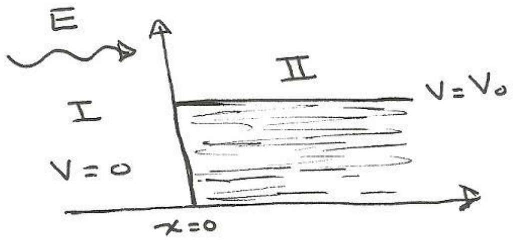
Solution of schrodenger equation in one-dimension.

1. potential step. عتبة الجهد.



وتعني عتبة الجهد وجود منطقتين المنطقة الاولى (I) والمنطقة الثانية (II) وبينهما فرق في الجهد بحيث ان طاقة احداهما تساوي صفر (I) وطاقة الطاقة في المنطقة الاخرى تساوي V_o وهي كمية ثابتة ، مثال على ذلك "الالكترون الحر المتحرك داخل قطعة معدنية"

at the first region (I) $\Rightarrow V(x) = 0 \quad , x < 0$

at the second region (II) $\Rightarrow V(x) = V_o \quad , x > 0$

اما في ما يخص طاقة الجسيم الساقط على العتبة فيمكن ان تكون بحالتين ، الحالة الاولى تكون فيها طاقة الجسيم الساقط اكبر من طاقة العتبة ($E > V_o$) ، والحالة الثانية تكون فيها طاقة الجسيمة اقل من طاقة العتبة ($E < V_o$). وسنناقش الحالتين وكالتالي :-

(i) $E > V_o$ at the first region (I)

نبدأ اولاً بكتابة معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن .

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

$$V = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) = E\psi_I(x).$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) - E\psi_I(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_I(x) = 0 \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) + k^2\psi_I(x) = 0 \quad (1)$$

معادلة رقم (1)

where $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} = +ve$ quantity.

وعلينا الآن حل المعادلة رقم (1) وايجاد الدالة الموجية (wave function)

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + k^2\psi_I(x) = 0$$ multiplied by i^2

لتحويل المعادلة (1) الى فرق مربعين

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} - i^2k^2\psi_I(x) = 0 \quad \text{——— (2)}$$

$$\left(\frac{d}{dx} - ik\right)\left(\frac{d}{dx} + ik\right)\psi_I(x) = 0$$

either: $\left(\frac{d}{dx} - ik\right)\psi_I(x) = 0 \Rightarrow \frac{d\psi_I}{dx} - ik\,\psi_I = 0$

$$\therefore \frac{d\psi_I(x)}{dx} = ik\,\psi_I(x)$$ بتكامل الطرفين

$$\int \frac{d\psi_I(x)}{dx} = \int ik\,dx$$

$$\ln\psi_I(x) = ikx + a$$ ثابت التكامل

$$\psi_I(x) = e^{ikx+a} = e^{ikx}\cdot e^{a} = Ae^{ikx} \quad \text{———(3)}$$

ويطلق على هذا الجزء من الدالة الموجية بـ (incident wave)

or: $\left(\frac{d}{dx} + ik\right)\psi_I(x) = 0$ نفسه الطريقة اعلاه نجد ان

$$\int \frac{d\psi_I}{\psi_I} = -\int ik\,dx$$

$$\ln\psi_I = -ikx + b \Rightarrow \psi_I(x) = e^{-ikx+b} = e^{-ikx}\cdot e^{b}$$

$$\therefore \psi_I(x) = Be^{-ikx} \quad \text{——— (4)}$$ ويطلق على هذا الجزء reflection wave

$$\boxed{\therefore \psi_I(x) = \psi_{total} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}}\text{, at } x < 0 \quad \text{—(5)}$$

وتمثل المعادلة (5) الدالة الموجية لجسيمة حرة ساقطة على عتبة جهد بطاقة كلية $(E > V_0)$ من جهة اليمين وعند المنطقة الاولى (I).

ii) $E > V_0$ (second region II).

where $V = V_0$ at $x > 0$

$\therefore$ Schrodeng equation become :-

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) + V_0\,\psi_{II}(x) = E\,\psi_{II}(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) + V_0\,\psi_{II}(x) - E\,\psi_{II}(x) = 0$$

وبتبسيط المعادلة ينتج :-

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) - \frac{2m}{\hbar^2}V_0\,\psi_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\,\psi_{II}(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,\psi_{II}(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) + k'^2\,\psi_{II}(x) = 0 \qquad \text{where } k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) - i^2k^2\,\psi_{II}(x) = 0 \quad \text{———} (6)$$

وتحل بنفس طريقة حل المعادلة (1) لايجاد الدالة الموجية

$$\boxed{\psi_{II} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \quad , \text{ at } x > 0} \quad \text{———} (7)$$

وتمثل الدالة الموجية كموجة ساقطة على عتبة جهد بطاقة كلية $(E > V_0)$ على المنطقة الثانية (II) اي $(V = V_0)$

Initial Conditions

A: amplitude of the incident wave.

B: " " " reflected " .

C: " " " transmitted " .

