بخش ٤

Solution of the Schrödinger Equation for Four Specific problems

حل معادله‌ی شرودینگر برای ٤ مسئله‌ی ویژه و خاص

4.1. Free Electrons

٤ـ١ : الکترون های آزاد

در قدم اول فرض می‌کنیم الکترون آزادانه به سمت $+x$ انتشار یابد. یعنی بر الکترون پتانسیلی اثر نکند.

$V=0$ در نتیجه معادله‌ی شرودینگر (3.1) به شکل زیر می‌شود:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

فرض: $\psi=\psi(x)$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad (4.1)$$

این معادله، معادله‌ی دیفرانسیل یک ارتعاشی نامیرا است که تناوب فضای (مکانی) دارد. حل آن عبارت است از

$$\psi(x) = A e^{i\alpha x} \qquad (4.2)$$

که در آن

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \qquad (4.3)$$

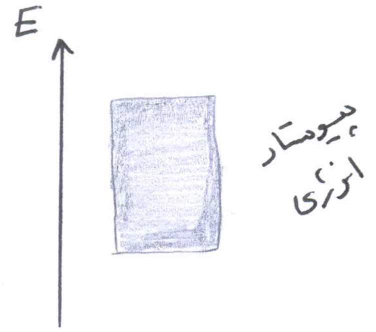
جواب معادله‌ی (4.1) به صورت $\psi = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}$ است ولی چون ما فقط انتشار به سمت $+x$ موردنظرمان است، جواب را به صورت (4.2) در نظر گرفتیم

$$\Psi(x) = Ae^{i\alpha x}\cdot e^{i\omega t}$$

از رابطه‌ی (4.3) داریم:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \qquad (4.6)$$

از آنجایی که برای الکترون آزاد شرایط مرزی در نظر نگرفتیم، همه‌ی مقادیر انرژی مجاز هستند، یعنی یک پیوستار انرژی (energy continuum) مانند شکل 4.1 داریم.



شکل 4.1 : پیوستار انرژی الکترون آزاد (با شکل 4.3 مقایسه شود)

قبل از اینکه ادامه دهیم رابطه‌ی $E=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$ را بدست می‌آوریم.

4.3 $$\alpha=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\frac{p^2}{2m}}=\sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2}}=\frac{p}{\hbar}=\frac{2\pi}{\lambda}=k \qquad (4.7)$$

2.3 $$\lambda p = h$$

1.4 $$E_{kin}=\frac{p^2}{2m}$$

$$\downarrow$$

$$\alpha = k$$

پس داریم

$$\boxed{E=\frac{\hbar^2}{2m}k^2} \qquad (4.8)$$

k بردار موج است.

$k \propto \vec{p}=m\vec{v} \xrightarrow{\text{تکانه و سرعت بردار هستند}}$ k هم بردار است $\longrightarrow \vec{k}=k_x\hat{i}+k_y\hat{j}+k_z\hat{k}$

$$\boxed{|\vec{k}|=\frac{2\pi}{\lambda}} \qquad (4.9)$$

$\vec{k}$_vector $\longrightarrow$ خواص موجی الکترون را توصیف می‌کند

$\vec{p}$-vector $\longrightarrow$ خواص ذره‌ای الکترون را توصیف می‌کند

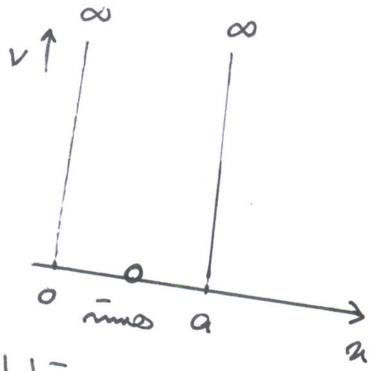
$\vec{k}$ و $\vec{p}$ در یک فاکتور نسبت $\frac{1}{\hbar}$ با هم فرق دارند.

4.2. Electron in a Potential well (Bound Electron)

۴-۲ الکترون در یک چاه پتانسیل

حال فرض می‌کنیم الکترون به هسته‌ی اتمی مقید است.

