الباب الثاني

معادلة شرودنجر الموجية وتطبيقاتها

Applications of the Schrödinger’s Wave Equation

الصفحة

من دراستنا بالباب الأول عرفنا أن قوانين نيوتن وصفت مسار وحركة الجسم التقليدي، ومعادلات ماكسويل وصفت حركة الموجات التقليدية الكهرومغناطيسية. والآن نحن نحتاج إلى وصفة رياضية تأخذ في الاعتبار الصفة الازدواجية للمادة. هذه الوصفة الرياضية يجب أن تأخذ في الاعتبار وصف الدالة الموجية ψ كما عرفناها بالباب الأول.

في هذا الباب سنتناول الوصفة الرياضية والتي قدمها شرودنجر (1926) وسميت *الميكانيكا الموجية* أو *ميكانيكا الكم* مع تطبيقاتها البسيطة. وهناك وصفة أخرى سميت بطريقة المصفوفات الميكانيكية وبدأها هيزنبرج وبورن في نفس العام وسوف نتناولها في باب آخر. وبالطبع فنحن هنا سوف نتعامل مع النظام المجهري فقط. وتبعا للنظام الفيزيائي المجهري يوجد هناك كميات (قيم) فيزيائية وهي القيم التي يمكن قياسها أو حسابها مثل طاقة الحركة T، طاقة الوضع V أو الطاقة الكلية E ...إلخ.

1- فروض ميكانيكا الكم

تُبنى ميكانيكا الكم علي ثلاثة فروض أساسية وهي:

الفرض الأول: "*أي نظام فيزيائي يوصف بدالة موجيه* ψ".

هذه الدالة كما عرفناها من قبل على أنها افتراضية (حقيقية أو مركبة) ولا يمكن قياسها عملياً ولكنها تعتبر كمقياس. المقدار $|\psi(r,t)|^2$ يعطينا كثافة الاحتمال وتمثل احتمال تواجد الجسيم عند الوضع "r" عند اللحظة "t" وهنا يظهر سؤال: ما هي الشروط الواجب توفرها في الدالة ψ؟ والجواب هو: إذا عرفت الدالة ψ في مدى محدد، مثلاً بين الإحداثيات (a,b)، فإن الدالة يجب أن تكون:

أ- وحيدة القيمة (Single valued)

ب- محددة (Finite and bounded)

ت- (وأيضا مشتقتها الأولى) متصلة ومستمرة (Continous everywhere).

أي وصف أو شرط أخر يعتبر مكملاً (ليس ضرورياً) للشروط السابقة. مثلاً، تعتبر الدالة متعامدة أو معيرة إذا حققت الشرط:

$$\int_{\text{all space}} \psi_m^*(r)\,\psi_n(r)\,d\tau=\delta_{mn},\quad \delta_{mn}=\begin{cases}1 & \text{if } m=n\\ 0 & \text{if } m\neq n\end{cases} \tag{1}$$

حيث إن الدالة ψ^* هي المرافق المركب للدالة ψ والدالة δ_{ij} تعرف بكرونكر دلتا. حيث إن $\delta_{ij}=1$ هو شرط المعايرة و $\delta_{ij}=0$ هو شرط التعامد.

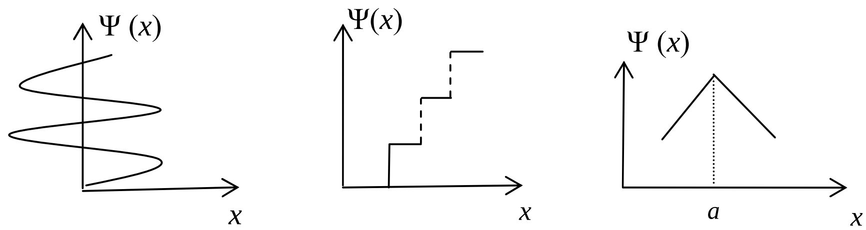
إذا كانت الدالة معيرة فإن الصيغة التالية:

$$\text{Prob.}\ \{a\le x\le b\}=\int_a^b \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)\,dx$$

$$=\int_a^b |\psi_n(x)|^2 dx$$

تعطي احتمالية وجود الجسيم في المدى المحدد $(a,b) \equiv \{a \le x \le b\}$.

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:

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

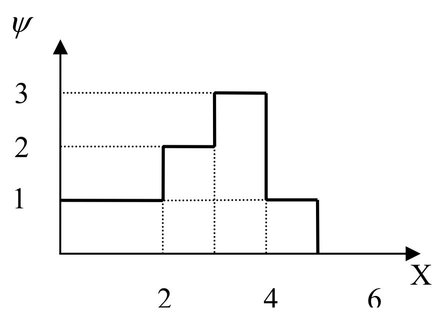
$$= \frac{1}{2} \qquad \text{(for all } n\text{)}$$

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:

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

الفرض الثانى: "***يوجد مؤثر (Operator) لكل كمية فيزيائية يمكن قياسها***".

والمؤثر يمكن أن يكون عملية جمع (+) أو طرح (−) أو تفاضل.... لتعريف المؤثر سوف نضع أعلاه الإشارة "^". واختيار المؤثر يفضل أن يحقق معادلة القيمة المميزة وهي بالصورة:

$$\overbrace{\hat{A}}^{\text{operator}} \quad \overbrace{\varphi}^{\text{eigenfunction}} = \underbrace{a}_{\text{eigenvalue}} \quad \overbrace{\varphi}^{\text{eigenfunction}} \qquad (2)$$

حيث إن الدالة φ هي الدالة المميزة (Eigenfunction) (ويجب أن تظهر بكلا الطرفين) و a هي القيمة المميزة (Eigenvalue). وتُعرف الدالة المميزة بأنها الدالة التي تحقق معادلة القيم المميزة، ولا يوجد عليها أي شروط أخرى إلا إذا استخدمت لوصف النظام الفيزيائي، فيجب أن ينطبق عليها الشروط الثلاثة السابقة.

بالنسبة للمؤثر يفضل (وليس شرطاً ضرورياً) أن يكون له خصائص خطية، بمعنى:

$$\begin{aligned} \hat{A}\left[f(x)+g(x)\right] &= \hat{A}f(x)+\hat{A}g(x), \\ \hat{A}\left[kf(x)\right] &= k\hat{A}f(x) \end{aligned} \qquad (3)$$

حيث k مقدار ثابت و $g(x)$ و $f(x)$ هما دالتان اختياريتان.

الجدول التالي يحتوي على بعض الكميات الفيزيائية والمؤثرات المناظرة لها في ميكانيكا الكم.

الكمية الفيزيائية	رمزها	المؤثر المناظر
إحداثي الموضع	x	$\hat{x}=x$

$\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$	p_x	مركبة كمية الحركة الخطية
$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$	$\boldsymbol{p}$	كمية الحركة الخطية
$\hat{K} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$	$K = p^2/2m$	طاقة الحركة
$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$	$\boldsymbol{L}$	كمية الحركة المدارية
$\hat{V} = V$	V	طاقة الوضع
$\hat{E} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$	E	الطاقة الكلية

مثال: هل المؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ والدالة $\sin(ax)$ يكونان معادلة قيم مميزة؟

الحل: باستخدام المؤثر التفاضلي $\frac{d^2}{dx^2}$ على الدالة $\sin(ax)$ نجد أن:

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[\sin(ax)\right] = -a^2\left[\sin(ax)\right]$$

ومنها نستنتج أن المؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ والدالة $\sin(ax)$ يكونان معادلة قيم مميزة، والقيمة المميزة لها هي $-a^2$.

