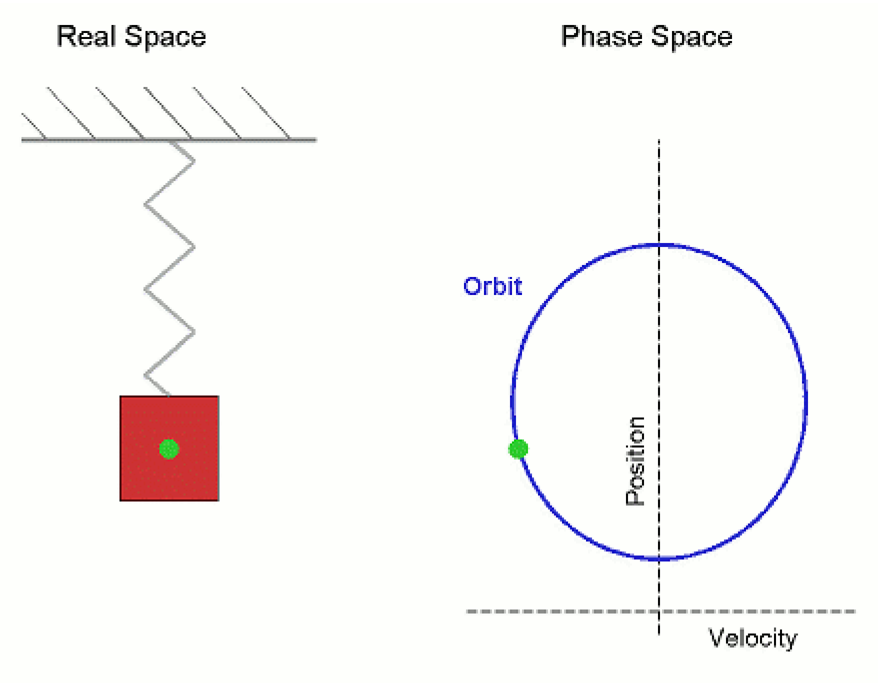
التطبيق الثالث :المذبذب (الهزازة) التوافقي :

1- الدراسة الكلاسيكية : من قوانين نيوتن على المذبذب التوافقي:



$$F = ma = -kx$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + k\,x = 0$$

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \frac{k}{m}x = 0$$

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + w^2 x = 0$$

$$w^2 = \frac{k}{m} \Rightarrow w = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$x = A\cos wt$$

السرعة الزاوية(الترددالزاوي) $w = \omega f = \dfrac{2\pi}{T}$

2- الدراسة الكمية:

معادلة شرودنيغر للهزاز التوافقي حول وضع التوازن على المحور x

باعتبار أن $U=\frac{1}{2}k\,x^2$

الهاملتوني ومعادلة شرودينجر:

$$\widehat{H}=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+U$$

$$\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}k\,\hat{x}^2 \qquad (1)$$

$$\widehat{H}\,\psi=E\,\psi \qquad (2)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{1}{2}k\,x^2\psi=E\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}k\,x^2\right)\psi=0$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{mk}{\hbar^2}x^2\right)\psi=0 \qquad (3)$$

نفرض أن :

$$a=\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad b^2=\frac{mk}{\hbar^2}\Rightarrow b=\frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

نعوض في المعادلة(3) :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\left(a-b^2x^2\right)\psi=0 \qquad (4)$$

نجري تغييراً للمتحول x من الشكل :

$$\xi=\sqrt{b}\,x \quad\Rightarrow\quad x^2=\frac{\xi^2}{b}$$

نفاضل :

$$d\xi = \sqrt{b}\ \ dx$$

نربع العلاقة :

$$d\xi^2 = b\ \ dx^2 \Rightarrow dx^2 = \frac{d\xi^2}{b}$$

نعوض في العلاقة (4)

$$\frac{\dfrac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}}{b} + \left(a - b^2\frac{\xi^2}{b}\right)\psi = 0$$

$$b\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} + \left(a - b\xi^2\right)\psi = 0$$

نقسم المعادلة على b فنجد:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} + \left(\frac{a}{b} - \xi^2\right)\psi = 0 \qquad (5)$$

