الفصل الثالث

معادلة Schrödinger و دراسة الجمل الكوانتية أحادية البعد

1. معادلة Equation Schrödinger

1.جسيم حر

يعرف الجسيم الحر في الفيزياء الكلاسيكية بالموقع و السرعة و ديناميكيته تتعرف تعرف بالقوى المطبقة عن طريق قوانين نيوتن، في ميكانيكا الكم لا نستطيع التكلم عن موضع الجسيم و سرعته في نفس الوقت لذلك نعرف الدالة الموجية "$\psi\ (r,t)$" و كثافة احتمال، و ديناميك الجسيم يعرف بتطور الدالة الموجية خلال الزمن من خلال معادلة **Schrödinger** .

لتكن يدينا حزمة الأمواج لجسيم حر التالية

$$\psi(\vec{r},t)=\int_{\rho} f(w)e^{-i(wt-\vec{r}.\vec{k})}d\rho$$

حيث w هوالنبض أو التردد الزاوي المعطى في المجال ρ، $\overrightarrow{k}$ هي اشعة الموجة و $\vec{r}=(x,y,z)$ موضع الجسيم في الفضاء ذو الكتلة m

لدينا حسب ما سبق من قانون **De Broglie** للجسيمات $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ و كذلك من علاقة بلانك $E=\hbar \mathrm{w}$ يصبح لدينا :

$$\psi(\vec{r},t)=\int_{\rho} f(w)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}.\overrightarrow{r})}d\rho \quad \dots\dots\dots\dots\dots\dots (1)$$

بالاشتقاق بالنسبة الى الزمن t يصبح لدينا

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\int_{\rho} -i\frac{E}{\hbar}f(w)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}.\vec{r})}d\rho \dots\dots\dots\dots\dots\dots (2)$$

و الان بالاشتقاق بالنسبة الى الموضع مرتين $\vec{r}$ حيث $\vec{p}.\vec{r}=p_x.x+p_y.y+p_z.z$ يصبح لدينا :

$$\frac{\partial^2}{\partial^2 r}\psi(\vec{r},t)=-\int_{\rho} \frac{p^2}{\hbar^2}f(w)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}.\overrightarrow{r})}d\rho \quad \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (3)$$

بضرب المعادلة (3) في $\frac{\hbar^2}{2m}$ ثم بجمعا مع المعادلة (2) نجد :

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial^2 r}\psi(\vec{r},t)=\int_\rho\left(E-\frac{p^2}{2m}\right)f(w)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}.\vec{r})}\,d\rho\;\ldots\ldots\ldots\;(4)$$

لكن لدينا جسيم حر طاقته معطاة بـ: $\left(\mathrm{E}=\frac{P^2}{2\mathrm{m}}\right)$ إذن المعادلة (4) تصبح

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t)\;\ldots\ldots\ldots\;(5)$$

حيث $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial^2 r}$ ، المعادلة (5) هي معادلة **Schrödinger** المرتبطة بالزمن لجسيم حر.

بالنسبة لجسيم حر فإن هاملتونيان $\mathcal{H}$ الجملة معطى بـ: $\mathcal{H}=\frac{p^2}{2m}=E$ إذن معادلة **Schrödinger**

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\mathcal{H}\Delta\psi(\vec{r},t)\;\ldots\ldots\ldots(6)$$

و **بصفة عامة** معادلة **Schrödinger** لجسيم خاضع لكمون $V(\vec{r})$ ما هي إلا

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\big(E+V(\vec{r})\big)\psi(\vec{r},t)$$

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r})\psi(\vec{r},t)\;\ldots\ldots\ldots(7)$$

حيث $\mathcal{H}=E+V(\vec{r})$

إن المعادلة (7) هي العلاقة الاساسية للميكانيك الكوانتي ، و تصف ديناميك الجسيمات الكمية. إن هذه المعادلة لا تصف موضع جسيم أو اندفاعه، لأنه في الميكانيك الكمي لا يمكن تحديد موضع الجسيم و اندفاعه في آن واحد، و إنما تصف معادلة **Schrödinger** احتمال تواجد الجسيم في الفضاء و احتمال اندفاعه.

واجب: ماذا تلاحظ بالنسبة للمعادلتين (2) و (3)

2. دراسة الجمل الكوانتية أحادية البعد

1.2 الحالات المستقرة

ندرس جسيم كمي يخضع لكمون لا يتعلق صراحة بالزمن دالته الموجية $\psi(\vec{r},t)$ يحقق معادلة التطور لـ: **Schrödinger**

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r})\psi(\vec{r},t)\;\ldots\ldots\ldots\;(8)$$

نبحث عن حلول المعادلة (8) و هذا لإيجاد $\psi(\vec{r},t)$ ،

اذا كان الكمون مستقلا عن الزمن و لكون الطاقة محفوظة فإنه يكون لدينا حالات كمية ذات طاقات محددة تماما مثل حالات ذرة الهيدروجين. تدعى هذه الحالات بالحالات المستقرة.

