- ક્વોન્ટમ યંત્રશાસ્ત્ર (Quantum mechanics)

➤ એક પરિમાણમાં મુક્ત કણ માટેનું શ્રોડીંજર સ.ક.

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

➤ તેને ત્રિપરિમાણમાં નીચે પ્રમાણે લખી શકાય.

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

➤ બળ લાગતું હોય તેવા કણ માટેનું શ્રોડીંજર સ.ક.

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

➤ $\int |\psi(r,t)|^2 \, d^3r = 1$ હોય તેવા તરંગ વિધેય ને નોર્મલાઈઝ તરંગવિધેય કહે છે.

નોર્મલાઈઝ ન હોય તેવા તરંગવિધેય ને નોનનોર્મલાઈઝ તરંગવિધેય કહે છે.

➤ ઉર્જા અને વેગમાન ને નીચેના ઓપરેટર દર્શાવિ શકાય.

$E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ $\qquad$ $P \rightarrow -i\hbar\nabla$

- <u>સંભાવના નું સંરક્ષણ (Conservation of Probability)</u>:

નોર્મલાઈઝ તરંગ વિધેયનું સંભાવના સમીકરણ $\int |\psi(r,t)|^2 \, d^3r = 1$ સુચવે છે કે અવકાશના કોઈ એક બિંદુએ કણ હોવું જ જોઈએ. જો કણ સ્થિર હોય અને તેનો ક્ષય ન થતો હોય તો આ વિધાન બધાજ સમય માટે સાચું છે. આથી કુલ સંભાવનાનું સંરક્ષણ થાય છે. એટલેકે $|\psi|^2$ સમયથી સ્વતંત્ર હોવું જોઈએ.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\psi|^2 \, d^3r = \int \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 \, d^3r = 0 \quad \text{-------------(1)}$$

(અહી સંકલન અવકાશીય યામો પર હોવાથી સમય સાપેક્ષ વિકલન, સંકલનની અંદર લઈ શકાય છે.)

આપણે સાબિત કરીએકે આ શરત ખરેખર સંતોષાય છે.

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi)$$

$$= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \quad \text{--------------(2)}$$

$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$ જ્યાં H = હેમિલ્ટોનિયન ઓપરેટર

$\frac{\partial\psi}{\partial t} = (i\hbar)^{-1} H\psi$ ---------------(3)

તેનો સંકીણ અનુબદ્ધ

$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = H\psi^*$

$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -(i\hbar)^{-1} H\psi^*$ ---------------(4)

સ.ક. (3) અને સ.ક.(4) નું મૂલ્ય સ.ક.(2) માં મૂકતા

$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = (i\hbar)^{-1}[\psi^*(H\psi) - \psi((H\psi^*)]$---------(5)

સ્થીતિમાન V(r,t) માં રહેલા એક કણ માટે ક્વોન્ટમ હેમિલ્ટોનિયન ઓપરેટર નીચેના સમી. વડે દર્શાવાય છે.

$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)$ ---------------(6)

સ.ક. (5) માં આ કીમત મૂકતા

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = (i\hbar)^{-1}\left[\psi^*\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)\right\}\psi - \psi\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)\right\}\psi^*\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\times -\frac{\hbar^2}{2m}[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*]$$

ઉપરના સ.ક. ની જ.બા. ને ઉપર નીચે 'i' વડે ગુણતા

$$\int\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2\, d^3r = \frac{i\hbar}{2m}\int[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*]\, d^3r$$

$$\int\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2\, d^3r = \frac{i\hbar}{2m}\int\nabla[\psi^*\nabla\psi - \psi(\nabla\psi^*)]\, d^3r \text{ ---(7)}$$

- નોધ: $\nabla(\psi^*\nabla\psi) = \psi^*(\nabla\nabla\psi) + (\nabla\psi)(\nabla\psi^*) - - - -(a)$ તથા

$$\nabla(\psi\nabla\psi^*) = \psi(\nabla\nabla\psi^*) + (\nabla\psi^*)(\nabla\psi) - - - -(b)$$

સ.ક.(a) માંથી સ.ક.(b) બાદ કરતાં ઉપર પ્રમાણેના સ.ક. મળશે.

$$\nabla[\psi^*\nabla\psi - \psi(\nabla\psi^*)] = [\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*]$$

વળી, $\frac{\partial}{\partial t}P(r,t) + \text{div } S(r,t) = 0$ ---------------(8)

સ.ક.(7) અને સ.ક.(8) ને સરખાવતાં

$P(r,t) = |\psi|^2 = \psi^*\psi$

અને $S(r,t) = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi - \psi(\nabla\psi^*)]$