برای سادگی فرض می‌کنیم الکترون آزادانه بین دو سد پتانسیل بی نهایت بتواند حرکت کند.



سد های پتانسیل به الکترون اجازه نمی‌دهد تا از چاه پتانسیل فرار کند.

این بدین معناست که:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ 0 & x \geq a \end{cases}$$

در اینجا هم برای سادگی فقط راستای x را در نظر می‌گیریم. همچنین به‌ای
علت که الکترون از دیوار برمی‌گردد، راستای انتشار الکترون هم می‌تواند
باشد و هم می‌تواند $-x$ باشد.

پتانسیل داخل چاه را صفر در نظر می‌گیریم:

پس:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (4.10)$$

از آنجایی‌که انتشار به هر دو سمت $+x$ و $-x$ وجود دارد پس

$$\psi = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \qquad (4.11)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \qquad (4.12)$$

که در آن

ثابت های A و B را می‌توانیم با به کاربستن شرایط مرزی (boundary conditions) به دست آوریم:

1) $x=0 \longrightarrow \psi=0$

$$\psi = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \longrightarrow 0 = Ae^{0} + Be^{0} \rightarrow \boxed{A=-B}$$

2) $x=a \longrightarrow \psi=0 \longrightarrow 0 = Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a}$

$$0 = Ae^{i\alpha a} - Ae^{-i\alpha a}$$

$$0 = A\left(e^{i\alpha a} - e^{-i\alpha a}\right) \qquad (4.14)$$

معادله ی اویلر عبارت است از: $\sin\varphi = \frac{1}{2i}\left(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right)$

(پیوست ۲ کتاب)

$$2Ai \cdot \sin\alpha a = 0 \qquad (4.16)$$

نمی‌تواند صفر باشد.

وقتی معتبر است که

$$\sin\alpha a = 0$$

یعنی

$$\alpha a = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, 3, \qquad (4.17)$$

پس:

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2} \qquad n = 1, 2, 3 \qquad (4.18)$$

($n=0$ را حذف کردیم چراکه $\psi=0$ را نتیجه می‌دهد یعنی عدم وجود موج برای الکترون)

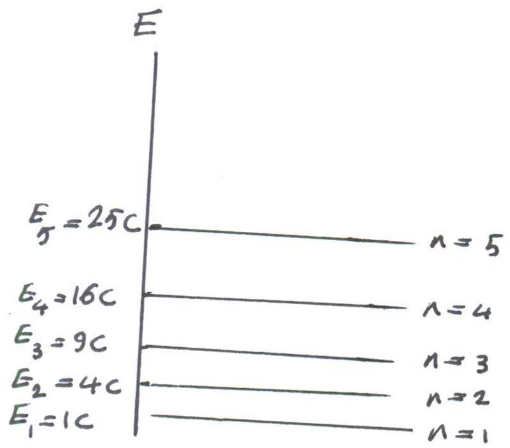
فرق این حالت با حالت قبلی (4.1) در این است که:

اعمال شرایط مرزی ⟵ انرژی های خاصی جواب معادله ی شرودینگر هستند E_n

در واقع همه ی انرژی ها مجاز نیستند و یک پیوستار انرژی نداریم. (شکل 4.3)

عدم وجود شرایط مرزی ⟵ پیوستار انرژی

مقادیر مجاز انرژی، ترازهای انرژی نامیده می شوند. Energy levels



شکل (4.3) مقادیر مجاز انرژی وقتی که الکترون به هسته ی اتم مقید است.

$E_1 =$ Zero-point energy $\qquad c = \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$

E_n ضرایبی از مقدار $c = \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ است ⟵ کوانتیزه شدن انرژی
Energy quantization

$n = 1$ ⟵ E_1 ⟵ Zero-point energy

کمترین مقدار انرژی صفر نیست و کمی از آن بیشتر است که آن را انرژی نقطه ی صفر می نامیم.

به دست آوردیم

$$\psi = 2Ai \cdot \sin\alpha x$$

همچنان A را نمی‌دانیم.

