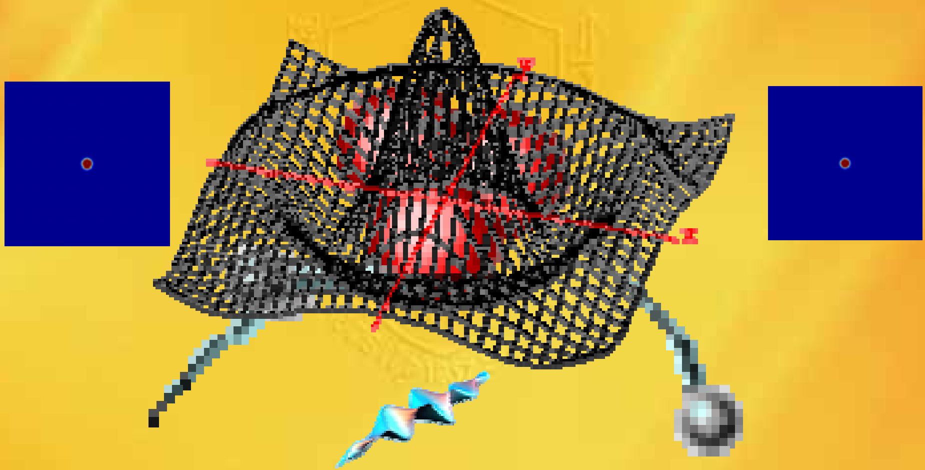
Chapter 7



The Schrödinger Equation

مقدمـة

في الفيزياء التقليدية :

قوانين نيوتن ← تصف حركة الأجسام .

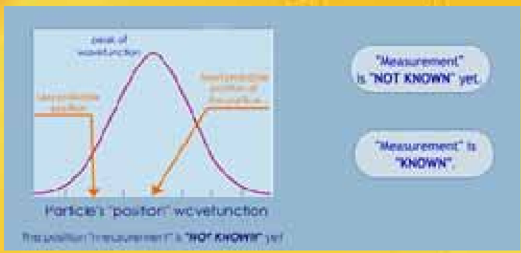
النظرية الكهرومغناطيسية التقليدية (معادلات ماكسويل) ← تصف المجال الكهرومغناطيسي

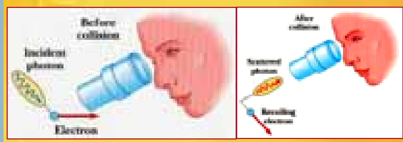
ماذا عن الطبيعة المزدوجة للمادة ← نحتاج الى صيغة رياضية .

ميكانيكا موجية (wave mechanics) أو ميكانيكا كمية (Quantum Mechanics)

في منتصف العشرينيات من القرن الماضي استنبط شرود نجر Schrödinger معادلته الشهيرة في ميكانيكا الكم وتدعى "معادلة شرودنجر " ، وهذه المعادلة تصف حالة الجسيم الكميه . وتنص علي أن لكل جسيم دالة موجية مصاحبة له وهذه الدالة منتشرة لتملأ الفراغ الكوني كله وتكون هذه الدالة أقوى في مكان الجسيم وتضعف كلما ابتعدنا عنه .

وتصف هذه المعادلة الحالة الكمية للجسيم "مثل الإلكترون أو الذرة " بدقة متناهية ولكن هناك شيء غريب جدا في هذه المعادلة وهى عند إجراء أي " قياس " للإلكترون بواسطة كشاف للجسيمات مثلا فان الدالة الموجية لهذا الإلكترون تقفز من حالتها الموصوفة بمعادلة شرودنجر إلى حالة أخرى حيث نتيجة القياس وذلك فور إدراكنا لنتيجة القياس . وعندما نتوقف عن المشاهدة أو القياس فإن هذه الدالة الموجية ترجع وتنتشر مرة أخرى لتملأ الكون ثانية "انظر الرسم المرفق".





