جامعة الانبار
كلية التربية الأساسية / حديثة
قسم العلوم العامة / فرع الفيزياء

اسم التدريسي: م.م. عبدالرحمن ظافر صباح

المرحلة الدراسية: الثالثة

الفصل الدراسي: الاول

اسم المادة باللغة العربية: ميكانيك الكم

اسم المادة باللغة الإنكليزية: Quantum Mechanics

اسم المحاضرة باللغة العربية: معادلة شرودنكر

اسم المحاضرة باللغة الإنكليزية: Schrodinger Equation

2-4- معادلة شرودنكر (Schrodinger Equations):

ان المعادلة التي تصف تطور الدالة الموجية $\Psi_{(r,t)}$ مع الزمن وتسمى معادلة شرودنكر وهي عصب ميكانيكا الكم وتناظر بالضبط قانون نيوتن الثاني في الميكانيكا الكلاسيكية والي يصف تطور حالة الجسم العادي مع الزمن .

2-4-1- معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن (time dependent Schrödinger equation (T.D.S.E))

لاشتقاق معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن نشتق المعادلة التالية ولبعد واحد(x):

$$\psi(x,t)=\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)} \qquad \text{.......................(1)}$$

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}\right)=\left(\frac{i}{\hbar}p_x\right)\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}$$

$$\Rightarrow\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}=\frac{i}{\hbar}p_x\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}=\frac{i}{\hbar}p_x\psi(x,t) \qquad \text{.......................(2)}$$

نشتق معادلة (2) بالنسبة ل x

$$\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}=\frac{-1}{\hbar^2}p_x^2\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}=\frac{-1}{\hbar^2}p_x^2\psi(x,t)$$

بالضرب ب ($-\hbar^2$) نحصل على

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}=p_x^2\psi(x,t) \qquad \text{.......................(3)}$$

نشتق معادلة(1) بالنسبة للزمن

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{-i}{\hbar}E\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}$$

بالضرب ب ($i\hbar$)نحصل على

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=E\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)} \qquad \text{.......................(4)}$$

نعوض معادلة (1) في معادلة (4)

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=E\psi(x,t) \qquad \text{.......................(5)}$$

بما انه معادلة الطاقة الكلية هي $E = T + V$ أو $E = \frac{p^2}{2m} + V$ وبضربها $\psi(x,t)$ سنحصل على:

$$E\psi(x,t) = \frac{p^2\psi(x,t)}{2m} + V(\mathrm{x})\psi(x,t) \qquad ....(6)$$

نعوض معادلة (3) ومعادلة (5) في معادلة (6) ونحصل على :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(\mathrm{x})\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(\mathrm{x})\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \qquad ....(7)$$

تدعى المعادلة (7) بمعادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن وهي معادلة ذات اهميه كبيرة في ميكانيك الكم وفي ثلاث ابعاد تصبح بالصيغة الرياضية التالية:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t) + V(r)\psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) \qquad ....(8)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r)\right]\psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t)$$

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r)$$

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\therefore \hat{\mathrm{H}}\psi(r,t) = \hat{E}\psi(r,t) ....(9)$$

2-4-2-معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن(Time Independent Schrödinger Equation) (T.I.S.E)

لإيجاد معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن يمكن كتابة معادلة الموجة الواقفة (معادلة رقم 1) بالشكل التالي :

$$\left.\begin{aligned} \psi(x,t) &= \psi_{\circ} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \\ \psi(x,t) &= \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ \psi(x,t) &= \psi(x)\psi(t) \end{aligned}\right\}$$

[معادلة الموجة الواقفة](9)..............

نعوض معادلة رقم (9) في معادلة رقم (7) :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + V(\mathrm{x})\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = E\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(\mathrm{x})\psi(x)\right]\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}} = E\psi(x)\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

$$\therefore \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\mathrm{x})\right]\psi(x) = E\psi(x) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(10)$$

معادلة رقم (10) هي معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن (T.I.S.E) ويمكن كتابتها بصورة ثلاث ابعاد وكما يلي:

$$\Rightarrow\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\left(\mathrm{E}-V\ (r)\right)\right]\psi(r)=0$$

بالضرب ب $\frac{2m}{\hbar^2}$ سنحصل على:

$$\left[\nabla^2+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\mathrm{E}-V\ (r)\right)\right]\psi(r)=0$$

$$\left[\nabla^2\psi(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\mathrm{E}-V\ (r)\right)\psi(r)\right]=0$$ ....(11)**[T.I.S.E in 3-D]**

