بسم الله الرحمن الرحیم

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران مرکزی

دانشکده : علوم پایه **گروه : فیزیک**

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

(M.Sc)

گرایش : حالت جامد

عنوان :

حل تحلیلی پتانسیل روزن– مورس با جرم وابسته به مکان

استاد راهنما :

دکتر علیرضا امانی

استاد مشاور :

دکتر سید محمد متولی

پژوهشگر :

مهری سراوندی منزه

زمستان ۹۰

ISLAMIC AZAD UNIVERSITY

Centeral Tehran Branch

Faculty of Science **Department of** physics

"M.Sc" Thesis

On Received a master's degree

Subject:

Analytical Solutions for the Rosen-Morse Potential with Position Dependent Mass

Advisor:

Dr. Ali Reza Amani

Consulting-Advisor:

Dr. Seeid Mohammad Motavali

By:

Mehri Saravandi Monazah

Winter ۲۰۱۲

تشکر و قدردانی:

سپاس بی کران پروردگار یکتا را که هستی مان بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونمان شد و به همنشینی رهروان علم ودانش مفتخرمان نمود و خوشه چینی از علم و معرفت را روزیمان ساخت.

و با تشکر از زحمات بی شائبه جناب آقای دکتر علیرضا امانی که من را در این پروژه همراهی کردند.

تقدیم به:

پدر، مادر و همسر عزیزم

و به تمام آزاد مردانی که نیک می‌اندیشند و عقل و منطق راپیشه خود نموده و جز رضای الهی و پیشرفت و سعادت جامعه، هدفی ندارند.

و همه کسانی که بعد انسانی و وجدانی خود را فراموش نمی‌کنند و بر آستان گران سنگ انسانیت سر فرو می‌آورند و انسان را با همه تفاوت‌هایش ارج می‌نهند.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست جدول ها

عنوان **صفحه**

چکیده

در این رساله، به بررسی و حل معادله شرودینگر با جرم وابسته به مکان برای پتانسیل روزن-مورس پرداختیم. با استفاده از روش فاکتورگیری، هامیلتونین سیستم را بر حسب حاصلضرب دو معادله دیفرانسیلی مرتبه اول نوشتیم، که آنها را به عنوان عملگرهای بالا برنده و پایین آورنده معرفی نمودیم. سپس با مقایسه معادله شرودینگر و معادله دیفرانسیلی ژاکوبی وابسته، تابع موج را به دست آوردیم. همچنین یکی از مهمترین شاخص این رساله محاسبه جرم، بر حسب مکان بوده که از مقایسه به دست آمده است. ودر خاتمه از نتیجه این مقایسه مقادیر ویژه انرژی بر حسب اعداد کوانتومی n و l به دست آوردیم.

فصل اول

معادله شرودینگر

مقدمه

معادله شرودینگر در سال ۱۹۲٦ توسط اروین شرودینگر [1] فرمول بندی شده است و کاربردهای زیادی در فیزیک دارد، این معادله، حالت های کوانتومی سیستم های فیزیکی را در زمان های مختلف توصیف می کند. در بیان کلی، حالت های کوانتومی به عنوان تابع موج یا بردار حالت نامیده می شود که این معادله کامل ترین توصیفی است که می توانیم از سیستم های فیزیکی داشته باشیم. معادله شرودینگر نه تنها برای سیستم های مولکولی، اتمی و درون اتمی حل پذیر است بلکه برای سیستم های ماکروسکوپی کل جهان قابل حل است.

عمومی ترین شکل آن معادله شرودینگر وابسته به زمان است، که سیستم هایی را توصیف می کند که با گذشت زمان در حال تحول هستند. برای سیستم در یک حالت ثابت (به عنوان مثال، جایی که هامیلتونی صراحتاً وابسته به زمان نباشد) معادله شرودینگر مستقل از زمان کافی است. راه حل های تقریبی برای معادله شرودینگر مستقل از زمان به طور معمول برای محاسبه به سطوح انرژی و خواص اتم ها و مولکول ها مورد استفاده قرار می گیرد.

(۱-۱) معادله شرودینگر وابسته به زمان به صورت زیر نوشته می شود.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \mathrm{H}\,\psi$$

(۱-۲) معادله شرودینگر مستقل از زمان به شکل زیر می باشد.