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية بحاجة إلى حلول والحصول على قيمة $\dfrac{a}{b}$ بفرض أن :

$$\lambda = \frac{a}{b} = \frac{2mE}{\hbar^2} \Big/ \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

$$\lambda = \frac{2mE}{\hbar\sqrt{mk}} = \frac{2E}{\hbar\sqrt{\dfrac{k}{k}}} = \frac{2E}{\hbar w} \qquad (6)$$

العلاقة (6) تبين أن الطاقة تتحدد من تحديد λ في المعادلة (5) ومن المفترض عند إيجاد ψ التابع الموجي الذي تقبلهله المعادلة (5) حلا لها أن نحصل على قيمة λ .

وقد وجد (5)أن λ تساوي

$$\lambda = 2n + 1$$

حيث $n = 0, 1, 2,$

ومن العلاقة (6) نجد أن:

$$\lambda = 2n + 1 = \frac{2E}{\hbar w}$$

أي أن الطاقة هي مكممة:

$$2E_n = \hbar w\,(2n+1)$$

$$E_n = \hbar w\,(n + \frac{1}{2})$$

والهزازة التوافقية مكممة والطاقة تتبع العدد الكمي n

الملاحظ أنه عندما $n = 0$ فإن

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar w$$

وهذا يعني أنه في درجة الصفر المطلق $T = 0K$ فإن الجملة الذرية تهتز بطاقة صفرية بعكس المنظومة التقليدية التي تجمد الجملة في الصفر المطلق أي أن طاقة الصفر تساوي الصفر في الميكانيك الكلاسيكي.

التطبيق الرابع: انعكاس (ارتداد) الجسيمات المادية عند حاجز الجهد محدود الارتفاع :

ابسط الحالات هي ما يسمى بعتبة الجهد كما في الشكل:

يبين الشكل منطقتان

الأولى: I فيها الطاقة :

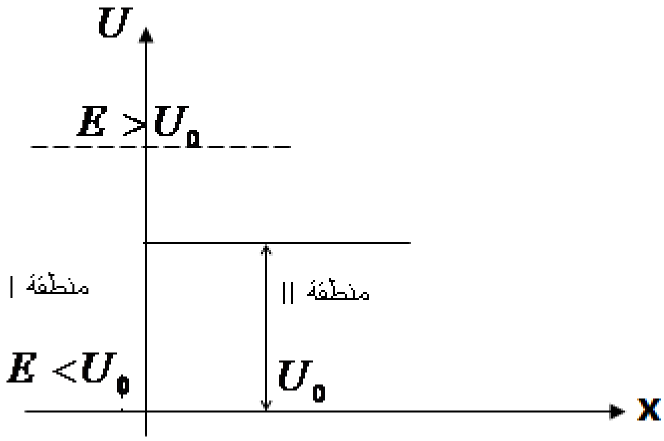
$$U = 0$$

عندما $x < 0$

الثانية : II فيها

$$U = U_0$$

عندما $x > 0$ انظر الشكل



معادلة شرودنيجر في المنطقة I :

$$\widehat{H}\,\psi_1 = E\,\psi_1$$

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right)\psi_1 = E\,\psi_1$$

$$\Leftarrow U = 0$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1 = E\,\psi_1$$

$$\nabla^2\psi_1 \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\nabla^2\psi_1 + \alpha^2\psi_1 = 0$$

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية تقبل التابع التالي حلاً لها :

$$\psi_1(x) = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}$$

يمثل الحد الأول موجه ساقطة ويمثل الحد الثاني موجة منعكسة

معادلة شرودنيغر في المنطقة II :

تميز هنا حالتان:

الحالة الأولى : $E > U_0$

معادلة شرودنيغر:

$$\widehat{H}\,\psi_2 = E\,\psi_2$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + U\,\psi_2 = E\,\psi_2$$

$$\nabla^2\psi_2 + \frac{-2m}{\hbar^2}\left(E - U_0\right)\psi = 0$$

بفرض أن :

$$\alpha'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U_0\right)$$

نجد أن:

$$\nabla^2\psi_2 + \alpha'^2\psi_2 = 0$$

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية تقبل التابع التالي حلاً لها :

$$\psi_2(x) = A_2 e^{i\alpha' x} + B_2 e^{-i\alpha' x}$$

وبما أنه لا يوجد حاجز انعكاس ثاني فإن $B_2 = 0$ أي الحل هو الدالة الموجية :

$$\psi_2(x) = A_2 e^{i\alpha' x}$$

الحالة الثانية : $E < U_0$

معادلة شرودنيغر:

$$\widehat{H}\,\psi_3 = E\,\psi_3$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_3 + U\,\psi_3 = E\,\psi_3$$

$$\nabla^2\psi_3 + \frac{2mU}{\hbar^2}\left(E - U_0\right)\psi_3 = 0$$

بما أن $U_0 > E$ تصبح المعادلة :

$$\nabla^2\psi_3-\frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0-E\right)\psi_3=0$$

بفرض أن :

$$\lambda^2=\frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0-E\right)$$

ومنه نجد أن:

$$\nabla^2\psi_3+\lambda^2\psi_3=0$$

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية حلها أسي:

$$\psi_3=A_3e^{+\lambda x}+B_3e^{-\lambda x}$$

وكون الجسيم متجه نحو اليمين في المنطقة الثانية والتابع يجب أن يكون في كل مكان محدود القيمة وأن $e^{+\lambda x}$ يتزايد الى اللانهاية وهو غير محدد فانه يستبعد أي الدالة التي تصف هذه الحالة هي:

$$\psi_3=B_3e^{-\lambda x}$$

تطبيق الشروط الحدية بحيث أن تكون الدوال مستمرة ومشتقاتها مستمرة في المنطقتين I و II وإيجاد الثوابت(السعات)

(1) الحالة الأولى:

$$E>U_0$$

$$\psi_1=A_1e^{i\alpha x}+B_1e^{-i\alpha x}$$

$$\psi_2=A_2e^{i\alpha' x}+B_2e^{-i\alpha' x}=A_2e^{i\alpha' x}$$

الشروط الحدية:

الدوال عند $x=0$

$$\psi_1(0)=\psi_2(0)$$

ومنه :

$$\psi_1(0)=A_1+B_1$$

$$\psi_2(0)=A_2$$

$$A_1 + B_1 = A_2 \qquad (1)$$

مشتقات الدوال عند $x = 0$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

نشتق الدوال:

$$\psi_1' = i\alpha A_1 e^{i\alpha x} - i\alpha B_1 e^{-i\alpha x}$$

$$\psi_2' = i\alpha' A_2 e^{i\alpha x}$$

الشرط الحدي للمشتقات:

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

$$i\alpha A_1 - i\alpha B_1 = i\alpha' A_2$$

$$\alpha\left(A_1 - B_1\right) = \alpha' A_2 \qquad (2)$$

بحل (1) و (2) حلاً مشترك :

$$A_1 + B_1 = A_2 \qquad (1)$$

$$\alpha\left(A_1 - B_1\right) = \alpha' A_2 \qquad (2)$$

نستخرج A_2 و B_1 بالنسبة لـــ A_1

من (2):

$$B_1 = \frac{\alpha A_1 - \alpha' A_2}{\alpha} \Leftarrow \alpha A_1 = \alpha B_1 + \alpha' A_2 \qquad (3)$$

نعوض (3) في (1)

$$A_1 + \frac{\alpha A_1 - \alpha' A_2}{\alpha} = A_2$$

$$\alpha A_1 + \alpha A_1 = \alpha A_2 + \alpha' A_2$$

$$2\alpha A_1 = A_2\left(\alpha + \alpha'\right)$$

$$A_2 = \frac{2\alpha A_1}{\alpha + \alpha'} \qquad (4)$$

ومنه :

$$B_1 = \frac{\alpha A_1 - \alpha'\left(\frac{2\alpha A_1}{\alpha+\alpha'}\right)}{\alpha}$$

$$B_1 = \frac{\alpha A_1 - \frac{2\alpha\alpha' A_1}{\alpha+\alpha'}}{\alpha}$$

$$B_1 = \frac{(\alpha+\alpha')\alpha A_1 - 2\alpha\,\alpha' A_1}{(\alpha+\alpha')\alpha}$$

$$= \frac{(\alpha+\alpha')A_1 - 2\alpha' A_1}{\alpha+\alpha'}$$

$$= \frac{(\alpha+\alpha'-2\alpha')A_1}{\alpha+\alpha'}$$

$$B_1 = \frac{(\alpha-\alpha')A_1}{\alpha+\alpha'}$$

ومنه الدوال الموجية :

$$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + \frac{(\alpha-\alpha')A_1}{\alpha+\alpha'} e^{-i\alpha x} \qquad (5)$$