تفسير ماكس بورن الاحتمالي :

اخذ ماكس بورن الفيزيائي الألماني المشهور معادلة شرودنجر خطوة أخرى ، عندما أوضح أن شدة الدالة لأي جسيم عند نقطة معينة ما هي إلا مقياس لاحتمال تواجده عند هذه النقطة . وقد ساهم هذا التوضيح في اكتشاف أشكال أخرى لميكانيكا الكم.

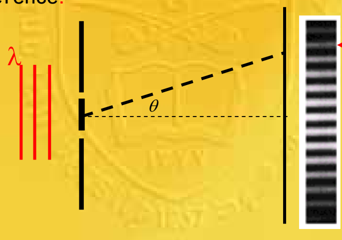
جانبي ASIDE

Important Clue: **Probability** (= what we measure)

- **probability** of hitting the screen at point (x) = (# hits at x) / (# total)
- intensity = energy/(area-time) ~ (# hits) /(area-time)
- intensity ~ $(\text{amplitude})^2$ for a wave

Recall 2 slit interference:

$E = E_m \sin(kx-\omega t)$



$I(\theta) \sim (E_1 + E_2)^2$

The wave associated with the electron must have the property that the square of its amplitude at point x gives the probability of hitting the screen at point x!

ASIDE

Wave Function: *(46.5)*

(Greek letter "psi")

Introduce a wave function $\Psi(x,t)$ to describe the matter wave for the electron:

$\rightarrow$ intensity pattern on the screen ~ $\Psi(x,t)^2$

It is tempting to write: $\Psi(x,t) = \Psi_o \sin(kx - \omega t)$ for the matter wave,

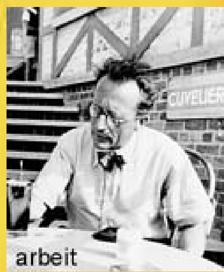
just like $E(x,t) = E_m \sin(kx - \omega t)$ for a light wave....

But this turns out to be wrong....

Erwin Schrodinger, 1926 concluded that the wave function for a matter wave had to be a complex function in order to correctly describe "quantum" phenomena:

$$\Psi(x,t) \;=\; \psi_o \; e^{i(kx-\omega t)}$$

$$with \quad i \equiv \sqrt{-1}$$



ASIDE

Math Tutorial:

What happens if we need to take the square root of a negative number?
(Calculator gives an error message...) ☹

$\rightarrow$ mathematicians just go ahead and **define** a quantity: $i = \sqrt{-1}$

Using this trick, one can treat i as a "unit", like *m/s* for example, and carry on with calculations as usual:

$$\sqrt{-4} = \sqrt{(-1)\times 4} = 2\,i \quad \Leftrightarrow \quad \sqrt{4\,(\mathrm{m/s})^2} = 2 \;\; \mathrm{m/s}$$ *same thing!*

- A multiple of i is called an imaginary number, e.g. " 5 i "
- Otherwise, it is a real number, e.g. " 27 "
- A sum of real and imaginary numbers is a **complex number**, e.g. " 27 + 5 i "

The wave function for a particle in quantum mechanics is a complex number.
(Schrodinger, 1926)

جانبي
ASIDE

What does it mean to have a wave that is complex?

Everything we can observe or measure is described by real numbers!!!

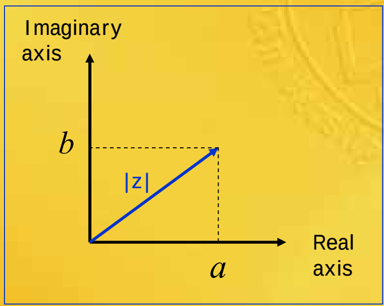
We can measure the probability of an electron hitting the screen at point x,
and probability ~ $\Psi(x,t)^2$ so the "square" of the wave function must be real...