مثال: أي من المؤثرات الآتية تعتبر مؤثرات خطية؟

$$(a)\ \sqrt{()} \qquad (b)\ \sin() \qquad (c)\ e^{()} \qquad (d)\ \frac{d}{dx}()$$

الحل:

$$(a)\ \sqrt{(\psi_1+\psi_2)} \neq \sqrt{(\psi_1)} + \sqrt{(\psi_2)}$$
$$(b)\ \sin(\psi_1+\psi_2) \neq \sin(\psi_1) + \sin(\psi_2)$$
$$(c)\ e^{(\psi_1+\psi_2)} \neq e^{(\psi_1)} + e^{(\psi_2)}$$
$$(d)\ \frac{d}{dx}(\psi_1+\psi_2) = \frac{d}{dx}(\psi_1) + \frac{d}{dx}(\psi_2)$$

إذاً المؤثر (d) هو المؤثر الخطي الوحيد في هذه المجموعة.

مثال: احسب الدالة المميزة للمؤثر $\hat{A} = \frac{d}{dx} - 2x$

الحل: بحل المعادلة المميزة $\hat{A}\psi = a\psi$ نجد أن:

$$\left(\frac{d}{dx} - 2x\right)\psi = a\psi$$

وتختصر إلى الصورة

$$\frac{d}{dx}\psi = (a + 2x)\psi$$

وبإجراء التكامل ينتج:

$$\int \frac{d\psi}{\psi} = \int (a + 2x)dx$$

$$\Rightarrow \qquad \boxed{\psi = c\, e^{ax + x^2}}$$

حيث c هو ثابت التكامل.

مثال: احسب التعبير النهائي للمؤثر $\hat{D}x \equiv \frac{d}{dx}x$

الحل: بالتأثير على دالة اختيارية ψ بالمؤثر $\frac{d}{dx}x$ نجد:

$$\left(\frac{d}{dx}x\right)\psi = \frac{d}{dx}(x\psi) = x\frac{d\psi}{dx} + \psi\frac{dx}{dx} = \left(x\frac{d}{dx} + 1\right)\psi$$

وهذا يعنى أن

$$\boxed{\left(\hat{D}x\right) \equiv \left(x\hat{D} + 1\right)}$$

مثال: احسب التعبير النهائي للمؤثر $(\hat{D} + \hat{x})^2$، حيث $\hat{D} = \frac{d}{dx}$.

الحل:

$$(\hat{D} + \hat{x})^2 = (\hat{D} + \hat{x})(\hat{D} + \hat{x})$$
$$= \hat{D}^2 + \hat{x}\hat{D} + \underbrace{\hat{D}\hat{x}}_{\hat{x}\hat{D}+1} + \hat{x}^2 = \hat{D}^2 + \hat{x}\hat{D} + \hat{x}\hat{D} + 1 + \hat{x}^2$$
$$= \underline{\hat{D}^2 + 2\hat{x}\hat{D} + \hat{x}^2 + 1}$$

هذا وقد استخدمنا نتيجة المثال السابق.

الفرض الثالث: "*القيمة المتوقعة (المتوسطة) للقيم الفيزيائية التي يمكن قياسها تعرف بالمعادلة:*

$$\overline{\hat{A}} \equiv \left\langle \hat{A} \right\rangle = \frac{\int \psi^* \hat{A}\, \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \qquad (4)$$

وتلعب القيمة المتوسطة دوراً رئيسياً في ميكانيكا الكم حيث إننا نتعامل مع أعداد لا نهائية من الجسيمات ولا نستطيع التعامل مع كل جسيم على حدة.

مثال: احسب قيمة الطاقة المتوسطة للدالة:

$$|\psi>=\underbrace{\sqrt{\frac{1}{19}}}_{a_1}|\varphi_1>+\underbrace{\sqrt{\frac{4}{19}}}_{a_2}|\varphi_2>+\underbrace{\sqrt{\frac{2}{19}}}_{a_3}|\varphi_3>+\underbrace{\sqrt{\frac{3}{19}}}_{a_4}|\varphi_4>+\underbrace{\sqrt{\frac{5}{19}}}_{a_5}|\varphi_5>$$

مع اعتبار أن:

$$H|\varphi_n\rangle=E_n|\varphi_n\rangle, \qquad E_n=n\varepsilon_o$$

$$\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle=\delta_{mn}$$

الحل: بفرض أن معاملات المركبات φ_n هي a_n، فيجب أن نتأكد أولاً من عيارية الدالة كالتالي:

$$<\psi|\psi>=\sum a_n^2<\varphi_n|\varphi_n>=\sum a_n^2=\frac{1}{19}+\frac{4}{19}+\frac{2}{19}+\frac{3}{19}+\frac{5}{19}=\frac{15}{19}$$

حيث إن المجموع لا يتساوى بالواحد لذلك فإن الدالة غير عيارية.

ثانيا: احسب احتمال تواجد الجسيم في كل مستوى على حدة باستخدام الصورة:

$$P_i=\frac{<\varphi_i|\psi>}{<\psi|\psi>}$$

لتعطينا الآتي:

$$P_1=\frac{|a_1|^2}{15/19}=\frac{1/19}{15/19}=\frac{1}{15},\quad P_2=\frac{4}{15},\quad P_3=\frac{2}{15},\quad P_4=\frac{3}{15},\quad P_5=\frac{5}{15}.$$

ثالثا: قيمة الطاقة المتوسطة تحسب كالآتي:

$$<E>=\sum_n P_nE_n=\frac{1}{15}(\varepsilon_o)+\frac{4}{15}(2\varepsilon_o)+\frac{2}{15}(3\varepsilon_o)+\frac{3}{15}(4\varepsilon_o)+\frac{5}{15}(5\varepsilon_o)=\frac{52}{15}\varepsilon_o.$$

وبطريقة أخرى:

$$\bar{E}=\frac{<\psi|H|\psi>}{<\psi|\psi>}=\frac{\sum a_n^2<\varphi_n|H|\varphi_n>}{15/19}=\frac{19}{15}\left(\frac{1}{19}+\frac{8}{19}+\frac{6}{19}+\frac{12}{19}+\frac{25}{19}\right)\varepsilon_o=\frac{52}{15}\varepsilon_o$$

2.2 معادلة شرودنجر في بعد واحد

علمنا من الفرضية الثانية لميكانيكا الكم أن لكل كمية فيزيائية يمكن قياسها، كطاقة الحركة T والطاقة الكلية E، يكون هناك مؤثراً، وحتى الآن لم نعرف كيفية حساب هذا المؤثر. ولحساب المؤثرات نتبع الخطوات التالية (للسهولة سنأخذ الحركة في اتجاه واحد فقط وهو اتجاه x):

1- نبدأ بمعادلة الموجة المستوية المصاحبة للجسيم الحر على الصورة:

$$\psi = e^{i(kx-wt)} = e^{i(p_x x - Et)/\hbar} = e^{ip_x x/\hbar} e^{-iEt/\hbar} = f(x) f(t) \qquad (1)$$

حيث طاقة الجسيم هي $E = \hbar\omega$ و $p_x = \hbar k$ هي كمية حركته الخطية.

