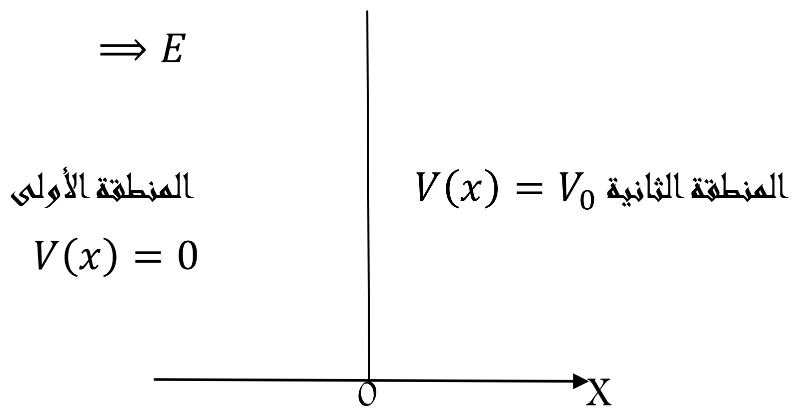
تطبيقات معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن على ابسط حركات الجسيمات المادية في بعد واحد

Solution of S.E. in one-dimension

أولاً : عتبة الجهد potential step



تعني وجود منطقتين بينهما فرق جهد بحيث طاقة احدهما تساوي صفر أي تكون القوة الخارجية على الجسيم معدومة ، في الأخرى طاقة الوضع او الكامنة تساوي كمية ثابتة V_0 مثال على ذلك الالكترون الحر داخل قطعه معدنية.

الحالة الأولى $E > V_0$

سوف نجد الآن الدالة الموجية للجسيم

1. $V(x) = 0$ في المنطقة الأولى

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx^2} - E\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \qquad \boxed{V(x) = 0}$$

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \qquad let \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{\mathrm{I}}(x) + k^2\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \implies \frac{d^2}{dx^2} = -k^2 \implies \frac{d}{dx} = \pm ik$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\text{الجذر الأول}\,x} + Be^{\text{الجذر الثاني}\,x} \implies \boxed{\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} \quad at\ x < 0}$$

2. $V(x) = V_0$ في المنطقة الثانية

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0$$

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

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

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0 \qquad let\quad k'^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{\mathrm{II}}(x) + k'^2\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0 \implies \frac{d^2}{dx^2} = -k'^2 \implies \frac{d}{dx} = \pm ik'$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{\text{الجذر الأول}\,x} + De^{\text{الجذر الثاني}\,x} \implies \psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{+ik'x} + De^{-ik'x} \quad at\ x > 0$$

في هذه المنطقة $D = 0$ لأنه لا يوجد موجة منعكسة .

$$\therefore \boxed{\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{+ik'x}}$$

الآن نحسب العلاقة بين الثوابت A, B, C وذلك بأستخدام الشروط التالية :

a. $\psi_{\mathrm{I}}(x) = \psi_{\mathrm{II}}(x)\big|_{x=0} \implies Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} = Ce^{+ik'x}\Big|_{x=0}$

$$\implies A + B = C \quad \ldots @$$

b.

$$\frac{d\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx} = \frac{d\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx}\bigg|_{x=0}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx}\left[Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}\right] = \frac{d}{dx}\left[Ce^{+ik'x}\right]\bigg|_{x=0}$$

$$\Rightarrow ikAe^{+ikx} - ikBe^{-ikx} = +ik'Ce^{+ik'x}\Big|_{x=0}$$

$$\Rightarrow ikA - ikB = ik'C \Rightarrow A - B = \frac{k'}{k}C \quad ...@@$$

$$@ + @@ = (A + B) + (A - B) = C + \frac{k'}{k}C \Rightarrow 2A = C\left(1 + \frac{k'}{k}\right)$$