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

معادلات شرودینگر را می توان به وسیله مکانیک ماتریسی ورنرهایزنبرگ [2]، و انتگرال مسیر ریچارد فایمن [3] به ریاضیات تبدیل کرد. معادله شرودینگر در این روش زمان را توصیف می کند که در تئوری نسبیتی نامناسب است، این مشکل از مکانیک ماتریسی جدا شدنی نیست و کاملاً در فرمالیسم انتگرال مسیر نیز حذف نمی شود.

[1]- Erwin Shrödinger
[2]- Werner Heisenberg
[3]- Richard feynman

۱-۱ معادله شرودینگر

معادله شرودینگربا توجه به وضعیت فیزیکی اشکال مختلفی دارد، در این بخش حالت کلی این معادله را ارائه می‌کنیم. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \mathrm{H}\psi$ که ψ ، $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ ، $\hbar$ ، $\hat{\mathrm{H}}$ به ترتیب تابع موج، عملکرد انرژی، ثابت پلانک و عملگر هامیلتونی معرفی می‌گردند. حال توجه خود را به مثال زیر جلب می‌کنیم.

۱-۱-۱ ذره منفرد در یک پتانسیل

معادله شرودینگر برای یک ذره منفرد با پتانسیل Vرا بدست می آوریم.

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

(۱-۳)

که $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ به عنوان عملگر انرژی جنبشی با جرم m می‌باشد و عملگر لاپلاسی ∇^2 در سه بعد به صورت زیر می‌باشد.

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}^{۲}} + \frac{\partial}{\partial \mathrm{y}^{۲}} + \frac{\partial}{\partial \mathrm{z}^{۲}}$$

که در آنx, y, z مختصات دکارتی از فضاست.

انرژی پتانسیل مستقل از زمان در موقعیت r را با $V(r)$ نشان می‌دهیم.

$\psi(r,t)$ تابع موج برای ذرات در موقعیت r و در زمانt است و

$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$ نیزعملگرهامیلتونی برای یک ذره منفرد در یک پتانسیل معرفی می‌شود.

۱-۱-۲ معادله مستقل از زمان یا ساکن

معادله مستقل از زمان برای یک ذره با پتانسیل V به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$\mathrm{E}\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) \qquad (۱-٤)$$

این معادله حل معادلات مستقل از زمان امواج ایستاده را توصیف می کند که حالتی با انرژی تعریف شده دارند (به جای یک توزیع احتمال از انرژی های مختلف). این امواج ایستاده در فیزیک «حالت

های ثابت» یا «ویژه مقادیر انرژی» نامیده می شود، و در شیمی به آن "اوربیتال های اتمی" و "اوربیتال های مولکولی" می گویند.

۱-۲ پیشینه تاریخی

۱-۲-۱ توجیه نظری و تجربی برای معادله شرودینگر

ماکس پلانک[٤] از تعادل دینامیکی بین گسیل و جذب در دیواره های داخلی جسم سیاه که فرض نموده از نوسانگرهای ساده تشکیل شده است نتیجه وی به این نتیجه رسید که تابش
می تواند فقط به صورت $h\nu$ گسیل یا جذب گردد، که در اینجا اولین بارh به عنوان ثابت پلانک وارد فیزیک گردید و این هم معرف کوانتوم است.

آلبرت انیشتین[٢] در سال ۱۹۰۵ به تفسیر این موضوع پرداخت که نور خود دارای کوانتا است یعنی از طبیعت کوانتومی نور استفاده کرد تا بتواند خواص عجیب فلزات را توجیه کند، او پیشنهاد داد که انرژی فوتو الکترونها ازچشمه نور مستقل است ولی به طور خطی با فرکانس نور فرودی تغییر می کند که این یکی از اولین نشانه های دوگانگی موج و ذره بود. از آنجا که انرژی و تکانه در یک مسیر و فرکانس و عدد موج در نسبیت خاص به هم مربوط هستند، می توان آن را دنبال کرد که p تکانه فوتون متناسب با κ، عدد موج آن است.

$$\mathrm{P}=\frac{h}{\lambda}=\hbar\kappa$$

(۵-۱)

لویی دوبروی[٣] فرضیه را برای تمام ذرات حتی ذرات مانند الکترون درست دانست و او در اواسط سال ۱۹۲۳ با بکارگیری اصل فرما در اپتیک و اصل کمترین عمل درمکانیک به این نتیجه رسید که طبیعت دو گانه موج و ذره باید شباهتی در طبیعت دوگانه ذره ای و موجی ماده داشته باشد یعنی ذرات باید در شرایط خاصی، خاصیت موجی داشته باشند مثل آزمایش پراش و تداخل و در مورد ذره ایی بودن آزمایشی نظیر اثر فوتوالکتریک وکامپتون که این دو مقوله توسط دوبروی طبقه بندی شد.