સ.ક.(8)નું સમગ્ર અવકાશ પર સંકલન કરતાં

$$\frac{\partial}{\partial t}\int P\, d^3r = -\int div\, S\, d^3r$$

$$= -\int_\sigma \vec{S}\,\vec{n}\, d\sigma \text{ ------------(9)}$$

સ.ક.(9) માં dσ સપાટી ખંડ દર્શાવે છે.સ.ક.(9) માં સંકલન સમગ્ર અવકાશ પર લીધું છે. આથી સપાટી σ અનંત અંતરે મળે છે. જ્યાં ψ અને ∇ψ શુન્ય થાય છે. પરીણામે $\vec{S}$ પણ શુન્ય બને છે.આમ સ.ક.(9) માં જમણીબાજુનું સપાટી સંકલન શુન્ય બને છે.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int P\, d^3r = \frac{\partial}{\partial t}\int|\psi^2|\, d^3r=0$$

આમ, કુલ સંભાવનાનું સંરક્ષણ દર્શાવતી શરત(1) ખરેખર સંતોષકારક છે. તેથી નોર્મલાઈઝેશનની શરત $\int|\psi(r,t)|^2\, d^3r = 1$ સમયથી સ્વતંત્ર છે.

- **<u>અપેક્ષા મૂલ્ય(Expectation values):</u>**

વિશીષ્ટ તરંગ વિધેય ψ ધરાવતા કણોનાં સ્થાનનાં અનેક અવલોકનો લેવામાં આવેતો કેવા પરિણામો મળશે તેની માહિતી સંભાવનાના અર્થઘટન વડે મળે છે.ધારોકે કોઈ એક કણનું સ્થાન નક્કિ કરવાના પ્રયોગમાં નીચે મુજબ અવલોકનો મળે છે.

કુલ N અવલોકનો માંથી

n_1 વખત કણ $\vec{r}_1$ પાસે

n_2 વખત કણ $\vec{r}_2$ પાસે

n_3 વખત કણ $\vec{r}_3$ પાસે

n_j વખત કણ $\vec{r}_j$ પાસે

$\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$, ---------- $\vec{r}_j$ વગેરેના મૂલ્યો અવકાશમાં સતત પથરાયેલા છે.

કણના સ્થાનનું અપેક્ષા મૂલ્ય

$$\langle r \rangle = \frac{n_1\vec{r}_1 + n_2\vec{r}_2 + \text{---------} + n_j\vec{r}_j}{n_1 + n_2 + n_3 + \text{-----------} + n_j}$$

જ્યાં $n_1 + n_2 + n_3 +$ --------- $+ n_j$ =N= કુલ અવલોકનોની સંખ્યા

$$< r > = \frac{n_1\vec{r}_1 + n_2\vec{r}_2 + \text{--------} + n_j\vec{r}_j}{N}$$

$$= \frac{n_1}{N}\vec{r}_1 + \frac{n_2}{N}\vec{r}_2 + \text{----------} + \frac{n_j}{N}\vec{r}_j$$

પરંતુ $\frac{n_1}{N}$ = કણને $\vec{r}_1$ પર શોધવાની સંભાવના = $P(\vec{r}_1)$

$\frac{n_2}{N}$ = કણને $\vec{r}_2$ પર શોધવાની સંભાવના = $P(\vec{r}_2)$ -----વગેરે

$$< r > = P(\vec{r}_1)\,\vec{r}_1 + P(\vec{r}_2)\,\vec{r}_2 + \text{-------}$$

જ્યાં $\vec{r}_1, \vec{r}_2$, ------વગેરે અવકાશમાં સતત પથરાયેલા હોવાથી આ સરવાળાને સંકલનના રૂપમાં લખી શકાય.

$$< r > = \int P(\vec{r}_j)\,\vec{r}_j\, d^3\vec{r}_j$$

$$< r > = \int \psi^* r\, \psi\, d^3 r$$

- <u>**એહરેનફેસ્ટનું પ્રમેય(Ehrenfest's Theorem):**</u>

પ્રમેયનું કથન

$$\frac{d<P>}{dt} = <F> = <-\nabla V>$$

સ્થાનનું અપેક્ષા મૂલ્ય નીચે પ્રમાણે લખાય

$$<r> = \int \psi^* r\, \psi\, d^3 r \text{ --------------(1)}$$

સ.ક.(1) નું સમય t સાપેક્ષ વિકલન કરતાં

$$\frac{d<r>}{dt} = \int \left[\frac{\partial\psi^*}{\partial t} r\,\psi + \psi^* r\,\frac{\partial\psi}{\partial t}\right] d^3 r \text{ -----(2)}$$