General complex number, z: $z = a + i\,b$

Define the complex conjugate of z: $z^* \equiv a - i\,b$

$$z\,z^* = a^2 + b^2$$

imaginary part changes sign



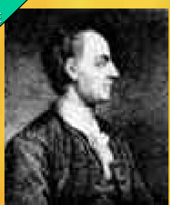
Replace the "square" of a complex number by the product z z*

$\rightarrow |z|^2 = z\,z^* = a^2 + b^2$

The "modulus" of z is $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$

← Graphical representation

جانبي
ASIDE



The mathematics of complex numbers was worked out by Leonhard Euler, 1707-1783.

Euler's famous formula: $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$

was just what Schrodinger needed to describe matter waves:

Wave function for a particle moving at constant speed :

$$\Psi(x,t) = \psi_o\, e^{i(kx-\omega t)}$$

Interpretation: the probability to observe a particle within dx of x is given by $P(x)dx$, where:

$$\Psi\,\Psi^* = P(x)$$

P(x) = $\Psi\,\Psi^*$ is the probability density. *(Real number, OK!)*

جانبي
ASIDE

Analysis for a free particle: *(v = constant, no force acting on it)*

$$\Psi(x,t) = \psi_o\, e^{i(kx-\omega t)}$$

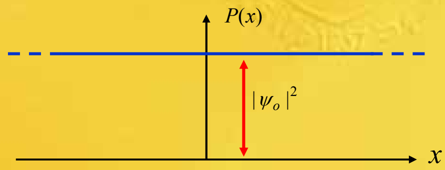
$$P(x) = \Psi\,\Psi^* = \left(\psi_o\, e^{i(kx-\omega t)}\right)\left(\psi_o^*\, e^{-i(kx-\omega t)}\right) = |\psi_o|^2$$

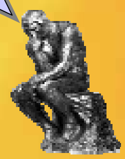
(change the sign of imaginary parts; don't assume the amplitude is real)

P(x) is constant everywhere for a free particle!

→ We have absolutely no idea where it is ???

Something's wrong here....





353 PHYS | Dr. Abdallah M.Azzeer | Page 9

جانبي
ASIDE

Very important idea: **Normalization** $\Psi(x,t) = \psi_o\, e^{i(kx-\omega t)}$

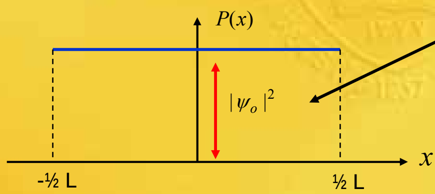
If we know we have exactly one particle, and it is **somewhere** between x = ± ∞, then the probability of finding it anywhere between x = ± ∞ must be equal to 1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)\, dx = 1$$

If the particle is "free" but we know it is somewhere between x = ± ½ L, say, so that it is contained in a 1-d box along the x-axis of width L, then:

$$\int_{-L/2}^{+L/2} P(x)\, dx = 1$$

Area under the graph of P(x) = probability that the particle is somewhere in the "box"



$$|\psi_o|^2 L = 1 \quad\Rightarrow\quad \psi_o = \pm\frac{1}{\sqrt{L}}$$

(Problem with the infinite range of x is that L→∞ so P(x) → 0 everywhere)

353 PHYS | Dr. Abdallah M.Azzeer | Page 10

Interpretation of the Wave function تفسير للدالة الموجية

Ψ عبارة عن كمية مركبة !!