در این زمان شرودینگر برای پیداکردن معادله موج مناسب برای الکترون ها تلاش می کرد او با همکاری ویلیام[٥] با مقایسه هامیلتونین بین مکانیک و اپتیک با کد گذاری مشاهدات خود در سیستمی مشابه مکانیکی در حد طول موج صفر اپتیکی تفسیرکردند که پرتو روشنایی به شکل باریکه ای نوک تیز بود که آن اصل فرما و اصل کمترین عمل را تایید می کرد. معادله او به صورت زیر می‌باشد.

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

(٦-١)

١- Max Planck

٢- Einstein

٣-Louis Debroglie

٥- William

با استفاده از این معادله، شرودینگر سری طیف های هیدروژن را، به وسیله رفتار الکترون های اتم هیدروژن به عنوان موج $\psi(x,t)$ و حرکت پروتون در چاه پتانسیل V محاسبه کرد.این محاسبات دقیقاً از سطوح انرژی مدل بور[٦] به دست می‌آید.

در هرحال تا آن زمان، آرنولد سامرفیلد[٣] مدل بور را از تصحیحات نسبیتی معین کرده بود. شرودینگر از رابطه ممنتم انرژی نسبیتی برای پیداکردن آنچه که حالا به عنوان معادله کلاین-گوردن[٤] در پتانسیل کولنی می دانیم استفاده کرد.

$$\left(\mathrm{E}+\frac{e^2}{r}\right)^2\psi(x)=-\nabla^2\psi(x)+m^2\psi(x) \qquad (٧-١)$$

او امواج ایستاده را از معادلات نسبیتی دریافت کرد اما تصحیحات نسبیتی با مدل سامر فیلد مطابقت نداشت، شرودینگر بعد از مدتی محاسبات غیر نسبیتی اش را برای منتشر کردن کافی دانست و در نظر داشت که موضوع تصحیحات نسبیتی را به آینده موکول کند او معادله موج خود و تجزیه و تحلیل طیفی هیدروژن را باهم در سال ١٩٢٦ در یک مقاله قرارداد. مقاله با اشتیاق توسط انیشتین تایید شد، کسی که امواج ماده را به عنوان تصویر شهودی از طبیعت
می دانست و همچنین با مکانیک ماتریس هایزنبرگ که به عنوان قرارداد در آن ذکر شده بود مخالفت کرد.

معادله شرودینگرجزییات رفتار ψ رامطرح می‌کرد اما می‌گفتند چیزی نیست که در طبیعت باشد. شرودینگر سعی داشت در مقاله چهارم نکات ضعف و ابهامات خود را درست کند اما او در این کار ناموفق بود.

در سال ١٩٢٦، تنها در چند روز پس از چهارمین و آخرین مقاله شرودینگر ماکس بورن[٧] موفق به تغییر ψ شد و همچنین دامنه احتمال را به آن مربوط کرد که برابر مربع ψ است.

معادله شرودینگر را می توان طبق رابطه زیر نوشت.

حال برای توصیف معادله شرودینگر، توجه خودمان را به شرح زیر متمرکز می‌کنیم.

$$\mathrm{E}=\mathrm{T}+V=\frac{\mathrm{P}^2}{2m}+V \qquad (٨-١)$$

١. E انرژی کل یک ذره است.

این عبارت کلاسیک برای یک ذره با جرم m، که در آن E انرژی کل، T مجموع انرژی جنبشی و V انرژی پتانسیل (که با زمان و مکان می تواند متفاوت باشد m و P به ترتیب تکانه و جرم ذره است.