في هذه الحالة فإننا نستطيع فصل المتغيرات: $\psi(x,t) = \phi(x)T(t)$ نستطيع أن نكتب

$$\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = T(t)\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}$$

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \phi(x)\frac{dT(t)}{dt}$$

بالتعويض في معادلة **Schrödinger**

$$i\hbar\phi(x)\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x).\phi(x)T(t) \dots\dots\dots (9)$$

نضرب طرفي المعادلة (9) في $\frac{1}{\phi(x)T(t)}$ نحصل على

$$i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x) \dots\dots\dots (10)$$

الطرف الايمن للمعادلة (10) هو دالة مرتبطة بالزمن فقط، بينما الطرف الأيسر لها دالة في الفضاء فقط، مما يدل على أن طرفي هذه المعادلة لابد أن يكون ثابت. و بما أن الطرف الأيسر يدل على الطاقة إذن نسمي هذا الثابت بثابت الطاقة E ومنه:

$$i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = E \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots.(11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x) = E \quad \dots\dots\dots\dots\dots..\dots.(12)$$

المعادلة (11) هي معادلة تفاضلية من الدرجة الاولى حلها بسيط، بوضع $E = \hbar/w$ نجد مباشرة

$$T(t) = e^{-iwt} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots..\dots.(13)$$

أما المعادلة (12) فهي معادلة **Schrödinger** المستقلة عن الزمن يمكن حلها اذا بمعرفة الكمون $V(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \dots..\dots.(14)$$

و بهذا يكون و من اجل الحالات المستقرة

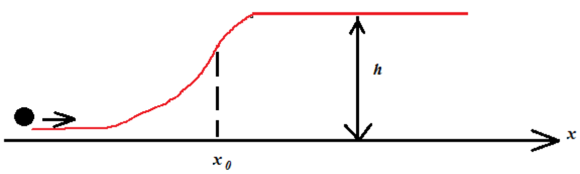
$$\psi(x,t) = \phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (15)$$

فعندما يكون جسيم موجود في حالة مستقرة فإنه يوصف بدالة موجية من الشكل(15) و تكون طاقته محددة تماما و تساوي E.

كذلك نستطيع ان نكتب المعادلة (14) بـ: $\mathcal{H}\phi(x) = E\phi(x)$ و هي معادلة **Schrödinger** المستقلة عن الزمن بالنسبة لبعد واحد.

2.2   دراسة حاجز الكمون

لنعتبر منحدر ذو ارتفاع h يكون لنا حاجز كمون (الشكل1)



الشكل 1 .

لنعتبر جسيم (كرية) اتية من الجهة اليسرى بطاقة حركية T . قبل وصول الكرية الى الحاجز تملك هذه الكرية طاقة كلية $E = T$ حيث الطاقة الكامنة معدومة $V_0 = 0$

1. الدراسة الكلاسيكية

- اذا كان $E > V_0$ فإن الكرية ستحاول صعود الحاجز الكموني حيث تتناقص سرعتها و جزء من طاقتها الحركية يتحول الى طاقة كامنة و بعد جزء من الحاجز تتحول الطاقة الحركية الى $T = E - V_0$

فنلاحظ ان كل الكريات الاتية تعبر الحاجز و تقول ان هناك نفوذ كلي للكريات عبر الحاجز.

- اذا كان $E < V_0$ فإن الكريات ستتوقف على الحاجز عند النقطة $\acute{x}$ حيث

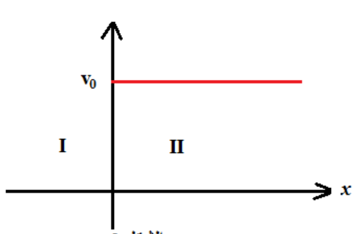
$T(\acute{x}) = 0\,; V(\acute{x}) = E$, و نقول أنه هناك انعكاس كلي للكريات حيث و لا كرية ستعبر الحاجز.

2. الدراسة الكمية

الدراسة الكمية تعتمد على حل معادلة **Schrödinger** (14)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right).\phi(x) = E.\phi(x)$$

حيث $V(x)$ يمثل حاجز الكمون في الشكل (2). الكمون $V(x)$ يجزئ الفضاء منطقتين



الشكل 2

المنطقة **I** $\boldsymbol{x < 0}$ $V(x) = 0$

المنطقة **II** $\boldsymbol{x > 0}$ $V(x) = V_0$

خصائص الدالة الموجية يجب أن تحقق الدالة الموجية الشروط التالية:

- أن تكون الدالة الموجية $\psi(x,t)$ مستمرة في مجال تعر يفها و ذات قيمة واحدة من أجل x و t

و تبقى مستمرة حتى عند سطوح الانقطاع.