مثال / من معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن اثبت ان $\acute{p}=\mp i\hbar\nabla$ ؟

الحل:

معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V\right)\psi=E\psi$$

ولكن E هي الطاقة الكلية وتساوي :

$$E=\frac{P^2}{2m}+V$$

وبمقارنة المعادلتين نحصل على :

$$\frac{P^2}{2m}+V=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)$$

وبالتبسيط نحصل على :

$$P^2=-\hbar^2\nabla^2$$

وبالجذر نحصل على :

$$\boldsymbol{P} = \hbar\nabla\sqrt{-1} = \mp i\hbar\nabla$$

مثال/ما مقدار طاقة جسيم موصوف بدالة موجة $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ ويتحرك ضمن الفترة $0\le x\le a$؟ وما مقدار مربع زخم الجسيم ؟

الحل/

$$V=0$$

$$\hat{A}\psi_n=a_n\psi_n$$

$$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)=E_n\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{n\pi}{a}\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]=E_n\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]$$

$$\frac{+\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{n^2\pi^2}{a^2}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)=E_n\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2}\cancel{\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]}=E_n\cancel{\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]}$$

$$\therefore E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

H.W: مربع زخم الجسيم

مثال/ جسم مقيد الحركة بالفترة $0 \le x \le a$ في جهد $V(x)=0$ اثبت ان :

$\psi(x)=A\sin(kx)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ تحقق معادلة شرودنكر وان $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ ؟

الحل/

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=i\hbar\left[A\sin(kx)(-\frac{iE}{\hbar})e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\right]=E\psi(x,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[kA\cos(kx)e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-k^2A\sin(kx)e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\right]$$

$$=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi(x,t)$$

$$E\psi(x,t)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi(x,t)$$

$$\Rightarrow E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

5-2- المؤثرات (Operators)

المؤثر:- هو عبارة عن عملية رياضية تجرى على دالة فتحولها الى دالة اخرى أي ان:

$$\hat{A}\psi = \varphi$$

ويرمز لها بالرمز

$$\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}, \hat{p}, \hat{E} \ \ldots$$

مثال/ اذا كانت $\hat{A} = x$ و $\psi = x^3$ ف جد $\hat{A}\psi$؟

الحل/ $\hat{A}\psi = xx^3 = x^4 = \phi$

مثال/ اذا كانت $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ و $\psi = x^3$ ف جد $\hat{A}\psi$؟

الحل/ $\hat{A}\psi = \frac{\partial}{\partial x} x^3 = 3x^3 = \phi$

كافة المشاهدات الفيزيائية (المقادير الفيزيائية،المتحولات الديناميكية) تمثل رياضياً بالمؤثرات، الجدول التالي يعطي أهم المتحولات الديناميكية:

المشاهدات الفيزيائية (Observables)	التمثيل في الميكانيك الكلاسيكي(C.M.R)	التمثيل في الميكانيك الكمي (Q.M.R)
الموقع (Position)	x	$\hat{x}$
الزخم (Momentum)	$p_x = m\dot{x}$	$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

الطاقة الحركية Kinetic) (energy	$T=\frac{p^2}{2m}$	$\hat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=\frac{-\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
الطاقة الكلية (Total energy)	$E=T+V$	$\hat{E}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
الهاملتوني (Hamilton)	$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$	$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$

2-5-1-العمليات الرياضية الخاصة بالمؤثرات

1- توزيع المؤثرات: يتم التوزيع اسوة بالتوزيع الاعتيادي كما في المثال التالي

$$A=1+\frac{\partial}{\partial x}$$

$$sol:$$

$$Af=(1+\frac{\partial}{\partial x})f$$

$$Af=(f+\frac{\partial}{\partial x}f)$$

$$Af=f+f'$$

2- ضرب المؤثرات: يتم الضرب من القريب فقط كما في المثال التالي

$$B=\frac{\partial}{\partial x}x$$

$$sol:$$

$$Bg=(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{x})g$$

$$Bg=(\frac{\partial}{\partial x}xg)$$

$$Bg=x'g+g$$

3- يقال ان المؤثرات متساوية اذا كانت نتيجة تأثيرها متساوي كما في المثال التالي

$$D = 1 + x \frac{\partial}{\partial x}$$

$sol:$

$$Dg = (1 + x \frac{\partial}{\partial x})\, g$$

$$Dg = g + x \frac{\partial}{\partial x} g$$

$$Dg = g + x\, g'$$

$$\therefore D = B$$