٥-Bohr
٣-Arnold Sommerfeld
٤-Klein–Gordon
٦- Max Born

۲. فرضیه کوانتومی بودن نور انیشتین در سال ۱۹۰۵، ادعا می کرد E انرژی فوتون متناسب با فرکانس v (یا فرکانس زاویه ای $\omega = 2\pi\upsilon$) امواج الکترومغناطیسی مربوط است.

$$\mathrm{E} = h\upsilon = \hbar\omega$$

۳. در فرضیه براگ[۸] در سال ۱۹۲٤ بیان می کرد هر ذره را می توان به صورت موج در نظر گرفت که P تکانه آن ذره بود که با طول موج λ ارتباط داشت (یا عدد موج K) P,K را به عنوان بردار بیان می کنیم پس داریم:

$$\mathrm{P} = \hbar\mathrm{K}$$

سه فرضیه بالا به ما این اجازه را می دهد که معادله را فقط برای امواج تخت در نظر بگیریم. پس می توان نتیجه گرفت که این موضوع در حالت کلی درست است و نیاز به اصل انطباق است، به این ترتیب ما معادله شرودینگر را خطی فرض می کنیم.

همچنین شرایط خطی بودن را به فرم زیر داریم:

$$L(\alpha_1,\psi_1 + \alpha_2,\psi_2) = \alpha_1 L\psi_1 + \alpha_2 L\psi_2$$

۸- Broglie

۱-۳ بیان تابع موج به عنوان یک موج صفحه مختلط

نظر شرودینگر این بود که فاز موج تخت را به عنوان فاکتوری از فاز مختلط در نظر بگیرد.

$$\psi(x,t) = Ae^{i(\mathrm{K}.x-\omega t)} \quad (۱-۹)$$

بعد از آن به دست آورد که:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\omega\psi \quad (۱-۱۰)$$

پس:

$$\mathrm{E}\psi = \hbar\omega\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \quad (۱-۱۱)$$

و سپس به همین ترتیب:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = i\mathrm{K}_x\psi \quad (۱-۱۲)$$

و:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -\mathrm{K}_x^2\psi \quad (۱-۱۳)$$

پیدا می کنیم:

$$\mathrm{P}_x^2\psi = (\hbar\mathrm{K}_x)^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi \quad (۱-۱۴)$$

به طوری که بازهم او برای امواج تخت بدست آورد.

$$\mathrm{P}^2\psi = \left(\mathrm{P}_x^2+\mathrm{P}_y^2+\mathrm{P}_z^2\right)\psi = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)\psi = -\hbar^2\nabla^2\psi \quad (۱-۱۵)$$

و با قراردادن این عبارت برای انرژی و تکانه در فرمول کلاسیکی که در ابتدا آغاز کردیم معادله شرودینگر را برای یک ذره تنها در صورت ۳ بعدی در حضور پتانسیل v بدست می آوریم:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi \quad (۱-۱۶)$$

۱-٤ تفسیرها

معادلات مختلفی با نام شرودینگر وجود دارد:

۱-٤-۱ معادلات وابسته به زمان

این معادله حرکت برای حالت کوانتومی است. شکل کلی آن به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\widehat{\mathrm{H}}\psi(x,t) \qquad (۱۷-۱)$$

در اینجا $\hat{\mathrm{H}}$ یک عملگر خطی است که عاملی روی تابع موج است. یک ذره منفرد در حال حرکت در یک بعد تحت تاثیر پتانسیل V.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x)\psi(x,t) \qquad (۱۸-۱)$$

برای یک ذره در سه بعد تنها تفاوت در مشتقات آن است:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z,t)+V(x,y,z)\psi(x,y,z,t) \qquad (۱۹-۱)$$

و برای ذرات N بعدی تفاوت اینست که تابع موج در فضای ۳N بعدی پیکربندی می شود و پراکندگی مکان های ذره همه جا امکان پذیر است.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x_1...,x_n,t)=\hbar^2\left(-\frac{\nabla_1^2}{2m_1}--\frac{\nabla_2^2}{2m_2}....--\frac{\nabla_N^2}{2m_N}\right)\psi(x_1...,x_n,t)$$
$$+V(x_1...,x_n,t)\psi(x_1...,x_n,t))$$

(۲۰-۱)

این معادلات در ابعاد بالاست به طوری که راه حل آن ساده به نظر نمی رسد.