لاحظ أن سعة الموجة المنعكسة لا تساوي الصفر وهذا يتعارض مع الميكانيك الكلاسيكي الذي يقول ان الموجة لاتنعكس في هذه الحالة $E > U_0$.

$$\psi_2 = \frac{2\alpha A_1}{\alpha+\alpha'} e^{i\alpha' x} \qquad (6)$$

(2) الحالة الثانية:

$$E < U_0$$

$$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}$$

$$\psi_3 = B_3 e^{-\lambda x}$$

بما أن

$$\lambda = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

وأن :

$$\alpha' = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

$$\alpha' = \frac{\sqrt{-2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

نجد أن:

$$i\alpha' = -\lambda \Leftarrow \alpha' = i\lambda \Leftarrow \lambda = \frac{\alpha'}{i}$$

ومنه الشروط الحدية:

$$\psi_1(0) = \psi_{30}(0)$$

$$A_1 + B_1 = B_3 \qquad (1)$$

مشتقات الدوال عند $x = 0$ وتطبيق الشرط الحدي:

$$\psi_1'(0) = \psi_3'(0)$$

$$i\alpha A_1 - i\alpha B_1 = -\lambda B_3$$

$$-\alpha A_1 + \alpha B_1 = -i\lambda B_3$$

$$\alpha(B_1 - A_1) = -i\lambda B_3 = -\alpha' B_3$$

$$\alpha(A_1 - B_1) = \alpha' B_3$$

وبما أن :

$$A_1 + B_1 = B_3$$

$$\alpha(A_1 - B_1) = \alpha'(A_1 + B_1)$$

$$\alpha A_1 - \alpha B_1 = \alpha' A_1 + \alpha' B_1$$

$$\alpha A_1 - \alpha' A_1 = \alpha B_1 + \alpha' B_1$$

$$B_1 = \frac{(\alpha - \alpha')A_1}{\alpha + \alpha'} = \frac{(\alpha - i\lambda)A_1}{\alpha + i\lambda} \qquad (2)$$

ومنه نجد B_3من العلاقة (1):

$$B_3 = A_1 + \frac{(\alpha - \alpha')A_1}{\alpha + \alpha'} \Rightarrow$$

$$B_3 = \frac{2\alpha A_1}{\alpha + i\lambda} \qquad (3)$$

ومنه الدوال الموجية الموافقة :

$$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + \frac{(\alpha - i\lambda)}{\alpha + i\lambda} A_1 e^{-i\alpha x}$$

$$\psi_3 = B_3 e^{-\lambda x}$$

$$\psi_3 = \frac{2\alpha A_1}{\alpha + i\lambda} e^{-\lambda x}$$

يبين التابع ψ_3 أن هناك احتمال لتواجد الجسيم خلف الحاجز لان الاحتمال كما هو معلوم في ميكانيكا الكم يأتي من مربع التابع الموجي ψ_3 :

$$(\psi_3)^2 = \frac{4\alpha^2 A_1^2}{\alpha^2 + \lambda^2} e^{-2\lambda x}$$

وهذا الاحتمال لايساوي الصفر ،وهذا تناقض آخر مع الدراسة الكلاسيكية حيث لا يمكـــن لجسيم طاقته أقل من طاقة حاجز الجهد $E < U_0$ أن يتخطاها. فـــي حـــين أن احتمـــال تواجد الجسيم كمياً بعد الحاجز محتمل وهو ما يسمى بالمبدأ النفقي (الأنفاق).

وهذا ما نلاحظه في بلورات الجوامد حيث أن الالكترونات الداخلية تنتقل من ذرة إلى ذرة مع العلم أن طاقتها أقل من ارتفاع حاجز الجهد.