- أن يكون مربع طويلتها متكاملا (منته) ، أي: $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2 dx < \infty$.
- تكون مشتقاتها الاولى أيضا مستمرة في المناطق التي تكون فيها الطاقة الكامنة محدودة.

تسمى هذه الشروط بشروط الاستمرارية للدالة الموجية ψ و التي ستساعد في حل معادلة **Schrödinger** .

1. اذا كان $\mathrm{E} > \mathrm{V}_0$

معادلة **Schrödinger** (14) في المنطقة **I** حيث $\boldsymbol{x} < \mathbf{0}$ $V(x) = 0$ تصبح

$$\text{المنطقة I} \quad \longrightarrow \left(\frac{\hbar^2}{\mathbf{2m}}\frac{d^2}{dx^2} + 0\right)\phi_1(x) = E\phi_1(x)$$

$$\Longrightarrow \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mathbf{2mE}}{\hbar^2}\right)\phi_1(x) = 0$$

نضع $\boldsymbol{k_0} = \frac{\sqrt{\mathbf{2mE}}}{\hbar}$ المعادلة الاخيرة تصبح

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_0^2\right)\phi_1(x) = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(16)$$

و هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية حلها معطى من الشكل

$$\phi_1(x) = Ae^{i\boldsymbol{k_0}x} + Be^{-i\boldsymbol{k_0}x} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(17)$$

حيث A و B ثابتان مركبان

في المنطقة **II** $\boldsymbol{x} > \mathbf{0}$ $V(x) = V_0$ معادلة **Schrödinger** (14) تصبح

$$\text{المنطقة II} \quad \longrightarrow \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mathbf{2m(E - V_0)}}{\hbar^2}\right)\phi_2(x) = 0$$

نضع $\mathrm{k} = \frac{\sqrt{2\mathrm{m}(\boldsymbol{E}-V_0)}}{\hbar}$ المعادلة الاخيرة تصبح

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\phi_2(x) = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(18)$$

حلها من الشكل

$$\phi_2(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (19)$$

في المنطقة II لا توجد أمواج منعكسة أي اتية من اللانهاية ، إذن $D = 0$ و منه المعادلة (19) تصبح

$$\phi_2(x) = Ce^{ikx} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (20)$$

- الهدف من الدراسة السابقة هي حساب سعة الموجة النافذة و سعة الموجة المنعكسة و احتمال تواجد الجسيم في أي منطقة من المنطقتين .
- **بالتعريف**
  - سعة الموجة المنعكسة

$$R = \left|\frac{J_r}{J_i}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{|B|^2}{|A|^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (21)$$

  - سعة الموجة النافذة

$$T = \left|\frac{J_t}{J_i}\right| = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{k_{Fin}}{k_{int}}\frac{|C|^2}{|A|^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (22)$$

حيث $\vec{J_r}$ و $\vec{J_i}$ و $\vec{J_t}$ هم أشعة كثافة التيار الاحتمالي الموافقة لـ : ψ_r الموجة المنعكسة و ψ_i الموجة الواردة و ψ_t الموجة النافذة.

$$\vec{J_i} = +\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_i\vec{\nabla}\psi_i^* - \psi_i^*\overrightarrow{\nabla\psi_i}\right)$$

بالتعويض

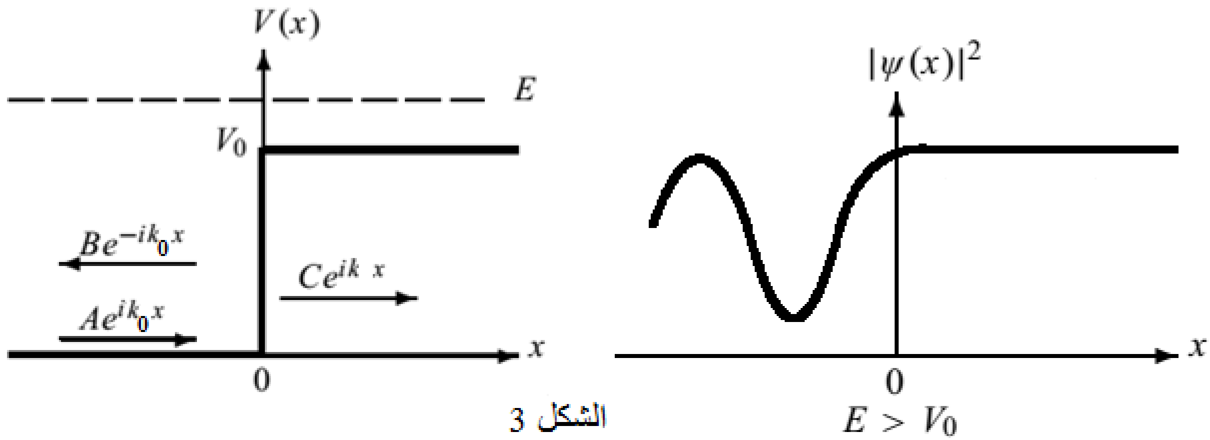
$$\begin{cases} J_i = \dfrac{\hbar k}{m}|A|^2 \\ J_r = -\dfrac{\hbar k}{m}|B|^2 , \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (23) \\ J_t = \dfrac{\hbar k_0}{m}|C|^2 \end{cases}$$