2- للحصول على المؤثر $\hat{E}$، نفاضل المعادلة (1) بالنسبة للزمن، فنحصل على:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\psi \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi \qquad (2)$$

وهي معادلة مميزة على الصورة $\hat{E}\psi = E\psi$ ولذلك فإن:

$$\boxed{\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \qquad (3)$$

3- للحصول على المؤثر $\hat{p}_x$، فإننا نفاضل المعادلة (1) بالنسبة إلى x لنجد:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar} p\, e^{i(p_x x - Et)/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar} p_x \psi \\ \Rightarrow \qquad & \boxed{\hat{p}_x \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi} \end{aligned} \qquad (4)$$

حيث حصلنا على معادلة مميزة على الصورة $\hat{p}_x \psi = p_x \psi$، وتعطينا المؤثر $\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$

ومنها نجد $\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

4- نقارن الآن بين ميكانيكا الكم والميكانيكا التقليدية حيث إن:

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (5)$$

وتصبح معادلة شرودنجر في الشكل العام هي $\hat{H}\psi = \hat{E}\psi$ حيث $\hat{H}$ يدعى هاميلتونيان (مؤثر هاميلتوني)

$$\boxed{\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}\right)}, \qquad \boxed{\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \qquad (6)$$

3- معادلة شرودنجر المستقرة (غير الزمنية)

بدءاً بمعادلة شرودنجر التفاضلية:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{V}\right)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \qquad \textbf{(1)}$$

نجد أنها تعتمد على الزمن ونحن في دراستنا هذه نبحث عن دوال وقيم مميزة مستقرة (أي أنهن لا يعتمدن على الزمن). لهذا سوف نحاول فصل معادلات الزمن عن معادلات المكان باستخدام إحدى الطرق وهي طريقة فصل المتغيرات، والطريقة كالتالي:

1- نفترض انفصال الدالة $\Psi(x,t)$ إلى:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\psi(t) \qquad \textbf{(2)}$$

حيث $\psi(t)$ هي دالة تعتمد على الزمن و $\psi(x)$ هي دالة تعتمد على المكان.

2- فاضل الدالة (2) مرة بالنسبة للزمن ومرتين بالنسبة للمكان، فنحصل على:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\psi(x)\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} \qquad \textbf{(3a)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=\psi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} \qquad \textbf{(3b)}$$

3- بالتعويض من المعادلتين (3a) و(3b) في المعادلة (1) والقسمة على $\psi(x)\,\psi(t)$ نجد:

$$\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\hat{V}\right\}=\frac{1}{\psi(t)}\left\{i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\right\} \qquad \textbf{(4)}$$

4- في المعادلة (4) نجد أن الطرف الأيسر يعتمد على المتغير "x" بينما الطرف الأيمن يعتمد على المتغير "t" فقط. من نظريات المعادلات التفاضلية تعلمنا أن ذلك ممكن فقط في حالة كون كل طرف يساوى كمية ثابتة، سوف نفترضها "c"، ولهذا

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}=c\psi(t) \qquad \textbf{(5a)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\hat{V}\psi(x)=c\psi(x) \qquad \textbf{(5b)}$$

5- تكامل المعادلة (5a) يعطى الدالة الزمنية

$$\psi(t)=e^{-ict/\hbar} \qquad \textbf{(16)}$$

بافتراض أن ثابت التكامل هو الوحدة وذلك للسهولة.

6- لحساب الثابت c نقارن المعادلتين (6) و(5) فنجد أن الثابت c ما هو إلا الطاقة الكلية E للجسيم ونحن نعلم أنها كمية محفوظة (ثابتة).

7- أخيراً نحصل على معادلة شرودنجر التي لا تعتمد على الزمن وهي:

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

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(x)\right]\psi(x)=0 \qquad \textbf{(2.17)}$$

وهي تمثل حركة جسيم يتحرك بطاقة كلية E وطاقة وضع (طاقة كامنة) V وهم لا يعتمدون على الزمن ولذلك يقال عنها بأنها تمثل حالة مستقرة.

4- كثافة التيار

معادلة شرودنجر للدالة الموجية ψ والمرافق المركب لها ψ^* تكتبان بالصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad \textbf{(1)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*=-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \qquad \textbf{(2)}$$

بضرب المعادلة (1) من اليسار بالدالة ψ^*، والمعادلة (2) من اليسار بالدالة ψ، ثم بالطرح ينتج:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right)=i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) \qquad \textbf{(3)}$$

إذا أخذنا في الاعتبار المعادلتين التاليتين:

$$\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right)=\nabla.\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right) \qquad \textbf{(4)}$$

$$\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right) \qquad \textbf{(5)}$$

واعتمدنا الرمزين التاليين:

كثافة التيار:

$$\boxed{\boldsymbol{J}=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)},$$

والكثافة الاحتمالية:

$$\boxed{\rho=\psi^*\psi},$$

فإن المعادلة (3) تأخذ الصورة

$$\nabla\cdot\boldsymbol{J}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \qquad \textbf{(6)}$$

وهي تشبه معادلة الاستمرارية (الاتصال) في ديناميكا الموائع والتي تعبر هنا عن قانون حفظ الشحنة.

مثال: احسب كثافة التيار للدالة $\psi(x)=A\,e^{ikx}$ حيث A ثابت.

الحل:

$$J = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right) = \frac{\hbar}{m} I_m\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$
$$= \frac{\hbar}{m} I_m\left(A^* e^{-ikx}\frac{\partial}{\partial x}A e^{ikx}\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = v\,|A|^2$$

واجب منزلي:للدالة $\psi(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}$ **حيث** A, B **ثوابت، اثبت أن كثافة التيار هي** $J = v\left(|A|^2 - |B|^2\right)$**.**

5- تطبيقات معادلة شرودنجر في بعد واحد

5.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 قيما حقيقية حيث إنها مرتبطة بطاقة الحركة فقط.

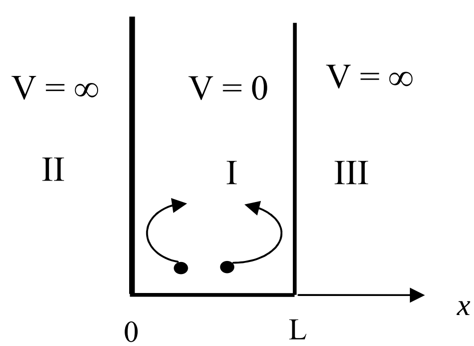
وكمثال توضيحي دعونا نسترجع المسألة الرئيسية في ميكانيكا الكم ألا وهي دراسة حركة جسيم داخل صندوق مغلق تماماً.