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

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right] \text{ ------------(3)}$$

(3) નો સંકીણ અનુબધ્ધ

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{1}{-i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*\right] \text{ ---------(4)}$$

સ.ક.(2) માં સ.ક.(3) અને સ.ક.(4) ની કીમત મૂકતા

$$\frac{d<r>}{dt} = \int \left\{ \frac{1}{-i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi^* + V \psi^*\right] r\,\psi + \psi^* r \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi + V\psi\right] \right\} d^3r$$

$$\frac{d<r>}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int \left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi^*(r\,\psi) - \frac{\hbar^2}{2m}(\psi^* r)\nabla^2 \psi\right] d^3r$$

ઉપરના સ.ક.ની જ.બા.ને ઉપર નીચે ' i ' વડે ગુણતા

$$\frac{d<r>}{dt} = \frac{-i\hbar}{2m}\int [\nabla^2 \psi^*(r\,\psi) - (\psi^* r)\nabla^2 \psi]\, d^3r$$

$$\frac{d<r>}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int [(\psi^* r)\nabla^2 \psi - \nabla^2 \psi^*(r\,\psi)]\, d^3r$$

પરંતુ $\int \nabla^2 \psi^*(r\,\psi)\, d^3r = \int \psi^* \nabla^2(r\,\psi)\, d^3r$

$$\frac{d<r>}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int [(\psi^* r)\nabla^2 \psi - \psi^*\nabla^2(r\,\psi)]\, d^3r \text{ ------(5)}$$

$$\nabla^2(r\,\psi) = \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\,\psi)$$

$$= \frac{\partial}{\partial r}\left\{\frac{\partial}{\partial r}(r\,\psi)\right\}$$

$$= \frac{\partial}{\partial r}\left\{r\frac{\partial \psi}{\partial r} + \psi\right\}$$

$$= r\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

$$= r\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + 2\frac{\partial \psi}{\partial r}$$

$= \mathrm{r}\ \nabla^2 \psi + 2\nabla\psi$ આ કિમત સ.ક.(5) ,માં મૂકતા

$$\frac{d<r>}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int [(\psi^* r)\nabla^2 \psi - \psi^*\, \mathrm{r}\ \nabla^2 \psi - 2\psi^*\nabla\psi]\, d^3r$$

$$= -\frac{i\hbar}{m}\int [\psi^*\nabla\psi]\, d^3r \text{ --------(6)}$$

$$\frac{d<r>}{dt} = \frac{1}{m}\int \psi^*(-i\hbar\nabla)\psi\, d^3r$$

$$= \frac{1}{m} < P>$$

સરેરાશ વેગમાન અથવા વેગમાનનું 'અપેક્ષા મૂલ્ય' નીચે મુજબ વ્યાખ્યાયિત કરી શકાય.

$<P> = m\ \frac{d<r>}{dt}$ $\qquad\qquad \left[P = mv = m\frac{dr}{dt}\right]$

પરતું $m\frac{d<r>}{dt} = -i\hbar\int\psi^*\nabla\psi\, d^3r$

$<P> = \int\psi^*(-i\hbar\nabla)\psi\, d^3r$ ----------(7)

ઉપરના સ.ક.માં ($-i\hbar\nabla$) ને P ઓપરેટર કહે છે. જે ક્વોન્ટમયંત્રશાસ્ત્રીય વેગમાન દર્શાવે છે.

$<P> = \int\psi^* P_{op}\ \psi d^3r$

સ.ક.(7)નું સમય સાપેક્ષ વિકલન કરતાં

$$\frac{d<P>}{dt} = \int\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial t}(-i\hbar\nabla)\psi + \psi^*(-i\hbar\nabla)\frac{\partial\psi}{\partial t}\right]d^3r$$

સ.ક.(3) અને સ.ક.(4) માંથી કિમત મૂકતા

$$\frac{d<P>}{dt} = \int\left\{\frac{1}{-i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\ \psi^*\right](-i\hbar\nabla)\psi + \psi^*(-i\hbar\nabla)\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right]\right\}d^3r$$

$$\frac{d<P>}{dt} = \int\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\ \psi^*\right]\nabla\psi - \psi^*\nabla\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right]\right\}d^3r$$

$$\frac{d<P>}{dt} = \int -\frac{\hbar^2}{2m}\{\nabla^2\psi^*(\nabla\psi) - \psi^*\nabla(\nabla^2\psi\}\, d^3r$$

$$+\int\{V\ \psi^*(\nabla\psi) - \psi^*\nabla(V\psi)\}\, d^3r$$

ગ્રીન પ્રમેય અને તરંગ વિધેય પર સીમા શરત અનુસાર ઉપરના સ.ક.માં જ.બા.નું પ્રથમ પદ શુન્ય બને છે.