حيث $R + T = 1$

بالعودة إلى المعادلات (17) و(20) فإن $\psi_i = Ae^{ik_0x}$ تعبر عن الموجة الواردة و $\psi_r = Be^{-ik_0x}$ تعبر الموجة المنعكسة و $\psi_t = Ce^{ikx}$ تعبر الموجة النافذة

و منه من أجل الحالات المستقرة الدالة الموجية $\psi(x,t)$ هي كالاتي

$$\psi(x,t)=\begin{cases}\phi_1(x)e^{-iwt}=Ae^{i(k_0x-wt)}+Be^{-i(k_0x+wt)} & x<0\\ \phi_2(x)e^{-iwt}=Ce^{i(\mathrm{k}x-wt)} & x>0\end{cases}\;\ldots\ldots..(24)$$



الشكل 3

الان نحسب معاملي الانعكاس و النفوذ ، من شروط الاستمرارية (الشروط الحدية)

$$\begin{cases}\phi_1(0)=\phi_2(0)\\ \grave{\phi}_1(0)=\grave{\phi}_2(0)\end{cases}\;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(25)$$

$$\Rightarrow\quad \begin{cases}A+B=C\\ ik_0(A-B)=ikC\end{cases}\;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(26)$$

بحل هذه الجملة

$$\begin{cases}B=\dfrac{k_0-k}{k_0+k}A\\ C=\dfrac{2k_0}{k_0+k}A\end{cases}\;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(27)$$

و منه

$$\begin{cases}R=\dfrac{(k_0-k)^2}{(k_0+k)^2}\\ T=\dfrac{4k_0k}{(k_0+k)^2}\end{cases}\;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(28)$$

❖ الملاحظ هنا أنه رغم أن طاقة الجسيمات أكبر من طاقة الحاجز $\mathrm{E}>\mathrm{V}_0$ فإن هناك جسيمات تنعكس و هذ غير موجود كلاسيكيا.

➢ **تمرين:** اثبت من الجملة (28) أن $R+T=1$

➢ **الحل:** نضع $\mathcal{K}=\frac{k}{k_0}$ إذن $\mathcal{K}=\sqrt{1-\mathrm{V}_0/\mathrm{E}}$ الجملة (28)

$$\begin{cases} \mathrm{R} = \dfrac{(1-\mathcal{K})^2}{(1+\mathcal{K})^2} \\ \mathrm{T} = \dfrac{4\mathcal{K}}{(1+\mathcal{K})^2} \end{cases} \quad \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots . (29)$$

في المعادلة (29) إذا كان $E = V_0$ فإن $\mathcal{K} = 0$ و هذا يؤدي الى أن معامل الانعكاس $\mathrm{R} = 1$ و معامل النفوذ $T = 0$ و منه $R + T = 1$ أما في الحالة التي عندنا $E \gg V_0$ فإن $\mathcal{K} \simeq 1$ و منه الى أن معامل الانعكاس $R = 0$ و معامل النفوذ $T = 1$ مما يؤدي إلى $R + T = 1$.

.2 اذا كان $E < V_0$

معادلة **Schrödinger** (14)

المنطقة **I** حيث $\boldsymbol{x < 0}$ $\quad V(x) = 0$ تبقى نفسها أي نفس الحلول كما في الحالة الاولى

$$\phi_1(x) = Ae^{\boldsymbol{ik_0}x} + Be^{-\boldsymbol{ik_0}x} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots . . (30)$$

في المنطقة **II** $\quad \boldsymbol{x > 0}$ $\quad V(x) = V_0$ معادلة **Schrödinger** (14) تصبح

$$\text{المنطقة II} \longrightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right)\phi_2(x) = 0$$

نضع $\grave{k} = \frac{\sqrt{2\mathrm{m}(\mathrm{V_0}-\mathrm{E})}}{\hbar}$ المعادلة الاخيرة تصبح

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \grave{k}^2\right)\phi_2(x) = 0 \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots . . (31)$$

معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية حلها معطى من الشكل

$$\phi_2(x) = De^{kx} + Ce^{-kx} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots . . (32)$$