۱-٤-۲ معادله مستقل از زمان

این معادله برای امواج ایستاده است، که معادله ویژه مقداری آن برای $\hat{\mathrm{H}}$ است. معادله شرودینگر مستقل از زمان را می توان از نسخه وابسته به زمان با فرض وابستگی به زمان از تابع موج $\psi(x,t)=\psi(x)e^{\frac{-i\mathrm{E}t}{\hbar}}$ به دست آورد.

این تنها در صورتی ممکن است که هامیلتونی تابع صریح و روشنی از زمان نباشد و در غیر این صورت این معادله به بخش های مکانی و زمانی جدا نشدنی نیست. عملگر $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ را می‌توانیم به وسیله E جایگزین کنیم. در فرم انتزاعی برای یک سیستم کوانتومی به طور کلی نوشته شده است.

$$\hat{\mathrm{H}}\psi=\mathrm{E}\psi$$

برای یک ذره در یک بعد،

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

اگر در گستره ی L^2 بهنجار باشد بطوری که یک حالت انرژی را درنظر بگیریم با بهنجارش L^2 محدود می‌شود. اما اگر در یک بخش پیوستگی در نظر گرفته شود، بهنجارش آن به تدریج واگرا می‌شود.

$$\|\psi\|^2=\int|\psi(x)|^2dx \tag{۱-۲۱}$$

به عنوان مثال، زمانی که پتانسیل نداریم.

$$-\mathrm{E}\psi=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{۱-۲۲}$$

که جواب های نوسانی برای $\mathrm{E}\succ 0$ (C_nثابت دلخواه)

$$\psi_{\mathrm{E}}(x)=C_1e^{ix\sqrt{\frac{2me}{\hbar^2}}}+C_2e^{-ix\sqrt{\frac{2me}{\hbar^2}}} \tag{۱-۲۳- الف}$$

و جواب نمایی برای $\mathrm{E}\prec 0$

$$\psi_{-|\mathrm{E}|}(x)=C_1e^{x\sqrt{\frac{2m|e|}{\hbar^2}}}+C_2e^{-x\sqrt{\frac{2m|e|}{\hbar^2}}} \tag{۱-۲۳-ب}$$

جواب نمایی ادامه پیدا می کند و نورم آن نامحدود است و فیزیکی نیست. آنها در حجم محدود با شرایط تناوبی باشرایط مرزی ثابت پذیرفته شده نیستند.

برای پتانسیل ثابت، جواب های نوسانی برای $\mathrm{E}\succ V$ و نمایی برای $\mathrm{E}\prec V$ داریم، که به انرژی های مجاز و غیر مجاز در مکانیک کلاسیک مربوط می شود. راه حل های نوسانی انرژی مجازکلاسیکی دارند ومطابق باحرکات واقعی کلاسیک هستند درحالی که راه حل های نمایی انرژی غیرمجازدارند و ذرات کوچک کوانتومی را به واسطه تونل زنی کوانتومی وارد منطقه غیر مجاز کلاسیکی شده اند را توصیف می کند. در شرایطی که نمایی کاهنده باشد سطوح انرژی را به یک مجموعه گسسته محدود می کند که به آن انرژی مجاز می گوئیم.

۱-٤-۳ معادله شرودینگر غیر خطی

معادله غیر خطی شرودینگر، معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی است.

$$i\partial_x \psi = -\frac{1}{2}\partial_x^2 \psi + \mathrm{K}|\psi|^2 \psi \qquad (۲٤-۱)$$

این معادله از هامیلتونین به دست می آید.

$$\mathrm{H} = \int dx \left[\frac{1}{2}|\partial_x \psi|^2 + \frac{\mathrm{K}}{2}|\psi|^4 \right] \qquad (۲٥-۱)$$

بابراکت پواسون

$$\{\psi(x), \psi(y)\} = \{\psi^*(x), \psi^*(y)\} = 0 \qquad (۲٦-۱)$$

$$\{\psi^*(x), \psi(y)\} = i\delta(x-y) \qquad (۲۷-۱)$$

این یک معادله میدان کلاسیک است و بر خلاف رابطه خطی خود حالت کوانتومی را با گذر زمان توصیف نمی کند.