(A-B)=-\beta D$$

نعوض قيمة D من الاولى في الثانيه نحصل على

$$\frac{A-B}{A+B}=\frac{i\beta}{\alpha}$$

ومنها نجد

$$\frac{B}{A}=\frac{\alpha-i\beta}{\alpha+i\beta}$$

النسبه $\frac{B}{A}$ تمثل نسبة الموجه المنعكسه الى الموجه الساقطه او مايسمى كلاسيكيا معامل الانعكاس

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{\alpha-i\beta}{\alpha+i\beta}\;\frac{\alpha+i\beta}{\alpha-i\beta}=1$$

وتوضح هذه النتيجه ان الموجه لا تمتلك طاقه كافيه لاجتياز الحاجز ولوطبقنا المعادله (2-46) على الموجه الساقطه ($Ae^{i\alpha x}$) والتي تحسب تيار الاحتمال لهذه الموجه نجد ان

$$j(x)=\frac{\hbar}{2mi}\left[(\Psi^*(x)\frac{d\Psi(x)}{dx}-\Psi(x)\frac{d\Psi^*(x)}{dx})\right] \quad .... \quad (8-3)$$

$$j(x)=\frac{\hbar}{2mi}\left(A^*e^{-i\alpha x}\frac{d}{dx}(Ae^{i\alpha x})-Ae^{i\alpha x}\frac{d}{dx}(A^*e^{-i\alpha x})\right)$$

$$j_i(x)=\frac{\hbar\alpha}{m}|A|^2$$

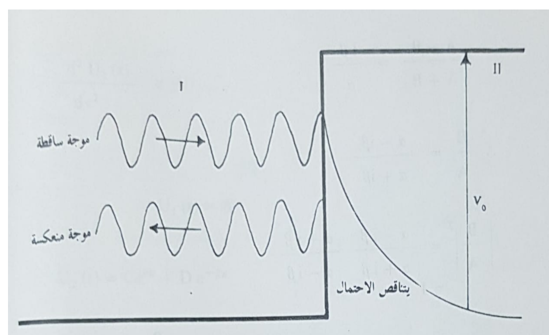
وبنفس الطريقه فان تيار الموجه المنعكسه

$$j_r(x) = \frac{\hbar\alpha}{m}|B|^2$$

ولذلك تكون النسبه بين تيار الموجه الساقطه الى تيار الموجه المنعكسه هو

$$\frac{j_i(x)}{j_r(x)} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1$$

وهذه النتيجه تبين ان تيار الموجه الساقه مساويا الى تيار الموجهالمنعكسه وبالتالي يتفق مع النظريه الكلاسيكيه التى تعني عدم قدرة الموجه علىالنفاذ لعدم امتلاكها طاقه كافيه. كذلك نلاحظ وجود داله على يمين الحاجزوهي $\psi_2(x) = De^{-\beta x}$ ولا تساوي صفرا وهذا معناه وجود احتماليه للجسيم هناوهذا غير موجود كلاسيكياالا ان هذه الاحتماليه سرعان ما تتناقص خلفالحاجز ويتناسب هذا النقصان طرديا مع ارتفاع الحاجز ونقصان طاقة الجسم ايكلما ازداد الفرق$(V_0 - E)$ وهنا يسأل سائل ما سبب ان تيار الاحتمال خلفالحاجز يساوي صفرا بينما كثافة الاحتمالالا تساوي صفرا؟ والجواب ان الجسيمتمثله الحزمه الموجيه بينما الداله هي احد مركبات الحزمه اي ان جزء منالحزمه يخترق الحاجز .



جسيم ساقط على عتبة جهد بطاقه اقل ارتفاع العتبه $E < V_0$

الحاله الثانيه $E > V_0$:

كلاسيكيا ان كل الجسيمات الساقطه على الحاجز لها القدره علىاجتيازه والعبور الى الجانب الثاني بينما كميا سنرى اختلافا فيذلك. وبنفسالاسلوب السابق تكون معادلة شرودنجر

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1(x)=0 \quad .... \quad x\langle 0 \qquad (8\text{-}3)$$

اما في المنطقه الثانيه

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_2(x)=0 \quad .... \quad x\geq 0 \qquad (9\text{-}3)$$

لنفرض ان $\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$ وان $\beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)$ نعوض في المعادلتين اعلاه