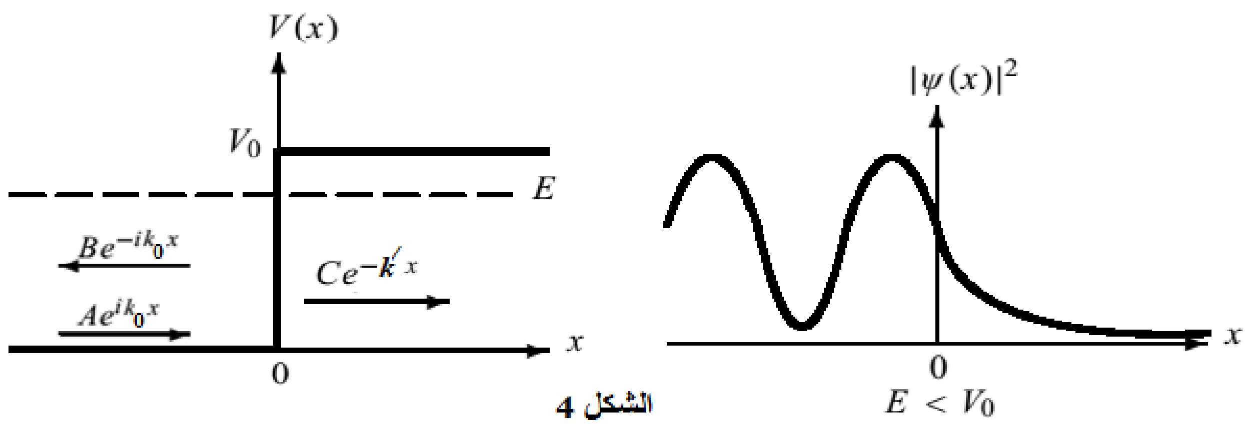
لكي نقبل هذه الحلول يجب أن تكون فيزيائية أي أنها تكون منتهية في اللانهاية أي لما $x \longrightarrow \infty$ *فإن* $\phi_2(x) \longrightarrow 0$. $\Leftarrow D = 0$ إذن

$$\phi_2(x) = Ce^{-\grave{k}x} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots . . (33)$$

هنا $\psi_i = Ae^{ik_0x}$ تعبر عن الموجة الواردة و $\psi_r = e^{-ik_0x}B$ تعبر الموجة المنعكسة و $\psi_t = Ce^{-\grave{k}x}$ تعبر الموجة النافذة

كذلك في هاته الحالة من أجل الحالات المستقرة الدالة الموجية $\psi(x,t)$ هي كالاتي

$$\psi(x,t) = \begin{cases} \phi_1(x)e^{-iwt} = Ae^{i(k_0x-wt)} + Be^{-i(k_0x+wt)} & x < 0 \\ \phi_2(x)e^{-iwt} = Ce^{(\grave{k}x-wt)} & x > 0 \end{cases}$$



الشكل 4

من شروط الاستمرارية لدينا

$$\begin{cases} \phi_1(0) = \phi_2(0) \\ \acute{\phi}_1(0) = \acute{\phi}_2(0) \end{cases} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (34)$$

$$\Rightarrow \quad \begin{cases} A + B = C \\ ik_0(A - B) = -\grave{k}C \end{cases} \dots\dots\dots\dots\dots\dots (35)$$

بحل هذه الجملة

$$\begin{cases} B = \dfrac{k_0 - i\grave{k}}{k_0 + i\grave{k}} A \\ C = \dfrac{2\grave{k}}{k_0 + i\grave{k}} A \end{cases} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (36)$$

و منه نستنتج أن معامل الانعكاس هو

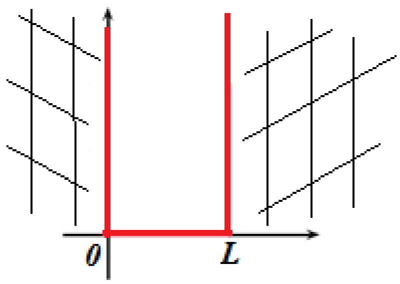
$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{{k_0}^2 + \grave{k}^2}{{k_0}^2 + \grave{k}^2} = 1. \dots\dots\dots\dots\dots (37)$$

أي أنه هناك انعكاس كلي للجسيمات.

في هذه الحالة يوجد اختلاف كبير بالنسبة للدراسة الكلاسيكية لأنه لما $V > E$ لا يوجد نفوذ لأي جسيمة أما في الدراسة الكمية هناك احتمال نفوذ للجسيمات رغم ان طاقة الحاجز اكبر من طاقة الجسيمات

$$P(x) = \left|\psi_t(x)\ \right|^2 = |C|^2 e^{-2\grave{k}x} = \frac{4{k_0}^2}{{k_0}^2 + \grave{k}^2}|A|^2 e^{-2\grave{k}x}. \dots \dots \dots \dots \dots .(38)$$

3.2 البئر الكموني أحادي البعد اللامنته



الشكل 5: البئر الكموني اللانهائي أحادي البعد.