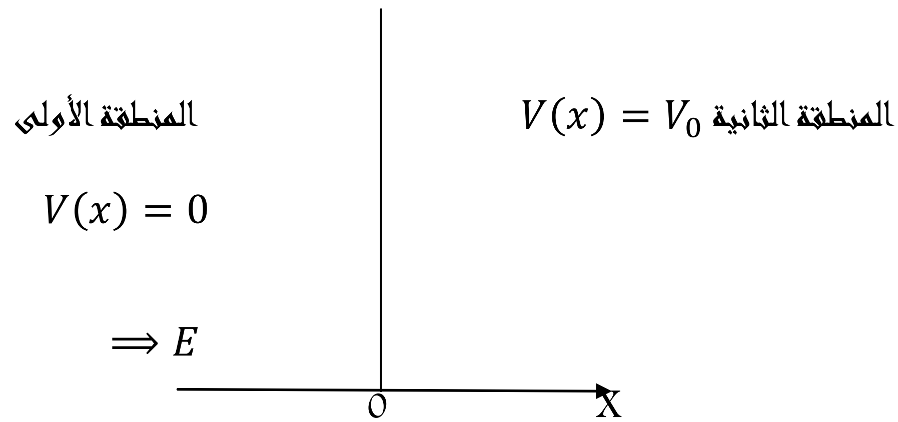
$$\Rightarrow 2A = C\left(\frac{k + k'}{k}\right)$$

$$@ - @@ = (A + B) - (A - B) = C - \frac{k'}{k}C \Rightarrow 2B = C\left(1 - \frac{k'}{k}\right)$$

$$\Rightarrow 2B = C\left(\frac{k - k'}{k}\right)$$

$$\frac{@ - @@}{@ + @@} = \frac{2B}{2A} = \frac{C\left(\frac{k-k'}{k}\right)}{C\left(\frac{k+k'}{k}\right)} \Rightarrow \boxed{\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'}}$$

$$\because 2A = C\left(\frac{k + k'}{k}\right) \quad \therefore \boxed{\frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}}$$



هنا ايضا تعني وجود منطقتين بينهما فرق جهد بحيث طاقة احدهما تساوي صفر أي تكون القوة الخارجية على الجسيم معدومة ، في الأخرى طاقة الوضع او الكامنة تساوي كمية ثابتة V_0

الحالة الثانية $E < V_0$

1. في المنطقة الأولى $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx^2} - E\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \quad let \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{\mathrm{I}}(x) + k^2\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \;\Longrightarrow\; \frac{d^2}{dx^2} = -k^2 \;\Longrightarrow\; \frac{d}{dx} = \pm ik$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\text{الجذر الأول}\,x} + Be^{\text{الجذر الثاني}\,x} \;\Longrightarrow\; \boxed{\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} \quad at\ x < 0}$$

2. $V(x) = V_0$ في المنطقة الثانية

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx^2} + (V_0 - E)\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0 \qquad * -1$$

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0 \quad let \quad \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{\mathrm{II}}(x) - \alpha^2\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0 \implies \frac{d^2}{dx^2} = \alpha^2 \implies \frac{d}{dx} = \mp\alpha$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{\text{الجذر الأول}\, x} + De^{\text{الجذر الثاني}\, x} \implies \psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{+\alpha x} \quad at\ x > 0$$

أيضاً في هذه الحالة لا توجد موجة منعكسة أي أن $D = 0$.

$$\therefore \boxed{\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{-\alpha x}}$$

و أيضاً نحسب العلاقة بين الثوابت A, B, C :

a. $\psi_{\mathrm{I}}(x) = \psi_{\mathrm{II}}(x)|_{x=0} \implies Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} = Ce^{-\alpha x}|_{x=0}$

$$\implies A + B = C \quad \dots\#$$

b.

$$\frac{d\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx} = \frac{d\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx}\bigg|_{x=0} \implies \frac{d}{dx}\left[Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}\right] = \frac{d}{dx}[Ce^{-\alpha x}]\bigg|_{x=0}$$

$$\implies ikAe^{+ikx} - ikBe^{-ikx} = -\alpha Ce^{-\alpha x}|_{x=0}$$

$$\implies ikA - ikB = -\alpha C \implies A - B = \frac{-\alpha}{ik}C \quad \dots\#\#$$

$$\# + \#\# = (A+B) + (A-B) = C - \frac{\alpha}{ik}C \;\Rightarrow\; 2A = C\left(1 - \frac{\alpha}{ik}\right)$$

$$\Rightarrow\; 2A = C\left(\frac{ik-\alpha}{ik}\right)$$

$$\# - \#\# = (A+B) - (A-B) = C - \frac{-\alpha}{ik}C \;\Rightarrow\; 2B = C\left(1 + \frac{\alpha}{ik}\right)$$

$$\Rightarrow\; 2B = C\left(\frac{ik+\alpha}{ik}\right)$$

$$\frac{\# - \#\#}{\# + \#\#} = \frac{2B}{2A} = \frac{C\left(\frac{ik+\alpha}{ik}\right)}{C\left(\frac{ik-\alpha}{ik}\right)} \;\Rightarrow\; \boxed{\frac{B}{A} = \frac{ik+\alpha}{ik-\alpha}}$$

$$\because\; 2A = C\left(\frac{ik-\alpha}{ik}\right) \quad \therefore\; \boxed{\frac{C}{A} = \frac{2ik}{ik-\alpha}}$$