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\alpha^2\psi_1(x)=0 \quad .... \quad x\langle 0 \qquad (10\text{-}3)$$

اما في المنطقه الثانيه

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\beta^2\psi_2(x)=0 \quad .... \quad x\geq 0 \qquad (11\text{-}3)$$

وحل المعادلتين (3-10) و (3-11) على التوالي هو

$$\psi_1(x)=Ae^{i\alpha x}+Be^{-i\alpha x} \quad .... \qquad (12\text{-}3)$$

$$\psi_2(x)=Ce^{i\beta x}+De^{-i\beta x} \quad .... \qquad (13\text{-}3)$$

وهنا نستطيع القول ان $D=0$ لان السقوط من اليسار الى اليمين ولا يوجد شيء يجعل الموجه $\psi(x)$ تنعكس .

وبتطبيق شرط الاستمراريه نحصل على العلاقتين (3-12) و (3-13)

$\psi_1(0)=\psi_2(0)$ وكذلك $\frac{d\psi_1(x)}{dx}\Big|_{x=0}=\frac{d\psi_2(x)}{dx}\Big|_{x=0}$ نحصل على

$$A+B=C$$
$$i\alpha(A-B)=-i\beta C$$

ومنها نحصل $\frac{B}{A}=\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}$

وعليه يكون تيار الاحتمال للموجه الساقطه

$$j_i(x)=\frac{\hbar\alpha}{m}|A|^2$$

وبنفس الطريقه فان تيار الموجه المنعكسه

$$j_r(x) = \frac{\hbar\alpha}{m}|B|^2$$

بينما يكون تيار الاحتمال للموجه النافذه

$$j_T(x) = \frac{\hbar\alpha}{m}|C|^2$$

واذا عرفنا معامل الانعكاس بالرمز R فان

$$R = \frac{j_r(x)}{j_i(x)} = \left(\frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta}\right)^2$$

ونعرف معامل النفوذ T

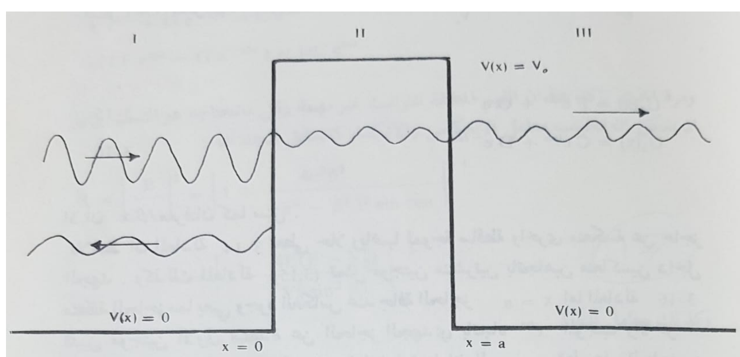
$$T = \frac{j_T(x)}{j_i(x)} = \frac{4\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2}$$

ومنها نحصل على $R + T = 1$

وهي نتيجه منطقيه شبيهه بانكسار الضوء عند مروره في اوساط مختلفه.

المثال الثاني:

وكمثال اخر على الجسيمات الحره هو حركة جسيم عبر عائق جهدمحدود العض وله ارتفاع ثابت اي لا يمتد للمالانهايه وباتجاه المحور x كما في الشكل ادناه:



جسيم ساقط على حاجز جهد محدود العرض وبطاقه $E < V_0$

1- الحاله الاولى $E > V_0$

دالة الجهد المشار اليها بالشكل اعلاه تعطى بالعلاقات التاليه:

$$U(x)=0 \qquad x<0$$
$$U(x)=V_0 \qquad 0\le x\le a$$
$$U(x)=0 \qquad x>a$$

نفرض ان سقوط الجسيم على حاجز الجهدمن اليسار الى اليمين وعليه تكتب معادلة شرودنجر

في تامنطقه الاولى $$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1(x)=0$$

اما في المنطقه الثانيه $$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_2(x)=0$$

وفي المنطقه الثالثه $$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_3(x)=0$$