از رابطه‌ی زیر برای به دست آوردن A استفاده می‌کنیم.

$$\psi^* = -2Ai \sin\alpha x$$

$$\psi\psi^* = 4A^2 \sin^2\alpha x \qquad (4.21)$$

$$\int_0^a \psi\psi^* dx = 1$$

$$\int_0^a \psi\psi^* dx = 4A^2 \int_0^a \sin^2(\alpha x)dx = \frac{4A^2}{\alpha}\left[-\frac{1}{2}\sin\alpha x\cos\alpha x + \frac{\alpha x}{2}\right]_0^a = 1$$

$$\frac{4A^2}{\alpha}\left[-\frac{1}{2}\sin\alpha a\cos\alpha a + \frac{\alpha a}{2} - 0 - 0\right] = 1 \qquad \alpha a = n\pi$$

$$\frac{{}^{2}\cancel{4}A^2}{\cancel{\alpha}} \frac{\cancel{\alpha} a}{\cancel{2}} = 1 \longrightarrow A^2 = \frac{1}{2a} \longrightarrow A = \sqrt{\frac{1}{2a}} \qquad (4.25)$$

پس

$$\boxed{\psi = \sqrt{\frac{2}{a}}\, i \sin\alpha x}$$

اگر این مسئله را برای حالت سه‌بعدی حل کنیم، خواهیم داشت: Electron in a box

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \qquad (4.26)$$

$$n_x = n_y = n_z = 1 \longrightarrow$$ اولین تراز انرژی

$$(n_x, n_y, n_z) = (1,1,2), (1,2,1), (2,1,1) \longrightarrow$$ دومین تراز انرژی

شامل سه تراز انرژی هم انرژی یا تبهگن →

"degenerate" States ← حالت‌های تبهگن

در شکل 4.4 روابط 4.19 و 4.21 رسم شده است.

$$\psi = 2Ai \cdot \sin \alpha x \quad \& \quad \psi\psi^* = 4A^2 \sin^2 \alpha x$$

Fig 4.4(a) ← تشکیل امواج الکترونی ایستاده بین دو دیواره ی چاه پتانسیل — Standing electron waves

در شکل 4.4 (a)

$n=1 \qquad \frac{\lambda}{2} = a$

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

$n=3 \qquad \frac{3\lambda}{2} = a$

(Fig 4.4b ← $\psi\psi^*$ احتمال حضور الکترون در یک مکان مشخص

در حالت کلاسیک الکترون می تواند بین دو دیوار جابجا شود و تابع احتمال آن بین دو دیواره و در فاصله a مقدار یکسانی است.

در مکانیک موجی انحراف از رفتار کلاسیک به خوبی مشهود است مخصوصاً وقتی $n=1$ است.

برای انرژی های بالا یا مقادیر n بالا مقادیر مکانیک موجی $\psi\psi^*$ به مقادیر کلاسیکی می رسد.

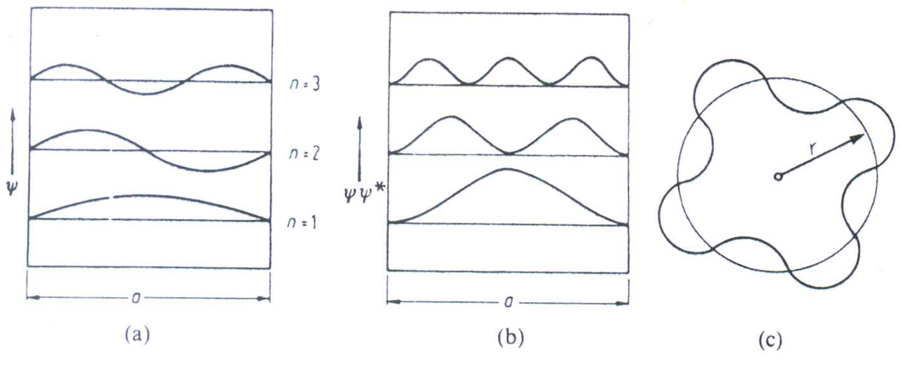


Figure 4.4. (a) ψ function and (b) probability function $\psi\psi^*$ for an electron in a potential well for different n-values. (c) Allowed electron orbit of an atom.