حساب كثافة تيار الأحتمالية

$$S_x = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

أو لاً نحسب كثافة تيار الأحتمالية للجزء الساقط من الدالة الموجية في المنطقة الأولى

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{+ikx}$$

$$S_{inc} = \frac{\hbar}{2im}\left(A^*e^{-ikx}\frac{\partial}{\partial x}\left(Ae^{+ikx}\right) - Ae^{+ikx}\frac{\partial}{\partial x}\left(A^*e^{-ikx}\right)\right)$$

$$S_{inc} = \frac{\hbar}{2im}\left(A^*e^{-ikx}(ik)Ae^{+ikx} - Ae^{+ikx}(-ik)A^*e^{-ikx}\right)$$

$$S_{inc} = \frac{\hbar}{2im}\left(A^*(ik)A - A(-ik)A^*\right) = \frac{\hbar}{2im}(2ikA^*A) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

$$\Rightarrow\; S_{inc} = \mathrm{v}|A|^2 \boxed{\frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = \mathrm{v}}$$

ثانياً نحسب كثافة تيار الأحتمالية للجزء المنعكس من الدالة الموجية في المنطقة الأولى

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Be^{-ikx}$$

$$S_{ref} = \frac{\hbar}{2im}\left(B^{*}e^{+ikx}\frac{\partial}{\partial x}\left(Be^{-ikx}\right) - Be^{-ikx}\frac{\partial}{\partial x}\left(B^{*}e^{+ikx}\right)\right)$$

$$S_{ref} = \frac{\hbar}{2im}\left(B^{*}e^{+ikx}(-ik)Be^{-ikx} - Be^{-ikx}(ik)B^{*}e^{+ikx}\right)$$

$$S_{ref} = \frac{\hbar}{2im}\left(B^{*}(-ik)B - B(ik)B^{*}\right) = \frac{\hbar}{2im}\left(-2ikB^{*}B\right) = -\frac{\hbar k}{m}|B|^{2}$$

$$\Longrightarrow \; S_{ref} = -\mathrm{v}|B|^{2}$$

ثالثاً نحسب كثافة تيار الأحتمالية للدالة الموجية في المنطقة الثانية (الجزء النافذ) .

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{+ik'x}$$

$$S_{trans} = \frac{\hbar}{2im}\left(C^{*}e^{-ik'x}\frac{\partial}{\partial x}\left(Ce^{+ik'x}\right) - Ce^{+ik'x}\frac{\partial}{\partial x}\left(C^{*}e^{-ik'x}\right)\right)$$

$$S_{trans} = \frac{\hbar}{2im}\left(C^{*}e^{+ik'x}(ik')Ce^{-ik'x} - Ce^{-ik'x}(-ik')C^{*}e^{+ik'x}\right)$$

$$S_{trans} = \frac{\hbar}{2im}\left(C^{*}(ik')C - C(-ik')C^{*}\right) = \frac{\hbar}{2im}\left(2ik'C^{*}C\right)$$

$$\Longrightarrow \; S_{trans} = \frac{\hbar k'}{m}|C|^{2}$$

الآن سوف نحسب معامل الأنعكاس $\mathcal{R}$ و معامل النفاذية T ومن المفروض أن مجموعهما يساوي واحد .

$$\mathcal{R} = \left|\frac{S_{ref}}{S_{inc}}\right| = \left|\frac{-\mathrm{v}|B|^2}{\mathrm{v}|A|^2}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \boxed{\frac{B}{A} = \frac{k-k'}{k+k'}}$$

$$\therefore \mathcal{R} = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2$$

$$T = \left|\frac{S_{trans}}{S_{inc}}\right| = \left|\frac{\frac{\hbar k'}{m}|C|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2}\right| = \frac{k'}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2 \boxed{\frac{C}{A} = \frac{2k}{k+k'}}$$

$$\therefore T = \frac{k'}{k}\left(\frac{2k}{k+k'}\right)^2 = \frac{4kk'}{|k+k'|^2}$$