أذ ان $\psi_3(x),\psi_2(x),\psi_1(x)$ هي الدوال الموجيه التى تصف الجسيم فيالاماكن III, II, I على التوالي ولها الحلول الاتيه:

$$\psi_1(x)=Ae^{i\alpha x}+Be^{-i\alpha x} \qquad .... \qquad (14\text{-}3)$$

$$\psi_2(x)=Fe^{i\beta x}+Ge^{-i\beta x} \qquad .... \qquad (15\text{-}3)$$

$$\psi_3(x)=Ce^{i\alpha x}+De^{-i\alpha x} \qquad .... \qquad (16\text{-}3)$$

أذ ان $\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$ وان $\beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)$ كما تم تعريفها سابقا

وبتطبيق الشروط الحدوديه وشرط الاستمراريه لذلك فان $D=0$ اذلا توجد موجه منعكسه في المنطقه الثالثه، ومن شروط الاستمراريه التي هي

$$\psi_1(0)=\psi_2(0) \quad \text{وكذلك} \quad \frac{d\psi_1(x)}{dx}\Big|_{x=0}=\frac{d\psi_2(x)}{dx}\Big|_{x=0}$$

$$\psi_2(a)=\psi_3(a) \quad \text{وكذلك} \quad \frac{d\psi_2(x)}{dx}\Big|_{x=a}=\frac{d\psi_3(x)}{dx}\Big|_{x=a}$$

نطبق هذه الشروط على المعادلات (3-14)، (3-15) و (3-16) نحصل على

$$A+B=F+G$$
$$i\alpha(A-B)=i\beta(F-G)$$
$$Fe^{i\beta a}+Ge^{-i\beta a}=Ce^{i\varepsilon a}$$
$$i\beta(Fe^{i\beta a}-Ge^{-i\beta a})=i\alpha Ce^{i\alpha a}$$

وهناقيم الثوابت المطلقه غير مهمه اذ نحتاج النسب بينهما فقط وعليهمعامل الانعكاس

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left|1+\frac{4\alpha^2\beta^2}{(\alpha^2-\beta^2)^2\sin^2(\alpha a)}\right|^{-1}$$

$$R=\left|1+\frac{4E(E-V_0)}{V_0^2\sin^2(\beta a)}\right|^{-1} \qquad .... \qquad (17\text{-}3)$$

وكذلك معامل النفاذ

$$T=\left|\frac{C}{A}\right|^2=\left|1+\frac{(\alpha^2-\beta^2)\sin^2(\beta a)}{4\alpha^2\beta^2}\right|^{-1}$$

$$T=\left|1+\frac{V_0^2\sin^2(\beta a)}{4E(E-V_0)}\right|^{-1} \qquad .... \qquad (\ 18\text{-}3\ )$$

ويمكن البرهنه بسهوله أن $R+T=1$

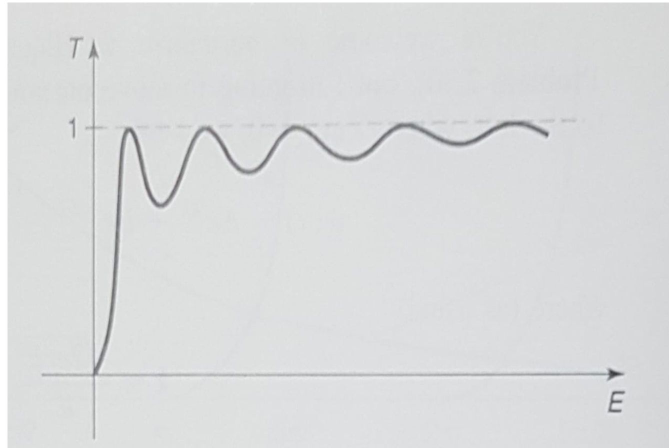
يمكن ان نقول أن T يقترب من قيمه ثابته اذا كانت طاقة الجسيم قريبهمن ارتفاع الحاجز بما ان

$$\beta=\frac{2m}{\hbar}\sqrt{E-V_0} \quad \text{عليه} \quad \beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)$$

βa صغيره عندما $E\Rightarrow V_0$ وعليه $\sin(\beta a)=\beta a$ وعلى هذا الاساس فانمعامل النفاذ

$$T=\left(1+\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1}$$ وهي كميه ثابته.

نلاحظ ايضا انه عندما $\beta a=n\pi$ فان $\sin(\beta a)=0$ وبالتالي $T=1$ ($n=1,2,3,.....$)
والشكل التالي يوضح معامل النفاذ كداله الى الطاقه E .



معامل النفاذ كداله للطاقه (المعادله (3-18))