Rutherford model ⟵ (Fig 4.4c

↓

الکترون‌ها بدین صورت که در مدارهای جدا از هم دور هسته حرکت می‌کنند، توصیف می‌شوند.

پیشنهاد Niels Bohr در سال ۱۹۱۳

الکترون وقتی یک مدار را دور می‌زند نباید اختلاف فازی را تجربه کند و به نقطه‌ی اول برمی‌گردد.

برای این منظور باید داشته باشیم:

$$2\pi r = n\lambda \quad (4.22)$$

یعنی مدارها هر شعاعی نمی‌توانند داشته باشند و فقط شعاع‌هایی که در رابطه‌ی (4.22) صدق می‌کنند مجاز هستند.

$$r = \frac{\lambda}{2\pi} n$$

شعاع‌های مجاز

تراز‌های انرژی مجاز

$$V = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

حل معادله‌ی شرودینگر برای اتم هیدروژن با

$$\longrightarrow E = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0 \hbar)^2}\frac{1}{n^2} = -13.6 \cdot \frac{1}{n^2}\ (eV)$$

جواب

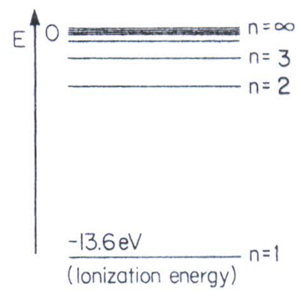


Figure 4.5. Energy levels of atomic hydrogen. E is the binding energy.

۴-۳ سد پتانسیل محدود (اثر تونل زنی)

4.3 Finite Potential Barrier (Tunnel Effect)

فرض می‌کنیم، الکترون آزاد که در جهت $+x$ انتشار می‌یابد با یک سد پتانسیل که انرژی پتانسیل آن V_0 (ارتفاع سد) است، برخورد کند. مقدار V_0 از انرژی کل E بیشتر است. (شکل 4.6)

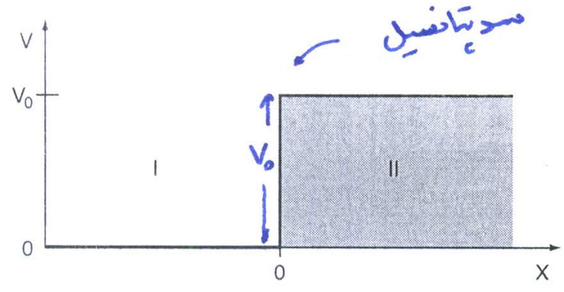


Figure 4.6. Finite potential barrier.

باید دو معادله‌ی شرودینگر حل کنیم، معادله‌ی شرودینگر منطقه‌ی I و معادله‌ی شرودینگر منطقه‌ی II

I) $x<0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \quad (4.27) \longrightarrow \psi_{I} = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \quad (4.29) \qquad \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (4.30)$$

II) $x>0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi = 0 \quad 4.28 \longrightarrow \psi_{II} = Ce^{i\beta x} + De^{-i\beta x} \quad (4.31)$$

$$\beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)} \quad (4.32)$$

چون $E-V_0<0$ $\longleftarrow$ β موهومی می‌شود. $\longleftarrow$ به همین دلیل پارامتر جدید γ را معرفی می‌کنیم.

$$\beta = \sqrt{(-1)\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)} = \sqrt{i^2\frac{2m}{\hbar^2}(V-E_0)} = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E_0)} = i\gamma$$