તથા $\nabla(V\psi) = V\nabla\psi + \psi\nabla V$ ઉપરના સ.ક.માં મૂકતા

$$\frac{d<P>}{dt} = \int[V\ \psi^*(\nabla\psi) - \psi^* V\nabla\psi - \psi^*\psi\,\nabla V]\ d^3r$$

$$= \int -\psi^*\psi\,\nabla V\ d^3r$$

$$= -\int\psi^*(\nabla V)\psi\ d^3r$$

$$\frac{d<P>}{dt} = <F> = -<\nabla V> \text{ ------(8)}$$

સ.ક.(8) એ અપેક્ષા મૂલ્યોના સંદર્ભમાં ન્યુટનની ગતિનો બીજો નિયમ $\frac{d}{dt}P = F$ છે.

[ન્યુટનની ગતિનો બીજો નિયમ F =ma, $P = mv = m\frac{dr}{dt}$, $\frac{dP}{dt} = m\frac{d^2r}{dt^2} = ma = F$]

સ.ક.(8)ને એહરેનફેસ્ટનું પ્રમેય કહે છે. તે દર્શાવે છે કે કણની ગતિના સ.ક. અને કણ સાથે સંબંધિત તરંગ પેકેટની ગતિના સ.ક. વચ્ચે સંપૂર્ણ સામ્ય છે.

- **તરંગ વિધેય પરની શરતો(Admissibility condition on the wave function):**

તરંગ વિધેયનું સંભાવના અર્થઘટન સૂચવેછે કે ψ કેટલીક ચોક્કસ વ્યાપક શરતોને સંતોષે એ જરૂરી છે.

(1) તરંગ વિધેય પરિમિત હોવું જોઈએ.

$|\psi|^2 d^3r$ એ કણને સુક્ષ્મ કદખંડ d^3r માં શોધવાની સંભાવના દર્શાવે છે. આ સ્થિતિમાં $|\psi|^2 d^3r$ નું મૂલ્ય હંમેશા 0 અને 1 ની વચ્ચે મળે છે. અને તે ત્યારે જ શક્ય બને કે જયારે $|\psi|^2$ અને તેથી $|\psi|$ પરિમિત હોય.

(2) તરંગ વિધેય એક મૂલ્ય હોવું જોઈએ.

તરંગ વિધેયની એક મુલ્યતા એટલે ψ નું મૂલ્ય (r,θ,ϕ) મૂકીને શોધીએ કે (r,θ,θ+2πn) મૂકીને શોધીએ તો બંન્ને રીતે ψ ના મૂલ્યો સમાન મળવા જોઈએ.(બંન્ને યામ પદ્ધતિથી ψ નું મૂલ્ય સમાન મળવું જોઈએ) એટલેકે કોઈ બિંદુ પાસે કણને શોધવાની સંભાવના ઘણીબધી ન હોઈ શકે. કણને કોઈ એક બિંદુ પાસે શોધવાની સંભાવના એક મૂલ્ય જ હોવી જોઈએ.

(3) ψ અને તેના પ્રથમ અંશતઃ વિકલન $\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y},$ અને $\frac{\partial\psi}{\partial z}$ $\vec{r}$ નાં બધાંજ મૂલ્યો માટે સતત વિધેય હોવા જોઈએ.

શ્રોડીજર સ.ક. માં સ્થિતિઉર્જા વિધેય V(r) એ r નું સતત વિધેય હોય કે કોઈ બિંદુ પાસે પીરીમિત અસાતત્ય હોય ત્યારે આ શરત જરૂરી છે.[તે વિધેય ψ ની મર્યાદા દર્શાવે છે.] તે માટે એક પારિમાણિક શ્રોડીજર સ.ક.નો ઉપયોગ કરીશું.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi \text{ ------------(1)}$$