5.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 التالى:

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:

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= E\,\psi_I \\ \Rightarrow\quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= -k^2\psi_I\,, \end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

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:

$$\psi_I(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx) \qquad (3)$$

أو

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

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:

$$\psi_I(0)=0 \qquad (5)$$

يتيح لنا التخلص من الثابت B وتؤول المعادلة (3) إلى الدالة المميزة:

$$\psi_I(x)=A\sin(kx) \qquad (6)$$

خامساً: نبدأ في حساب الثوابت A,k

أ- لحساب الثابت k استخدم الشرط الحدي $\psi_I(x=L)=0$، بمعنى:

$$\left.\begin{aligned} \because\quad \psi_I(x=L)&=0 \\ \therefore\quad A\sin(kL)&=0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow k_n=\frac{n\pi}{L}, \qquad n=1,2,3,\cdots \qquad (7)$$

حيث n يعرف بأنه العدد الكمي.

ب- لحساب الثابت A استخدم شرط العيارية كالتالي:

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

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:**

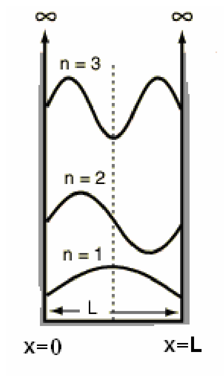
$$\Delta E=E_{n+1}-E_n=(n+1)^2E_1-n^2E_1=(2n+1)E_1$$

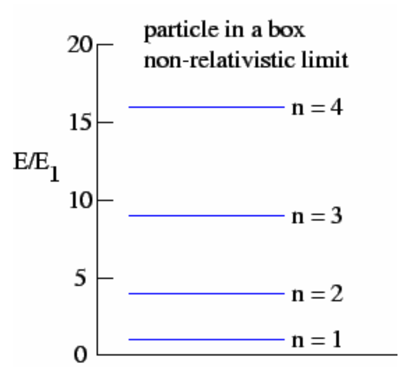
(انظر الشكل $7\!-\!a$**)**

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** $7-b$ **)**





(a)

(b)

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.

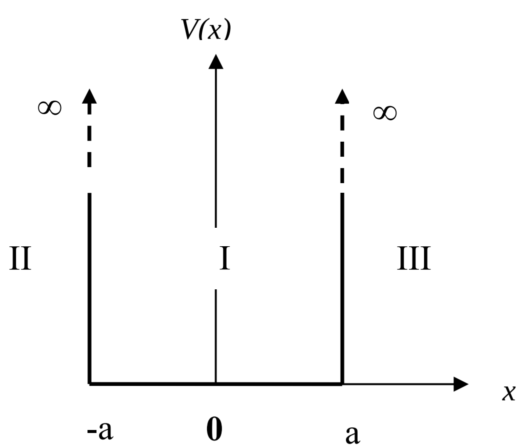
مثال: **ادرس حركة جسيم في مجال جهد متماثل كما بالشكل ويوصف بالتالي:**

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| > a \end{cases}$$

وأثبت أن

$$\psi_I(x) = \begin{cases} A\sin(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is even} \\ \\ B\cos(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is odd} \end{cases}$$

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \quad A = B = \sqrt{\frac{1}{a}}$$



الحل:

نتيجة لقيم الجهد اللانهائية خارج المنطقة (I)**، لذلك ينعدم تواجد الجسيم بالمنطقتين** (II)**،** (III)**.**
بالمنطقة (I) **نجد أن معادلة شرودنجر غير الزمنية تأخذ الشكل:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2}=E\psi_I$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2}=-k^2\psi_I, \qquad (1)$$

حيث $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$**. الحل العام للمعادلة (**1**) هو:**

$$\psi_I(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx) \qquad (2)$$

حيث A **و** B **ثوابت تعين من خلال الشروط الفيزيائية. من شروط انعدام الدالة عند الحدود** (a) **و** $(-a)$
نجد أن:

$$\psi_I(a)=0 \quad \Rightarrow \quad A\cos(ka)+B\sin(ka)=0, \qquad (3)$$

$$\psi_I(-a)=0 \quad \Rightarrow \quad A\cos(ka)-B\sin(ka)=0 \qquad (4)$$

بجمع المعادلتين (3) و (4) ينتج أن:

$$2A\cos(ka)=0$$
$$\Rightarrow \quad A=0 \text{ or } \cos(ka)=0 \qquad (5)$$

بطرح المعادلتين (3) و (4) ينتج أن:

$$2B\sin(ka)=0$$
$$\Rightarrow \quad B=0 \text{ or } \sin(ka)=0 \qquad (6)$$

ونحن هنا لا نبغي أن نساوي الثوابت A **و** B **بالصفر، حيث أننا سنحصل على دالة** $\psi_I(x)$ **غير ذات فائدة فيزيائياً. وأيضاً نحن لا نود وضع الدوال** $\sin(ka)$ **و** $\cos(ka)$ **مساوية للصفر لبعض قيم** k **و** E**. ولهذا نجد أنه يوجد نوعان من الحلول وهما:**

$$A=0 \quad B\neq 0 \quad \Rightarrow \quad \sin(ka)=0, \qquad \text{(i)}$$
$$B=0 \quad A\neq 0 \quad \Rightarrow \quad \cos(ka)=0 \qquad \text{(ii)}$$

في النوع الأول نجد أن:

$$\sin(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\pi,2\pi,3\pi,\cdots=n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح زوجي. في النوع الثاني نجد أن:

$$\cos(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\frac{\pi}{2},3\frac{\pi}{2},5\frac{\pi}{2},\cdots=n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح فردي.

ومنه نصل إلى الخلاصة أن:

$$\psi_I(x)=\begin{cases} A\sin(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is even} \\ \\ B\cos(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is odd} \end{cases}$$

$$k_n^2=\frac{2mE_n}{\hbar^2}, \qquad \Rightarrow \qquad E_n=\frac{k_n^2\hbar^2}{2m}=n^2\underbrace{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}_{E_1}=n^2E_1$$

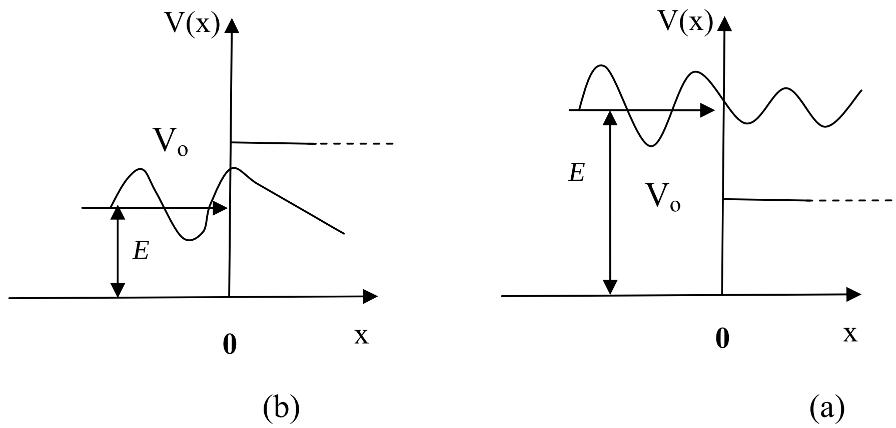
$$A=B=\sqrt{\frac{1}{a}}$$

5.III - الجهد الدرجي

دراسة حزمة متجانسة من الإلكترونات تتحرك في اتجاه حاجز جهد على الصورة:

$$V(x)=\begin{cases} 0, & x<0 \\ V_o, & x\geq 0 \end{cases}$$

في كلتا الحالتين وهما أن تكون طاقة الجسيم الكلية E أكبر من V_o أو أصغر من V_o حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد (انظر الشكل 2.III.1). ومنها سنوجد معادلات ا- التيار الساقط ب- التيار المنعكس ت - التيار النافذ ح- معامل الانعكاس د- معامل النفاذية.