D: equal to zero/no wave in region II coming from the right. "اي لايوجد مايبرر انعكاس الموجة في المنطقة II لعدم وجود حاجز امامها.

$$\therefore \Psi_{II}(x) = C e^{ik'x} \quad \text{—— (8)}$$

ولايجاد قيم الثوابت A ، B ، C علينا تطبيق الشروط الحدودية

<u>Boundary Conditions</u> <u>at $x=0$</u>

$$\Psi_I(x) = \Psi_{II}(x) \Big|_{x=0}$$

$$\& \quad \Psi'_I(x) = \Psi'_{II}(x) \Big|_{x=0}$$

من الشرط الأول

$$A e^{ikx} + B e^{-ikx} = C e^{ik'x} \Big| \text{at } x=0$$

$$A e^{ik(0)} + B e^{-ik(0)} = C e^{ik'(0)}$$

$$A + B = C \quad \text{—— (9)}$$

من الشرط الثاني

$$iAk e^{ikx} - iB e^{-ikx} = ik' C e^{ik'x} \Big| \text{at } x=0$$

$$iAk - iBk = ik' C$$

$$ik(A - B) = ik' C$$

$$A - B = \frac{k'}{k} C \quad \text{—— (10)}$$

$$(9)+(10) \Rightarrow 2A = \left(1 + \frac{k'}{k}\right) C$$

$$(9)-(10) \Rightarrow 2B = \left(1 - \frac{k'}{k}\right) C$$

$$\boxed{\therefore \frac{B}{A} = \frac{k-k'}{k+k'}} \quad \text{and} \quad \boxed{\frac{C}{A} = \frac{2k}{k+k'}}$$

Probability Current Density

$$S_x = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx}\right]$$

incident probability Current "density" $= S_{inc}$

$$S_{inc} = \frac{\hbar}{2mi}\left[A^* e^{-ikx} \cdot A(ik) e^{ikx} - A e^{ikx} \cdot A^*(-ik) e^{-ikx}\right]$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left[A^* A (ik) + A A^* (ik)\right]$$

$$S_{inc} = \frac{\hbar k}{2m} |A|^2 \quad , \; k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \hbar k = p = mv$$

$$\boxed{S_{inc} = v |A|^2}$$

and in the same way, We can find

H-w واجب بيتي $\boxed{S_{ref} = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2}$, and $\boxed{S_{trans} = \frac{\hbar k'}{m} |C|^2}$ H-w واجب بيتي

① "Reflection Coefficient" ولايجاد معامل الانعكاس

$$R = \left|\frac{S_{ref}}{S_{inc}}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1$$

$$R = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \quad \text{H.w.}$$

② "Transmision Coefficient" $\quad T = \left|\frac{S_{trans}}{S_{inc}}\right| = \frac{k'}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2$

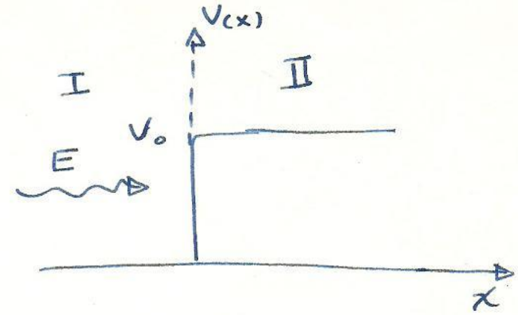
$$\boxed{\therefore T = \frac{4kk'}{|k+k'|^2}} \quad \text{H.w.}$$

ماذا يعني كل ماسبق ؟!

كلاسيكياً :. جميع الجسيمات تعبر الى المنطقة II لان طاقتها الكلية اكبر من طاقة عتبة الجهد ولكن بسرعة أقل لانها فقدت جزء منه طاقتها .

كمياً :- نلاحظ ان ($B \neq 0$) مما يعني انعكاس بعض الجسيمات الى المنطقة I عند الشرط الحدودي (الحد الفاصل) رغم ان طاقتها الكلية اكبر من الطاقة الطاقة (V_0) وهذا يناقض توقعات الميكانيك الكلاسيكي .

ii) $E < V_0$



* في هذه الحالة وطبقاً للميكانيك الكلاسيكي لا يمكن للجسيمة الانتقال من المنطقة I الى المنطقة II ، لان انتقالها سيجعل طاقتها الحركية في II سالبة وبالتالي تكون السرعة خيالية .

* اما الميكانيك الكمي فيتوقع وجود احتمالية ولو قليلة لامكانية هروب الجسيمة من المنطقة I الى المنطقة II .

<u>In region I</u> The same result in equation (6) (Free-particle)

$$\psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

<u>In region II</u>

The sch. eq. in region II

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + V(x)\,\psi_{II} = E\psi_{II} \qquad , V = V_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + V_0\,\psi_{II} = E\psi_{II} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} - \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\,\psi_{II} = 0 \qquad \text{— (11)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} - \alpha^2 \psi_{II} = 0 \qquad , \text{ where } \alpha^2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

$\llcorner$ (11)

$\therefore$ The general solution for equation (11)

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\alpha x} + \underbrace{D e^{\alpha x}}_{\text{zero}}$$

$$\therefore \psi_{II}(x) = C e^{-\alpha x}$$

$D = 0$, because $e^{\alpha x} \to \infty$ at $x = \infty$, and ψ must be finite well behaved function.

$$\left.\frac{B}{A} = -\frac{\alpha + ik}{\alpha - ik} \quad , \quad \frac{C}{A} = \frac{2ik}{ik - \alpha}\right\}$$

H.W
من معادلة الأولى.

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1 \qquad T = 0$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{2ik}{ik - \alpha} A e^{-\alpha x}$$

The particle does, then, penetrate into the reflected well by an amount that depends on the magnitude of $(V_0 - E)$.

No particles are stored in the barrier, and no net flux to the right of the barrier exists.