لنعتبر البئر الكموني اللامنته أحادي البعد:

$$\begin{array}{llll} V(x) = 0 & \text{من أجل} & 0 \leq x \leq L & \\ V(x) = \infty & \text{من أجل} & x > L \quad \text{و} \quad x < 0 & \end{array} \quad \dots\dots(39)$$

لنعتبر جسيما مقيدا داخل البئر. كلاسيكيا الجسيم يبقى داخل البئر الكموني ذهابا و إيابا بطاقة و اندفاع ثابتين، و يمكن أن يمتلك الجسيم أي طاقة حسب الشروط الابتدائية.

الدراسة الكمية

خارج البئر تكون الدالة الموجية معدومة الجسيم خارج البئر معدوم $\phi(x) = 0$ لأن $|\phi(x)|^2 = 0$ ، أي أن احتمال تواجدا السيم خارج البئر معدوم. ندرس إذن الحالة $0 \leq x \leq L$، معادلة **Schrödinger** المستقلة عن الزمن:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right).\phi(x) = E.\phi(x)$$

حيث $V(x) = 0$ إذن

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}.\phi(x) = E.\phi(x)\ \Rightarrow$$

$$\frac{d^2}{dx^2}.\phi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}.\phi(x) \dots \dots \dots \dots .(40)$$

معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية حلها من الشكل

$$\phi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots ..(41)$$

حيث C_1 و C_2 ثابتان مركبان و نكتب k من الشكل

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \dots\dots..(42)$$

باستخدام شروط الاستمرارية للدالة الموجية

$$\begin{cases} \phi(0) = 0 \\ \phi(L) = 0 \end{cases}$$

إذن $0 = (0) \Longleftarrow C_1 + C_2 = 0 \Longleftarrow C_1 = -C_2$ و منه حل المعادلة (40) هو

$$\phi(x) = C_1(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iC_1\, sin(kx) = Asin(kx) \dots\dots..(43)$$

أما شرط الاستمرارية بجوار L حيث $\phi(L) = 0$ نجد أن

$$\sin(kL) = 0 \Longrightarrow kL = n\pi\ ; \qquad n \in N^*$$

إذن قيم k مكممة و نكتب

$$k = \frac{n\pi}{\mathrm{L}}$$

حيث n عدد طبيعي موجب. و عليه نستنتج حسب المعادلة 42 أن طاقة الجسيم أيضا مكممة، و منه:

$$E_n = n^2 \frac{\pi\hbar^2}{2m\mathrm{L}^2} \dots\dots..\dots\dots\dots\dots..(44)$$

و نكتب أيضا $E_n = n^2 E$ و عليه فإنه لدينا مجموعة من مستويات الطاقة المتعلقة بـ n (n يدعى عدد كمي) و متعلقة أيضا بمقلوب الكتلة. و منه الدالة الموجية تحقق:

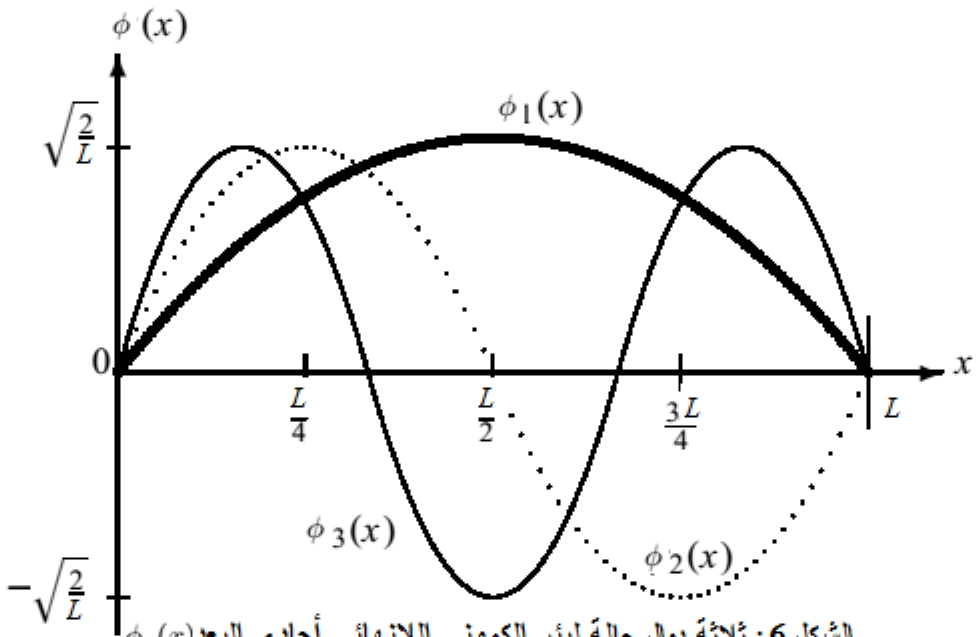
$$\begin{cases} \phi_n(x) = A\, sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \rightarrow \qquad 0 \le x \le L \\ \phi(x) = 0 \qquad\qquad \rightarrow\ \ x < 0 \text{ و } x > L \end{cases} \dots\dots\dots\dots..(45)$$