شكل 2.III.1 (a) الحالة الأولى $E > V_o$ (b) الحالة الثانية $E < V_o$

النظرية الكلاسيكية: **قبل أن نبدأ في حل المسألة من وجهة نظر ميكانيكا الكم، دعونا نستعرض مثالاً بسيطاً من الحياة لنتصور الحل الكلاسيكي. نحن في شبابنا وصحتنا لا تعيرنا اهتماما، ولا توقفنا، ارتفاع درجات السلالم، سنرمز لها بالرمز V_o، لأن طاقاتنا، سنرمز لها بالرمز E ، أعلى كثيراً، بمعنى أن $E > V_o$. ولكن عند الكبر، مرحلة الوهن، نفكر كثيراً في ارتفاع درجات السلالم، وغالباً ما نرجع وذلك لأن طاقاتنا أصبحت أقل كثيراً من ارتفاع درجات السلالم، بمعنى أن $E < V_o$. الآن النظرة سوف تختلف تماما من وجهة نظر ميكانيكا الكم وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات.**

الحالة الأولى $E > V_o$ مرحلة الشباب

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم $x = 0$ تعرف:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (1)$$

والحل العام لها هو:

$$\psi_I(x) = A \underbrace{e^{ikx}}_{\text{Incident wave}} + B \underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \qquad (2)$$

الدالة e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني وتسمى دالة ساقطة (Incident wave)**، e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني وتسمى**

دالة منعكسة (Reflected wave) . A هي سعة الموجة الساقطة و B هي سعة الموجة المنعكسة من حائط الجهد.

معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من الحائل ($x = 0$) تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+V_o\psi_{II}=E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}=-\alpha^2\psi_{II}, \quad \alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_o) \qquad (3)$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x)=C\ e^{i\alpha x}+D\ e^{-i\alpha x} \qquad (4)$$

$e^{i\alpha x}$ هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني وتسمى موجة نافذة (Transmitted wave) وحيث إنه لا يوجد حائط جهد في المنطقة اليمنى لكي ترتد منه الأشعة، فلهذا نضع $D = 0$. والآن عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$\because\ \psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)$$
$$\therefore\quad A+B=C \qquad (5)$$

ولمشتقتها:

$$\because\ \psi'_I(x=0)=\psi'_{II}(x=0)$$
$$\therefore\ ik(A-B)=i\alpha C \qquad (6)$$

حل المعادلتين (5) و(6) يعطي:

$$B=\left(\frac{k-\alpha}{k+\alpha}\right)A, \qquad C=\left(\frac{2k}{k+\alpha}\right)A \qquad (7)$$

بالإمكان تعريف:

كثافة التيار الساقط = $v_1|A|^2=\frac{q}{m}|A|^2$ ،

وكثافة التيار المنعكس = $v_1|B|^2=\frac{q}{m}|B|^2$ ،

وكثافة التيار النافذ = $v_2|C|^2=\frac{\alpha}{m}|C|^2$

حيث $v_i=\hbar k_i/m$. وبالتالي فإن:

معامل الانعكاس (R) =	كثافة التيار المنعكس / كثافة التيار الساقط	$=\left(\frac{k-\alpha}{k+\alpha}\right)^2$

$\frac{4k\alpha}{(k+\alpha)^2} =$	كثافة التيار النافذ / كثافة التيار الساقط	معامل النفاذية (T) =

1- من العلاقتين السابقتين نجد أن $T+R=1$ وهو قانون حفظ الجسيمات.
2- الفيزياء التقليدية تمنع أي انعكاس عندما $E>V_o$ وهذا غير منطبق في قوانين ميكانيكا الكم وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات.

الحالة الثانية $E<V_o$ مرحلة الوهن

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:

$$k = r\cos\delta, \qquad \beta = r\sin\delta,$$

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

لتبسيط المعادلة (12)

الحل: الثابت B يبسط كالتالي:

$$\begin{aligned} B &= \left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A = \left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A = \left(\frac{\cos\delta - i\sin\delta}{\cos\delta + i\sin\delta}\right)A \\ &= \frac{re^{-i\delta}}{re^{i\delta}}A \qquad \textbf{(14)} \\ &= e^{-2i\delta}A \end{aligned}$$

الثابت C يبسط كالتالي:

$$\begin{aligned} C &= \left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A = \left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A = \left(\frac{2k}{k+i\beta} - 1 + 1\right)A \\ &= \left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta} + 1\right)A \qquad \textbf{(15)} \\ &= \left(e^{-2i\delta}+1\right)A \end{aligned}$$

ولنا هنا بعض الملاحظات:

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

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

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:**

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

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

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:

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

وهذه تعطى قيماً مقبولة عند $x=0$ وتقل تدريجيا (أسيا) 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).

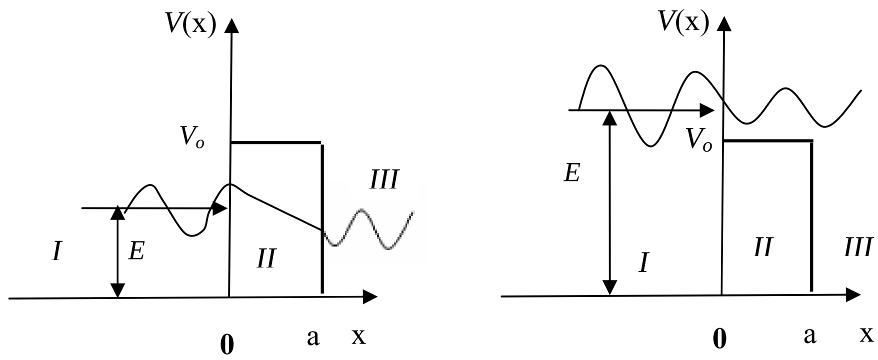
---

5. IV **- حاجزالجهد المستطيل** (Rectangular potential barrier)

دراسة حزمة متجانسة من الإلكترونات تتحرك في اتجاه حاجز جهد على الصورة:

$$V(x)=\begin{cases}V_o, & 0<x<a\\ 0, & a\le x\le 0\end{cases}$$

في كلتا الحالتين وهما أن تكون طاقة الجسيم الكلية E أكبر من V_o أو أصغر من V_o حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد (انظر الشكل 2.*III*.1**). ومنها سنوجد معادلات ا- التيار الساقط ب- التيار المنعكس ت - التيار النافذ ح- معامل الانعكاس د- معامل النفاذية.**



(b)   (a)

شكل $2.III.1$ (a) الحالة الأولى $E > V_o$ (b) الحالة الثانية $E < V_o$

الحالة الأولى $E < V_o$

معادلة شرودنجر اللازمنية في المنطقة (I)، $-\infty \leq x \leq a$، تعطي كالأتي:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I\,, \tag{1}$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. والحل العام للمعادلة (1) هو:

$$\psi_I(x) = A \underbrace{e^{ikx}}_{\text{Incident wave}} + B \underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \tag{2}$$

e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني وتسمى دالة ساقطة، e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني وتسمى دالة منعكسة. A هي سعة الموجة الساقطة و B هي سعة الموجة المنعكسة من حائط الجهد.

