The Schrödinger Equation   بخش ۳

معادله‌ی شرودینگر

در اینجا قصد نداریم معادله شرودینگر را اثبات کنیم.

از معادله‌ی شرودینگر به عنوان یک معادله‌ی بنیادی برای توصیف

خواص موجی الکترون بهره می‌بریم.

3.1. The Time-Independent Schrödinger Equation

۳-۱ معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان

وقتی خواص اطراف الکترون با زمان تغییر نمی‌کند یا در شرایط پایا

از معادله شرودینگر مستقل از زمان استفاده می‌کنیم.

در این حالت انرژی پتانسیل یا انرژی پتانسیل سد (potential barrier)، V

فقط به مکان بستگی دارد و به زمان بستگی ندارد.

بنابراین معادله شرودینگر مستقل از زمان، معادله‌ی یک ارتعاش (vibration)

$\mathcal{H}\psi = E\psi$

به شکل زیر است:

$\left(\frac{p^2}{2m} + V\right)\psi = E\psi$

جرم الکترون

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \qquad (3.1)$$

$p \triangleq -\hbar i \nabla$

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

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

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \qquad (3.2)$$

$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + (E-V)\psi = 0$

$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0$

انرژی کل سیستم $\leftarrow E = E_{kin} + V \qquad (3.3)$

$E \longrightarrow$ انرژی‌های مجاز سیستم

...گاه تابع موج را به صورت ψ کوچک نشان دادیم (مانند رابطه 3.1)
فقط دارای وابستگی مکانی است. تابع موج وابسته به زمان را
به صورت Ψ بزرگ نشان می دهیم :

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\cdot e^{i\omega t} \qquad (3.4)$$

۳-۲ معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان 3.2. The Time-Dependent Schrödinger Equation

معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان معادله‌ی یک موج (wave) است،
چرا که از Ψ که به زمان و مکان بستگی دارد، مشتق گیری می شود.

داریم :

$$E = h\nu = \hbar\omega, \qquad (2.1)$$

از (3.4) رابطه ی برای ω به دست می آوریم :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi\, i\omega\, e^{i\omega t} = \Psi\, i\omega \qquad (3.5)$$

$$\downarrow$$

$$\omega = -\frac{i}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \qquad (3.6)$$

$$(3.7) \qquad E = -\frac{\hbar i}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \xleftarrow{(2.1)}$$

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \quad \times e^{i\omega t} \;\rightarrow\; \nabla^2\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\Psi = 0$$

$$E = -\frac{\hbar i}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\rightarrow \nabla^2\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(-\frac{\hbar i}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial t} - V\right)\Psi = 0$$

$$\boxed{\nabla^2\Psi - \frac{2mV}{\hbar^2}\Psi - \frac{2mi}{\hbar}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0} \qquad (3.8)$$

معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان

می توانیم این معادله مکانیک کوانتومی را با جایگزینی کردن در رابطه‌ی کلاسیکی به دست آوریم:

معادل کوانتومی E

$$E \triangleq -\hbar i \frac{\partial}{\partial t} \qquad (3.9)$$

$$P \triangleq -\hbar i \nabla \qquad (3.10)$$

معادل کوانتومی P

از مکانیک کلاسیک داریم:

$$E_{total} = E_{kin} + E_{pot} = \frac{P^2}{2m} + V \qquad (3.11)$$

$$\boxed{-\hbar i \frac{\partial}{\partial t}\Psi = \frac{\hbar^2 i^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi \qquad (3.12)}$$

همان معادله‌ی (3.8) است.

۳-۳ : خواص ویژه ی مسائل ارتعاشی : (مولفه‌های مهم مربوط به ارتعاش)
3.3 Special Properties of Vibrational Problems

برای حل معادله ی شرودینگر باید ثابت هایی را نیز تعیین کنیم، برای این کار از شرایط مرزی (boundary conditions) استفاده می کنیم.

(e.g., $\psi=0$ at $x=0$)

وقتی شرایط مرزی مشخص می شود، فقط شکل های ارتعاشی خاصی امکان پذیر است.

مثال کلاسیکی : شکل طنابی که از یک طرف ثابت شده است و از طرف دیگر ما آن را به ارتعاش در می آوریم.

مسائلی که با شرایط مرزی حل می شوند، مسائل ویژه مقداری نامیده می شوند (eigenvalue problems)

دراینگونه مسائل مفهومی به نام انرژی ها مجاز خواهیم داشت.

یعنی در

$$E=h\nu \qquad (3.14)$$

همه ی فرکانس ها مجاز نیستند. (فصل بعدی به طور مفصل توضیح داده می شود)

این مقادیر مجاز (allowed values) را ویژه مقدار (eigenvalues) می نامیم.

هر ψ مربوط به یک ویژه مقدار را ویژه تابع (eigenfunction) می نامیم.

گفتیم $\psi\psi^*$ احتمال یافتن الکترون در یک موقعیت است.

$$\int \psi\psi^* d\tau = \int |\psi|^2 d\tau = 1 \qquad (3.15)$$

اگر ψ شرایط 3.15 را داشته باشد به آن ویژه تابع بهنجار می‌گوئیم.

اگر ویژه تابعی از معادله شرودینگر به دست آمد و بهنجار نبود با ضرب ثابت‌های در آن، بهنجار می‌شود.