كيف تعبر عن قياسات فيزيائية حقيقية على النظام الفيزيائي؟

حيث أن:

عدد الفوتونات لوحدة الحجم تتناسب مع الطاقة الكهرومغناطيسية لوحدة الحجم أو مع مربع شدة المجال الكهرومغناطيسي

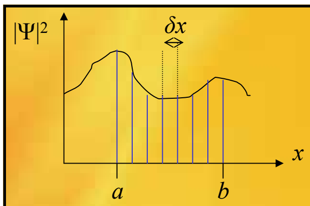
إقترح ماكس بورن **Max Born** إذا كانت Ψ هي سعة الدالة الموجية فإن إحتمالية وجود الجسيم في طول صغير مقداره δx عند موضع x وزمن t يكتب علي الصورة :

$$\Psi(x,t)\,\Psi^*(x,t)\,dx = |\Psi(x,t)|^2\,dx ,$$


Born

حيث Ψ^* تمثل المرافق المركب *complex conjugate*

والكمية $\Psi\,\Psi^* = |\Psi|^2$ تسمى كثافة الإحتمالية *Probability Density* أو الإحتمالية لوحدة الطول و هي عدد حقيقي .

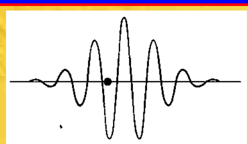


إحتمالية وجود الجسيم بين الموضعين a و b تكون :

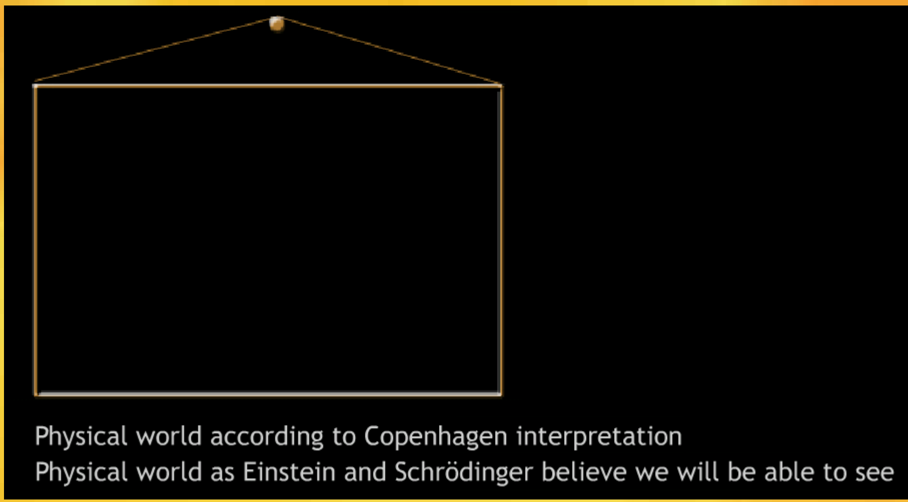
$$\sum_{x=a}^{b} |\Psi(x,t)|^2\,\delta x \xrightarrow[\delta x \to 0]{} \int_a^b |\Psi(x,t)|^2\,dx$$

وحيث أن إحتمال وجود الجسيم في أي مكان في الفضاء يساوي الوحدة ، فإنة يمكن الحصول على:

$$\int \psi\,\psi^*\,dV = \int |\psi|^2\,dV = 1$$



وعند تحقق هذا الشرط فإنه يمكن القول بأن الدالة الموجية متعامدة <u>**NORMALISED**</u>



<u>Example</u>

Suppose that at some instant of time a particle's wavefunction at t=0 is

$$\Psi(x,0) = 2x$$

What is:

(a) The probability of finding the particle between x=1.0 and x=1.001?

(b) The probability per unit length of finding the particle at x=1?

(c) The probability of finding the particle between x=0 and x=0.5?