معادلة شرودنجر غير الزمنية في منطقة حاجز الجهد (II)، $0 \leq x \leq a$، تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\,\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \alpha^2\psi_{II} \tag{3}$$

حيث $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E)$. والحل العام للمعادلة (3) هو:

$$\psi_{II}(x) = C\ e^{\alpha x} + D\ e^{-\alpha x} \tag{4}$$

الحد $C\,e^{\alpha x}$ هي دالة أُسية تزايدية، تمثل اضطراباً منعكساً غير متذبذب يتحرك خلال الحائل في الاتجاه السالب للمتغير x. الحد $De^{-\alpha x}$ يعبر دالة أُسية تناقصية، تمثل اضطراباً غير متردد يتحرك خلال الحائل مع زيادة المتغير x. ونظراً لقيم x المحددة بين 0 و a فإنه لن يتم إهمال أي من الحدود.

معادلة شرودنجر غير الزمنية في المنطقة (III)، $a \le x \le \infty$، تُعطى كالأتي:

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = -k^2\psi_{III}\,, \qquad (5)$$

وحل المعادلة (5) العام هو:

$$\psi_{III}(x) = G\underbrace{e^{ikx}}_{\text{Transmitted wave}} + H\underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \qquad (6)$$

e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى موجة نافذة (Transmitted wave). e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني وتسمى دالة مرتدة. G هي سعة الموجة الساقطة و H هي سعة الموجة المرتدة من ∞. وحيث إنه لاتوجد موجة مرتدة من ∞ فإننا نستطيع وضع $H = 0$.

لذلك نجد أن مجموعة الحلول المقبولة هي:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}\\ \psi_{II}(x) &= C\,e^{\alpha x} + D\,e^{-\alpha x}\\ \psi_{III}(x) &= G\,e^{ikx}\end{aligned} \qquad (4)$$

الآن: عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدوال:

$$\begin{aligned}&\because\ \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)\\ &\therefore\quad A + B = C\end{aligned} \qquad (5)$$

ولمشتقاتها:

$$\begin{aligned}&\because\ \psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0)\\ &\therefore\quad ik(A-B) = \alpha C - \alpha D\end{aligned} \qquad (6)$$

عند الحد $x = a$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدوال:

$$\begin{aligned}&\because\ \psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a)\\ &\therefore\quad Ce^{\alpha a} + De^{-\alpha a} = Ge^{ika}\end{aligned} \qquad (7)$$

ولمشتقاتها:

$$\because \quad \psi'_{II}(x=a) = \psi'_{III}(x=a)$$
$$\therefore \quad \alpha C e^{\alpha a} - \alpha D e^{-\alpha a} = ikG e^{ika} \qquad \textbf{(8)}$$

حصلنا هنا على أربع معادلات ولكن لخمسة مجاهيل. بحل المعادلات (5 ، 6، 7، 8) لكل من A و B بدلالة G نحصل على:

$$A = \left[\cosh(\alpha a) + \frac{i}{2}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)\sinh(\alpha a)\right] G e^{ika}$$
$$B = -\frac{i}{2}\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)\sinh(\alpha a) G e^{ika} \qquad \textbf{(9)}$$

بالإمكان تعريف كثافة التيار الساقط = $v_1 |A|^2$، وكثافة التيار المنعكس = $v_1 |B|^2$، وكثافة التيار النافذ = $v_2 |G|^2$ حيث $v_i = \hbar k_i / m$. بالتالي فإن معامل الانعكاس (R) يأخذ الصورة:

$$R = \frac{BB^*}{AA^*} = \left(\frac{B}{A}\right)\left(\frac{B^*}{A^*}\right) = \frac{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)}{\cosh^2(\alpha a) + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)}$$

$$= \frac{\frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)}{1 + \frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)} = \left[1 + \frac{4E(V_o - E)}{V_o^2 \sinh^2(\alpha a)}\right]^{-1} \qquad \textbf{(10)}$$

وذلك باستخدام قيم α و k .

ومعامل النفاذية (T) يأخذ الشكل كالتالي:

$$T = \frac{GG^*}{AA^*} = \left(\frac{G}{A}\right)\left(\frac{G^*}{A^*}\right) = \left(1 + \frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)\right)^{-1} \qquad \textbf{(11)}$$

ونقف هنا لسرد بعض التعليقات وهي:

1- من العلاقتين (10) و (11) نجد أن $T + R = 1$ وهو قانون حفظ الجسيمات.

2- للمقارنة بالنظرية التقليدية نضع $\hbar = 0$ لنجد أن α و k تؤولان إلى ∞. ومنهما يؤول $R \to 1$ و $T \to 0$، كما هو متوقع من تصرف الجسيمات التقليدية.

3- من معامل النفاذية نجد أن $T = 0$ عندما $E = 0$. ومع ازدياد طاقة الحركة الابتدائية للجسيم بحيث إن $0 < E < V_o$ نجد أن T تصبح لها قيمة أقل من الواحد الصحيح. وهذا يعني أن هناك احتمالية للجسيمات أن تمر خلال حائل الجهد V_o حتى وإن كانت طاقة الحركة الابتدائية للجسيم أقل من V_o. وهذا غير محتمل في قوانين الميكانيكا التقليدية وذلك ناتج من الخواص الموجية

للجسيمات. وهذه الظاهرة تسمى بالتأثير النفقي (Tunneling effect). ويوجد ظواهر فيزيائية كثيرة لم تفسر إلا بالتأثير النفقي منها:

- **انبعاث الإلكترونات من سطح المعادن الباردة نتيجة تأثير مجال خارجي.**
- **الدايود (الثنائي) النفقي (Tunnel diodes) في الدوائر الكهربائية.**
- **التوصيل الكهربي للمواد العازلة.**
- **التأثير النفقي في الأنوية ومنها انحلال جسيمات α من المواد المشعة.**
- **التأثير النفقي في فيزياء الجوامد.**
- **التأثير النفقي في المواد فائقة التوصيل.**

4- إذا زادت الطاقة E، نجد أن الكمية $(V_o - E)$ تقل، و تقل معها α. ومع ثبوت عرض الجهد a نجد أن $\sinh^2(\alpha a)$ تقل أسرع من $(V_o - E)$. لذلك فإن T تزداد مع زيادة E.

5- إذا زاد عرض الجهد a فإن $\sinh^2(\alpha a)$ تزداد بسرعة ولذلك تقل معها T بسرعة.

مثال: استنتج معادلة تقريبية لمعامل النفاذية وذلك عند تحقق الشرط $\alpha a >> 1$.