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E_0)}$$

داریم

$$\beta = i\gamma$$

پس:

$$\psi_{II} = Ce^{i i \gamma x} + De^{-i i \gamma x} = Ce^{-\gamma x} + De^{+\gamma x}$$

$$\boxed{\psi_{II} = Ce^{-\gamma x} + De^{\gamma x}}$$

- استفاده از شرایط مرزی:

$$x \to \infty \Rightarrow \psi_{II} = C \times 0 + D \times \infty$$

یعنی در $x \to \infty$ مقدار $\psi_{II} \to \infty$ و این بدان معناست که $\psi\psi^*$ احتمال حضور الکترون بینهایت می‌شود که درست نیست. برای حل این مشکل، D را باید برابر صفر قرار دهیم: پس $D=0$:

$$\psi_{II} = Ce^{-\gamma x}$$

$\psi_{II} = Ce^{-\gamma x}$ نشان می‌دهد که ψ در منطقه‌ی II به صورت نمایی کاهش می‌یابد. هرچه γ بیشتر باشد (یا V_0 بیشتر باشد) کاهش در x کمتری حاصل می‌شود.

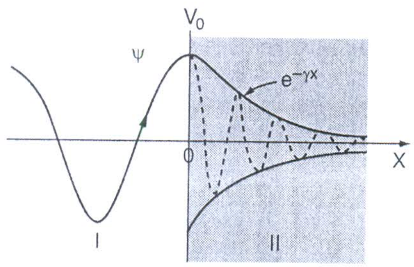


Figure 4.7. ψ-function (solid line) and electron wave (dashed line) meeting a finite potential barrier.

نفوذ تابع موج در سد پتانسیل، تونل زنی (tunneling) نامیده می‌شود.

تونل زنی یک اثر مکانیک کوانتومی است.

در کلاسیک ذره اگر انرژی جنبشی‌اش از V_0 کمتر باشد، کاملاً برمی‌گردد.

برای حل کامل باید شرایط مرزی زیر را در نظر بگیریم:

۱) پیوستگی تابع موج: $x=0$ در $\longrightarrow$ $\psi_I = \psi_{II}$

$$A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x} = C e^{-\gamma x}$$

$$\Big\downarrow x=0$$

$$\boxed{A + B = C}$$

۲) پیوستگی شیب تابع موج: $x=0$ در $\longrightarrow$ $\dfrac{d\psi_I}{dx} = \dfrac{d\psi_{II}}{dx}$

$$A i\alpha e^{i\alpha x} - B i\alpha e^{-i\alpha x} = -\gamma C e^{-\gamma x}$$

$$\Big\downarrow x=0$$

$$\boxed{A i\alpha - B i\alpha = -\gamma C}$$

$$\begin{cases} A+B = C \\ A i\alpha - B i\alpha = -\gamma C \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} A+B = C \\ A - B = \dfrac{-\gamma}{i\alpha} C \end{cases}$$

$$\downarrow$$

$$2A = C\left(1 - \frac{\gamma}{i\alpha}\right)$$

$$A = \frac{C}{2}\left(1 + \frac{i\gamma}{\alpha}\right)$$

$$B = \frac{C}{2}\left(1 - i\frac{\gamma}{\alpha}\right)$$

توابع موج را برحسب ثابت C می توان نوشت.

اگر تونل زنی را در نظر بگیریم و سد پتانسیل محدود در نظر گرفته شود، شکل 4.4(a) به شکل زیر اصلاح می شود.

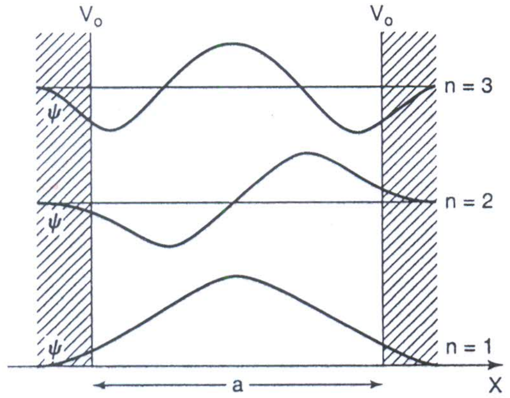


Figure 4.8. Square well with finite potential barriers. (The zero points on the vertical axis have been shifted for clarity.)

افزایش V_0 ⟵ تونل زنی کاهش می یابد.

$V_0 \to \infty$ ⟵ تونل زنی نداریم.