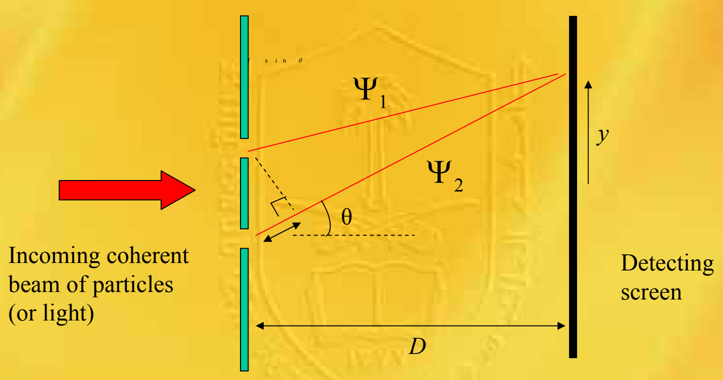
TRY TO SOLVE

Example

Particle with un-normalized wavefunction at some instant of time t

$$\Psi(x,t) = a^2 - x^2, \quad -a \le x \le a$$
$$\Psi(x,t) = 0, \qquad |x| > a$$

DOUBLE-SLIT EXPERIMENT REVISITED



Schrödinger equation is linear: solution with both slits open is $\boxed{\Psi = \Psi_1 + \Psi_2}$

Observation is nonlinear $$|\Psi|^2 = \underbrace{|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2}_{\text{Usual “particle” part}} + \underbrace{\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_1\Psi_2^*}_{\text{Interference term gives fringes}}$$

Expectation Values القيم المتوقعة

سوف نرى أن الدالة الموجية تحتوي على جميع المعلومات عن الجسيم أو النظام

نفترض جسيم دالة الموجية $\Psi(x,t)$ ، حسب فرضية بورن تكون إحتمالية وجود الجسيم في المسافة بين x و dx على الصورة:

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

يسمى متوسط القيم الملحوظة للكميات (مثل الموضع x أو كمية الحركة أو الطاقة ... إلخ) القيمة المتوقعة لتلك الكمية . ففي حالة الموضع x مثلا تكون القيمة المتوقعة على الصورة:

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)xdx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$$

353 PHYS Dr. Abdallah M.Azzeer Page 17

وبشكل عام تكون القيمة المتوقعة لأي كمية فيزيائية $f(x)$ مرافقة لجسيم على الصورة:

$$< f(x) >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) f(x)\Psi(x,t)dx$$

المؤثرات الفيزيائية لاحقا

353 PHYS Dr. Abdallah M.Azzeer Page 18

Example :

The wavefunction describing a particle $\begin{cases} \Psi = ax & for \quad 0 \le x \le 1 \\ \Psi = 0 & for \quad x > 1,\ x < 0 \end{cases}$

Find:(a) probability to be found in 0.45< x <0.55

(b) expectation value

By normalizing $\Psi = ax$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2\, dx = a^2 \int_0^1 x^2 dx = a^2 \left[\frac{x^3}{3}\right]_0^1 = \frac{a^2}{3} = 1 \rightarrow a = \sqrt{3}$$

$$\int_{0.45}^{0.55} a^2 x^2 dx = a^2 \left[\frac{x^3}{3}\right]_{0.45}^{0.55} = 0.0251 a^2 = \underline{0.0753}$$

$$< x >= \int_{-\infty}^{\infty} x\, |\Psi|^2\, dx = a^2 \int_0^1 x^3 dx = a^2 \left[\frac{x^4}{4}\right]_0^1 = \frac{a^2}{4} = \underline{\frac{3}{4}}$$

تفسير كوبنهاجن :- وهو يفسر الكون أو الواقع على المستوى الكمي على أن القياس هو كل شئ القياس هو الذي يوجد الواقع أي أن قياس مكان إلكترون هو الذي يوجد إلكترون له مكان أو موقع وبدون قياس فأننا لا نستطيع أن نتكلم عن واقع بوجود إلكترون . أينشتاين وشرود نجر لم يوافقا على هذا التفسير على الرغم من موافقتهم على المقدمات الرياضية لميكانيكا الكم . وقد كان أينشتاين خاصة على اقتناع بأن الواقع موجود بصرف النظر عن قياسنا له أو عدم قياسنا له وقد جادل إينشتاين بأن ميكانيكا الكم ليست نهاية المطاف بل أنها صورة مقربة للصورة الحقيقية للكون . وعندما نتمكن من أيجاد الوسائل التي تمكننا من رؤية هذه الصورة فأننا بلا شك سوف نكتشف الواقع الحقيقي للكون . وقد قال إينشتاين كلمته المشهورة في هذا السياق وهى :- (لا أستطيع أن أصدق أن الله يلعب الطاولة مع الكون).