الحل: عند تحقق الشرط $\alpha a >> 1$ نجد أن:

$$e^{-a\alpha} \to 0, \quad \sinh^2(a\alpha) = \left(\frac{e^{a\alpha} - e^{-a\alpha}}{2}\right)^2 \approx \frac{1}{4} e^{2a\alpha}$$

بالتالي فإن:

$$\begin{aligned} T &= \left(1 + \frac{V_o^2}{4E(V_o - E)} \sinh^2(\alpha a)\right)^{-1} \\ &\approx \frac{4E(V_o - E)}{V_o^2} \sinh^{-2}(\alpha a) \approx \frac{16E(V_o - E)}{V_o^2} e^{-2\alpha a} \\ &= \underline{\frac{16}{V_o}(1 - \frac{E}{V_o}) e^{-2a\alpha}} \end{aligned}$$

الحالة الثانية $E > V_o$

معادلات شرودنجر في المنطقتين (I) و(III) لن تتغير، وبالتالي سوف نستخدم المعادلتين (2) و(6). ومعادلة شرودنجر اللازمنية في منطقة حاجز الجهد (II)، $0 \le x \le a$، سوف تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+V_o\psi_{II}=E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}=-\beta^2\psi_{II} \qquad \textbf{(12)}$$

حيث $\beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_o)$ **. والحل العام للمعادلة (12) هو:**

$$\psi_{II}(x)=C\ e^{i\beta x}+D\ e^{-i\beta x} \qquad \textbf{(13)}$$

لذلك نجد أن مجموعة الحلول المقبولة هي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x)&=A\ e^{ikx}+B\ e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x)&=C\ e^{i\beta x}+D\ e^{-i\beta x} \\ \psi_{III}(x)&=G\ e^{ikx} \end{aligned} \qquad \textbf{(14)}$$

وبتطبيق الشروط الحدودية للدوال ومشتقاتها وهي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x=0)&=\psi_{II}(x=0) \\ \psi'_I(x=0)&=\psi'_{II}(x=0) \\ \psi_{II}(x=a)&=\psi_{III}(x=a) \\ \psi'_{II}(x=a)&=\psi'_{III}(x=a) \end{aligned} \qquad \textbf{(15)}$$

ووضع $\alpha=i\beta$ **بالمعادلتين (10) و (11) نحصل على:**

$$R=\left[1+\frac{4E(E-V_o)}{V_o^{\,2}\sin^2(\beta a)}\right]^{-1} \qquad \textbf{(16)}$$

$$T=\left(1+\frac{V_o^{\,2}}{4E(E-V_o)}\sin^2(\beta a)\right)^{-1} \qquad \textbf{(17)}$$

ولنا هنا بعض التعليقات وهي:

1- **من العلاقتين (16) و (17) نجد أن** $T+R=1$ **وهو قانون حفظ الجسيمات.**
2- **للقيمة** $E\to V_o$ **نجد أن** $\sin(\beta a)\approx\beta a$ **ومنها نحصل على:**

$$T=\left(1+\frac{mV_o a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1}$$

3- **مع ازدياد طاقة الجسيم** $E\ (E>V_o)$ **نجد أن معامل النفاذية يتذبذب، كما يتضح من المعادلة (17).**

4- من المعادلة (17) نجد أن $T = 1$ عندما يتحقق الشرط:

$$\beta a = n\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$ ،

ومنه:

$$\frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2} a = n\pi$$

أو:

$$\frac{2\pi}{\lambda} a = n\pi \qquad \Rightarrow \qquad a = n\frac{\lambda}{2}$$

وهذا يعني أن عرض الحائل يتساوى مع أعداد صحيحة من نصف الطول الموجي لدبروليه داخل الحائل. وبتربيع المعادلات السابقة نحصل على:

$$E = V_o \left[1 + n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mV_o a} \right]$$

5- من المعادلة (17) نجد أيضاً أن T تصل إلى نهاية صغرى عندما يتحقق الشرط:

$$\beta a = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$ ،

ومنها نحصل على:

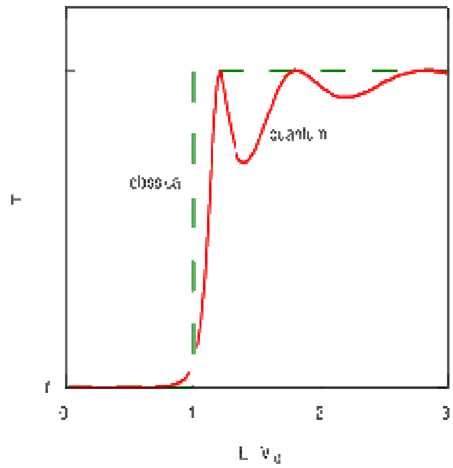
$$E = V_o \left[1 + (2n + 1)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mV_o a} \right]$$

وأقل قيمة لمعامل النفاذية:

$$T = T_{\min} = \left(1 + \frac{V_o^{\,2}}{4E(E - V_o)} \right)^{-1}$$

6- حتى بوجود الشرط $(E > V_o)$ نجد أن هناك احتمالية لانعكاس الجسيمات من الحائل، وهذه نتيجة من نتائج ميكانيكا الكم.

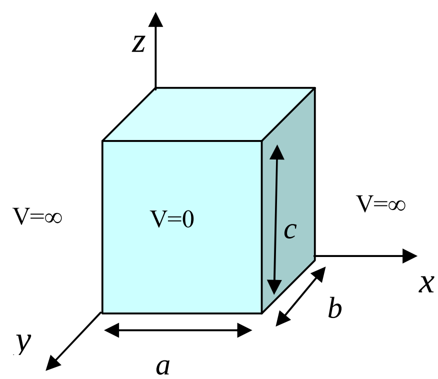
الشكل التالي يوضح تغير معامل النفاذية مع $(\frac{E}{V_o})$ في ميكانيكا الكم، المنحنى المتصل، وفي النظرية التقليدية، المنحنى المتقطع. نلاحظ أن سلوك معامل النفاذية في ميكانيكا الكم يعطي قيماً في المدى $(\frac{E}{V_o} < 1)$.



5. V - تطبيق معادلة شرودنجرفي ثلاثة أبعاد

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

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



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

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

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

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

1- نفترض أن

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

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

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

بالإمكان الحصول على المعادلات التالية:

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

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 ذى بعد واحد ($2.II.9$)، ولذلك نحصل على الحلول التالية:

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

وأيضاً

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

والدالة المميزة تصبح:

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

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:

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

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

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

5- من المعادلة (9) سنعرف درجة الانتماء (أو التحال) 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	$\psi_{2,2,2}$

7 مسائل منوعة

1- في المدى المحدد بين قوسين، ارسم الدوال الموجية الآتية لترى أنها تحقق شروط ميكانيكا الكم:

$$\text{(a)}\ \frac{\sin(x)}{x}\quad (0,\infty)\qquad \text{(b)}\ a\,x\quad (-5,5)\qquad \text{(c)}\ e^{-x}\quad (0,\infty)$$