A يدعي بثابت التقنين و نحصل عليه من معادلة التقنين $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2\, dx = 1$ إذن

$$|A|^2 \int_{-0}^{+L} \left(\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right)^2 dx = 1 \Longrightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \dots\dots\dots..\dots.(46)$$

و منه

$$\phi_n(\mathrm{x}) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots..\dots\dots..(47)$$



الشكل 6 : ثلاثة دوال حالة لبئر الكموني اللانهائي أحادي البعد$\phi_n(x)$

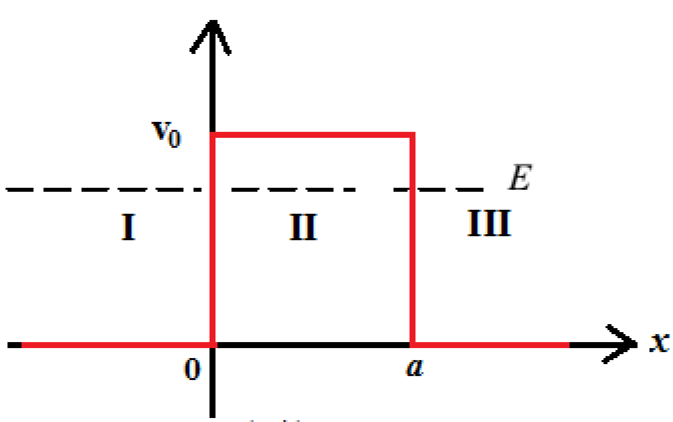
و في الاخير الدوال الموجية الكلية للبئر الكموني اللانهائي أحادي البعد هو

$$\begin{cases} \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) exp\left(-\frac{int}{\hbar}\right) \rightarrow \qquad 0 \leq x \leq L \\ 0 \qquad\qquad x < 0 \text{ و } x > L \end{cases} \quad \dots \dots \dots (48)$$

3.2 ظاهرة النـفق Effet tunnel

لنعتبر مجموعة من الجسيمات الآتية من اليسار إلى حاجز كموني من الشكل

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; & x < 0 \\ V_0 & ; & 0 \leq x \leq a \\ 0 & ; & x > a \end{cases} \dots \dots \dots \dots . \dots \dots (49)$$



الشكل 7

نركز الدراسة فقط على الجسيمات التي طاقتها أقل من طاقة الحاجز. كلاسيكيا كل الجسيمات الآتية من اليسار الى الحاجز ترتد عنه. أما كميا فنقوم بحل معادلة **Schrödinger** المستقلة عن الزمن في المناطق الثلاثة كما هو مبين في الشكل 7.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}.\phi_i(x) = (E - V_i).\phi(x)\ ;\ \ i = 1,2,3 \quad \dots\dots\dots.(50)$$

حيث تعبر i عن المناطق الثلاثة و حلها من الشكل:

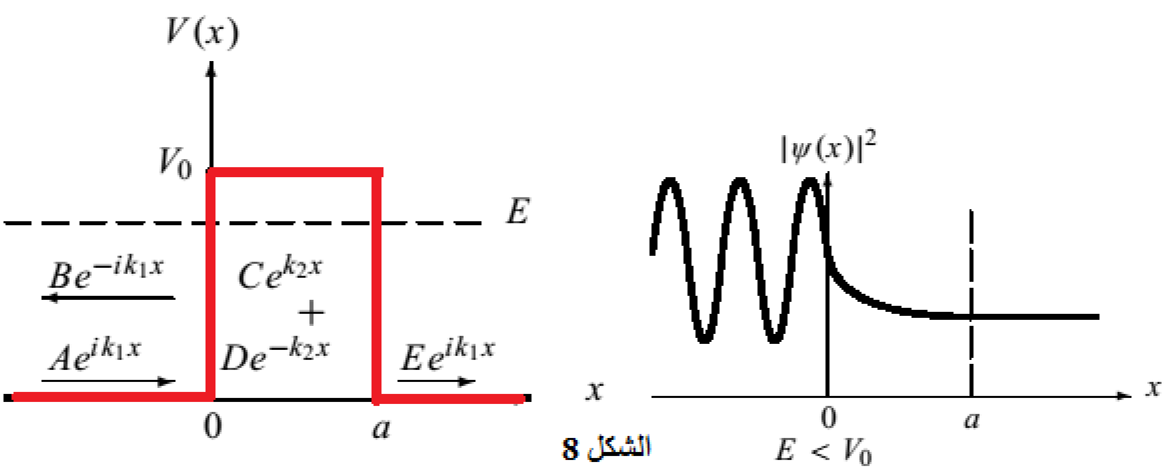
$$\begin{cases} \phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & x \le 0 \\ \phi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}, & 0 < x < a \dots\dots\dots\dots\dots(51) \\ \phi_3(x) = Ee^{ik_1x}\ , & x \ge 0 \end{cases}$$