وصف شرودنجر Schrödinger سعة الموجة المادية بكمية مركبة $\Psi(x,y,z,t)$ تسمى الدالة الموجية (wave function) والتي تصف النظام الديناميكي تحت الملاحظة .

فإذا كان النظام لايتغير مع الزمن فإنه يسمى بحالة الإستقرار (stationary state) وبالتالي تكون دالته الموجوية لا تعتمد على الزمن (time independent) $\psi(x,y,z)$.

فرضيات ميكانيكا الكم

الفرضية الأولى [1] :

دالة موجية لوصف النظام الفيزيائي :

لكي يكون هناك دالة موجية تصف أي نظام فيزيائي يجب أن تكون هذه الدالة محدودة، ذات قيمة واحدة، ومتصلة في أي مكان:

وهذا صحيح فقط إذا تحققت ما يسمى بالشروط الحدية (BOUNDARY CONDITIONS)

- يجب أن تكون $\psi(x)$ متصلة (continuous) .
- مشتقة $\psi' = \partial\psi / \partial x$ (بالنسبة لإحداثيات الفضائية) يجب أن تكون متصلة كذلك عند أي نقطة في الفراغ ما عدا الحالة التي يكون فيها الجهد $V(x,y,z)$ لا نهائي (غير محدد).
- يجب أن تتلاشى $\psi(x)$ عند ما تؤول الإحداثيات إلى اللانهاية أي :

$$\boxed{\psi(x) \to 0 \quad \text{as} \quad x, y, z \to \pm\infty}$$

بالإضافة إلى أعلاه

يجب أن تكون الدالة الموجية تحقق شرط بورن لاحتمال وجود الجسيم في حجم معين $dz\ dy\ dx$ أي أن

$$\boxed{\int_{ALL\ SPACE} \psi^* \psi \ dxdydz = 1}$$

وهذا ما يسمى بشرط التعامدية Normalization condition ويضاف كشرط حدي للشروط الثلاثة السابقة.

وإذا كان هناك n من الجسيمات في الفضاء فإن :

$$\int_{ALL\ SPACE} \psi^* \psi \ dxdydz = n$$

حيث تكون ψ في هذه الحالة غير متعامدة Un-normalized wave function

وتكون الدالة الموجية المتعامدة هي $\psi / \sqrt{n}$

الكمية $\frac{1}{\sqrt{n}} = N$ تسمى بـ ثابت التعامدية Normalization constant

الفرضية الثانية [2] :

المؤثر للكميات الملاحظة Operators for observable quantities

يوجد مؤثر operator يمثل لكل كمية ملاحظة .

(عموما المؤثر هو عبارة عن أي شيء يمكن عمل شيء للدالة مثل مؤثر الضرب × المؤثر، التفاضلي d /dr المؤثر التكاملي ∫ dr ...)

وفي ميكانيكا الكم يكون اختيار المؤثر اختياري ولكن يجب أن يحقق الشرط الذي يكون فيه المؤثر على دالة موجية ينتج منه كمية ملاحظة observable quantity مضروباً في الدالة الموجية نفسها أي أنه إذا كان O عبارة عن مؤثر على دالة ψ فإنه ينتج من ذلك كمية ملاحظة o . أي أن:

$$O\psi = o\psi$$

والجدول التالي يمثل بعضاً من مؤثرات ميكانيك الكم:

بعضاً من مؤثرات ميكانيك الكم

Classical Quantity الكمية التقليدية		Quantum Mechanics Operator مؤثر ميكانيك الكم
Position	x, y, z	x, y, z
Momentum	p	$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$
	p_x	$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$
	p_y	$p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$
	p_z	$p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$
Energy	E	$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}$

$$i = \sqrt{-1}$$

353 PHYS Dr. Abdallah M.Azzeer Page 25

eigen== German ward
unique or singular

وحيث أن

الدالة المسمومة eigen function

$$O\psi = o\psi$$

القيم المسمومة eigen value

ولحل مسألة في ميكانيكا الكم يجب إيجاد القيم المسموحة eigen value والدالة المسموحة eigen function بحل معادله شرودنجر .

الفرضية التالية [3]:

القيمة المتوقعة Expectation value أو المعدلات

متوسط القيمة لأي كمية ملاحظة o يكتب على الصورة التالية:

$$\langle o \rangle = \frac{\int \psi^* o \ \psi \ dxdydz}{\int \psi^* \psi \ dxdydz}$$

353 PHYS Dr. Abdallah M.Azzeer Page 26

إشتقاق معادلة شرودنجر (Schrödinger Eq.)

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

$$\hbar\omega=\frac{k^2\hbar^2}{2m}+V$$

تعتبر معادلة شرودنجر الموجية معادلة تفاضلية مشابهة للمعادلات التفاضلية للحركة الموجية

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$

Or

$$\nabla^2\psi=\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$

وفي بعد واحد

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{1}{v_x^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$

وبإفتراض أن الموجة المستوية $\psi=e^{i(kx-\omega t)}$ تمثل جسيم يتحرك في إتجاه محور x

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=ik\,e^{i(kx-\omega t)}\quad,\quad\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-k^2e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-i\omega\,e^{i(kx-\omega t)}\quad,\quad\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=-\omega^2e^{i(kx-\omega t)}$$

في معادلة الطاقة أعلاه يلاحظ وجود (k^2) و (ω) وبالتالي يمكن دمج $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ و $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$

نفترض أن : $\alpha\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=\beta\frac{\partial\psi}{\partial t}$ هي المعادلة الموجية لشرودنجر

$$\therefore\ \alpha(-k^2)\psi+V\psi=\beta(-i\omega)\psi$$

وبالمقارنة مع $\frac{k^2\hbar^2}{2m}+V=\hbar\omega$ نجد أن:

$$-\alpha=\frac{\hbar^2}{2m} \Rightarrow \alpha=-\frac{\hbar^2}{2m} \quad , \quad -i\beta=\hbar \Rightarrow \beta=\frac{\hbar}{-i}=i\hbar$$

وتكون معادلة شرودنجر على الصورة:

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

The Schrödinger Equation
Another APROACH

إن الطاقة الكلية E لجسيم كتلتة m ويتحرك بسرعة $\vec{v}$ حيث $v^2=v_x^2+v_y^2+v_z^2$ وله طاقة كامنة $V(x,y,z,t)$ عند زمن t تعطى بالعلاقة:

$$E=KE+PE=\frac{1}{2}mv^2+V(x,y,z,t)$$
$$=\frac{p^2}{2m}+V(x,y,z,t)$$

للتحول من الميكانيكا التقليدية إلي الميكانيكا الكمية نستخدم المؤثرات الكمية:

$$\vec{p} \Rightarrow p\equiv-i\hbar\left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial x}+\hat{j}\frac{\partial}{\partial y}+\hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$E \Rightarrow E\equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$p^2=\vec{p}\cdot\vec{p} \Rightarrow p^2=\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)=-\hbar^2\nabla^2$$

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

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}$$

Time-dependent Schrödinger wave eq

دالة شرودنجر المعتمدة علي الزمن

$$\text{if } H \equiv \text{Hamiltonian Operator (or Energy Operator)}$$

$$\equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V$$

Eigen function

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

Hamiltonian *Eigen value*

353 PHYS Dr. Abdallah M.Azzeer Page 31