2- تحقق من صحة معادلات المؤثرات الآتية:

$$\text{(a)}\ \left(\frac{d}{dx}+x\right)^2=\left(\frac{d^2}{dx^2}+2x\frac{d}{dx}+x^2+1\right)\qquad \text{b)}\ \left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)^3=\frac{d^3}{dx^3}+\frac{3}{x}\frac{d^2}{dx^2}$$

$$\text{(c)}\ \left(x\frac{d}{dx}\right)^2=x^2\frac{d^2}{dx^2}+x\frac{d}{dx}\qquad \text{(d)}\ \left(\frac{d}{dx}x\right)^2=x^2\frac{d^2}{dx^2}+3x\frac{d}{dx}+1$$

$$\text{(e)}\ \left(\frac{d}{dx}\pm x\right)\left(\frac{d}{dx}\pm x\right)=\left(\frac{d^2}{dx^2}-x^2\mp 1\right)$$

3- حدد أيا من المعادلات الآتية تحقق معادلة القيم المميزة

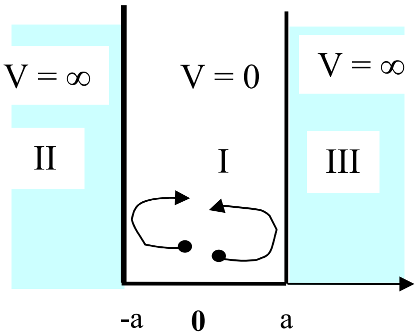
$$\text{(a)}\ \frac{d}{dx}\sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)\quad \text{(b)}\ \frac{d^2}{dx^2}\sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)\quad \text{(c)}\ \frac{d^n}{dx^n}e^{\alpha x}\quad \text{(d)}\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx}$$

4- بمعرفة المؤثرين $\hat{A}=\frac{d}{dx}(\ )$ و $\hat{C}=\frac{1}{(\ )}$ والدالة $\psi=45xy^2$ تحقق من المعادلات الآتية:

$$\text{(a)}\ \hat{A}(\hat{C}\psi)=\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{\left(45xy^2\right)}\right)=-\frac{1}{45x^2y^2}$$

$$\text{(b)}\ \hat{C}(\hat{A}(\psi))=\hat{C}(\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{\left(45xy^2\right)}\right)=\hat{C}(-\frac{1}{45x^2y^2})=-45x^2y^2$$

5- ادرس حركة جسيم في مجال جهد متماثل كما بالشكل ويوصف بالتالى:



$$V(x)=\begin{cases}0, & -a\le x\le a\\ \infty, & \text{otherwise}\end{cases}$$

وأثبت أن

$$\psi_I(x)=\begin{cases}A\sin(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is even}\\ \\ B\cos(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is odd}\end{cases}$$

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2,\quad A=B=\sqrt{\frac{1}{a}}$$

6- للدالة

$$f(x)=\begin{cases}A, & a\le x\le b\\ 0, & otherwise\end{cases}$$

حيث A **ثابت. تحقق من الآتي:**

$$A=\frac{1}{\sqrt{b-a}},<x>=\frac{b+a}{2},<x^2>=\frac{b^2+ab+a^2}{3},$$

$$\Delta x=\sqrt{<x^2>-<x>^2}=\frac{\sqrt{b-a}}{\sqrt{12}}$$

7- لدالة جاوس $\psi(x)=Ne^{-x^2/2a},\quad -\infty\le x\le\infty$ **تحقق من الآتي:**

$$N=\left(\frac{1}{\pi a}\right)^{1/4},\ <x>=0,\ <x^2>=\frac{a}{2},\ <p>=0,<p^2>=\frac{\hbar^2}{2a},$$

$$\Delta x=\sqrt{<x^2>-<x>^2}=\sqrt{\frac{a}{2}},\ \Delta p=\sqrt{<p^2>-<p>^2}=\sqrt{\frac{\hbar^2}{2a}},\text{ and}$$

$$<E=\frac{p^2}{2m}>=\frac{1}{2m}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2a}},\quad \Delta x\,\Delta p=\frac{\hbar}{2}$$

استخدم التكامل القياسي: $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}},\quad \int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-ax^2}dx=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}},$

8- للدالة

$$f(x)=\begin{cases}cx(a-x), & 0\le x\le a\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases}$$

تحقق من الآتي:

$c=\sqrt{\frac{30}{a^5}},\ <x>=\frac{a}{2},\ <x^2>=\frac{2}{6}a^2,\ <p>=0, <p^2>=10\frac{\hbar^2}{a^2},$

$\Delta x=\sqrt{<x^2>-<x>^2}=\frac{\sqrt{7}}{14}a,\ \Delta p=\sqrt{<p^2>-<p>^2}=\frac{\sqrt{10}}{a}\hbar,$ and

$<E=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}>=5\frac{\hbar^2}{ma^2}$

$\Delta x\,\Delta p=0.6\hbar>\frac{\hbar}{2}$

9- للدالة $\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$ **وفي المدى** $0\le x\le L$ **تحقق من الآتي:**

$\langle x\rangle=\frac{L}{2};\quad \langle p\rangle=0;\quad \langle x^2\rangle=\frac{L^2}{6n^2}\left(\frac{2\pi^2n^2-3}{\pi^2}\right);\quad \langle \hat{p}^2\rangle=\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{L^2}$

$\Delta x=\sqrt{<x^2>-<x>^2}=\sqrt{\frac{L^2}{6n^2}\left(\frac{2n^2\pi^2-3}{\pi^2}\right)-\frac{L^2}{4}}$

$\Delta p=\sqrt{<p^2>-<p>^2}=\sqrt{\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{L^2}}$

$\Delta x\,\Delta p=\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\pi^2n^2-2}{3}}=.57\hbar\ \rangle\ \frac{\hbar}{2}$

ملحق 1.A

المعادلة التفاضلية البسيطة

Simple Differential Equation

سوف نستعرض هنا حلاً للمعادلة التفاضلية البسيطة من الدرجة الثانية في الصورة:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0 \qquad (1)$$

حيث k^2 قيمة ثابتة. لحل المعادلة (1) دعونا نستخدم التعويض:

$$\Psi = e^{mx} \qquad (2)$$

لنحصل على المعادلة $m^2 + k^2 = 0$ التي لها الجذران $m = \pm i\ k$ حيث $i = \sqrt{-1}$. بالتالي فإن الحل الخاص للمعادلة (1) يكون بالصورة e^{imx} أو e^{-imx}، وبجمع الحلين نحصل على الحل العام وهو:

$$\Psi = A\ e^{imx} + B\ e^{-imx} \qquad (3)$$

باستخدام المفكوك $e^{\pm ix} = \cos x \pm i\ \sin x$ نحصل على صيغة أخرى للحل العام بالصورة:

$$\begin{aligned}\Psi &= (A+B)\cos(mx) + (A-B)i\ \sin(mx)\\ &= C\ \cos(mx) + D\ \sin(mx)\end{aligned} \qquad (4)$$

حيث A, B, C, D ثوابت اختيارية.

و بالمثل للمعادلة التفاضلية:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - m^2\Psi = 0 \qquad (5)$$

يكون حلها العام بالصورة:

$$\begin{aligned}\Psi &= A\ e^{mx} + B\ e^{-mx}\\ &= C\ \cosh(mx) + D\ \sinh(mx)\end{aligned} \qquad (6)$$