حيث

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\ ,\dots\dots..,k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

و A, B, C, D, E ثوابت نحصل من شروط الاستمرارية عند سطوح الانقطاع لما $x = 0$ و $x = a$.

الدوال $\psi_i = Ae^{ik_1x}$ تعبر عن الموجة الواردة و $\psi_r = Be^{-ik_1x}$ تعبر الموجة المنعكسة و $\psi_t = Ce^{ik_1x}$ تعبر الموجة النافذة.



الشكل 8

باستخدام شروط الاستمرارية

$$\begin{cases} \phi_1(0) = \phi_2(0)\ ;\ \dfrac{d\phi_1}{dx}(0) = \dfrac{d\phi_2}{dx}(0) \\ \phi_2(a) = \phi_3(a)\ ;\ \dfrac{d\phi_2}{dx}(a) = \dfrac{d\phi_3}{dx}(a) \end{cases} \dots\dots\dots(52)$$

بالتعويض في الجملة (51) نجد

$$\begin{aligned} A+B &= C+D, & ....(53)\\ ik_1(A-B) &= k_2(C-D), & ....(54)\\ Ce^{k_2a}+De^{-k_2a} &= Ee^{ik_1a}, & ....(55)\\ k_2\left(Ce^{k_2a}-De^{-k_2a}\right) &= ik_1Ee^{ik_1a}. & ....(56) \end{aligned}$$

بالتبسيط في المعادلتين الاخيرتين (56) و(55) و هذا بالتعويض نجد الثابتين C,D :

$$C=\frac{E}{2}\left(1+i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{(ik_1-k_2)a},\qquad D=\frac{E}{2}\left(1-i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{(ik_1+k_2)a}\quad ....(57)$$

بتعويض (57) في المعادلتين (54) و (53) نجد:

$$1+\frac{B}{A}=\frac{E}{A}e^{ik_1a}\left[\cosh(k_2a)-i\frac{k_1}{k_2}\sinh(k_2a)\right],$$

$$1-\frac{B}{A}=\frac{E}{A}e^{ik_1a}\left[\cosh(k_2a)+i\frac{k_2}{k_1}\sinh(k_2a)\right].$$

بالجمع و التعويض نجد

$$\begin{aligned} \frac{B}{A} &= -i\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\sinh(k_2a)\left[2\cosh(k_2a)+i\frac{k_2^2-k_1^2}{k_1k_2}\sinh(k_2a)\right]^{-1}\\ \frac{E}{A} &= 2e^{-ik_1a}\left[2\cosh(k_2a)+i\frac{k_2^2-k_1^2}{k_1k_2}\sinh(k_2a)\right]^{-1}. \end{aligned}\quad ....(58)$$

و منه معامل النفوذ و معامل الانعكاس هما على التوالي هما :

$$R=\left(\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\left[4\cosh^2(k_2a)+\left(\frac{k_2^2-k_1^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\right]^{-1}.........(59)$$

$$T=\frac{|E|^2}{|A|^2}=4\left[4\cosh^2(k_2a)+\left(\frac{k_2^2-k_1^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\right]^{-1}\quad ....(60)$$

لدينا من دساتير التحويل $\cosh^2(k_2a)=1+\sinh^2(k_2a)$ المعادلة (60) تصبح

$$T=\left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\right]^{-1}.........................(61)$$

نلاحظ أن $T \neq 0$ و هذا يعني امكانية اجتياز الجسيمات الحاجز الكموني بالرغم من أن طاقة الجسيمات أقل من طاقة الحاجز أى أن هناك احتمال غير معدوم لأن تعبر الجسيمات الحاجز حتى وإن كانت $V \gg E$ و هذا غير ممكن في نظرية الميكانيك الكلاسيكي , تسمى هذه الظاهرة: "**بظاهرة النفق الكموني**" أو مفعول النفق , وتكون نسبة الجسيمات التي تعبر الحاجز أكبر كلما كان عرض الحاجز أصغر.