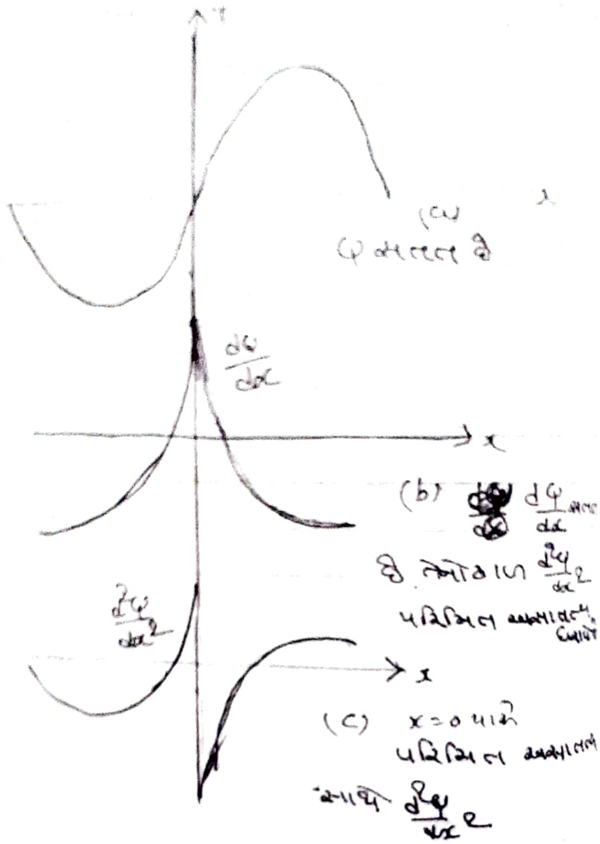
આ સ.ક.માં ડાબીબાજુ ψ એ x નું દરેક સમયે સતત વિધેય છે. તેથી $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ પણ x નું સતત વિધેય જ હશે. તે દર્શાવે છે કે સ.ક.(1)ની જ.બા. પણ નું સતત વિધેય હોવું જોઈએ.

(1) જો V(r) સતત હોયતો સ.ક.(1) ની જ.બા. x નું સતત વિધેય મળી શકે.

(2) ધારોકે V માં કોઈ બિંદુ પાસે પરિમિત અસાતત્ય છે તેથી Vψ માં પરિમિત અસાતત્ય હશે. આ પરિમિત અસાતત્ય નાબૂદ થઈજાય તેટલુ વિરુદ્ધ પ્રકારનું અસાતત્ય $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ માં હોવું જોઈએ. હવે $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ એ $\frac{d\psi}{dx}$ નો ઢાળ છે આ સ્થિતિમાં $\frac{d\psi}{dx}$ કોઈ બિંદુ પાસે એવીરીતે સતત

હોય કે તે બિંદુ પાસે તેનો ઢાળ($\frac{d^2\psi}{dx^2}$) પરિમિત અસાતત્ય ધરાવે. આ સ્થિતિ માં ψ સતત મળી શકે.

આમ, જે તરંગ વિધેયો ઉપરની શરતો સંતોષે તેવા તરંગ વિધેયો ને સ્વીકાર્ય તરંગ વિધેયો કહે



- **<u>સ્થિત સ્થિતિઓ અને સમયથી સ્વતંત્ર શ્રોડીજર સ.ક.(Stationary state and Time independent schrodinger equation):</u>**

કોઈ એક કણ એવો ધારોકે જેમાં કણની સ્થિતિઉર્જા સમયથી સ્વતંત્ર હોય. એટલેકે કણ સ્થિર ક્ષેત્રમાં ગતિ કરતો હોય.

આ સ્થિતિમાં શ્રોડીજર સ.ક.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \text{ -----------(1)}$$

નો ઉકેલ નીચે પ્રમાણે લખી શકાય.

$$\psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})\, f(t) \text{ ------------(2)}$$

ચલોને છુટા પડવાની પદ્ધતિ નો ઉપયોગ કરતાં (method of separation of variables)

$$i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} u(\vec{r}) = \frac{-\hbar^2}{2m} f(t)\, \nabla^2 u(\vec{r}) + V(r)u(\vec{r})\, f(t) \text{ --------(3)}$$

સ.ક.(3) ને $u(\vec{r})\,f(t)$ વડે ભાગતા

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{u}\nabla^2 u(\vec{r}) + V \text{ ---------(4)}$$

સ.ક.(4)માં ડાબીબાજુ માત્ર t ઉપર આધાર રાખે છે જયારે જ.બા. માત્ર r ઉપર આધાર રાખે છે.

બંન્ને બાજુ બરાબર સમાન અચળ E લખતા

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{\partial f}{\partial t} = E$$

$$\frac{df}{dt} = \frac{E}{i\hbar} f$$

આ સ.ક.નો ઉકેલ $f = A\,e^{-iEt/\hbar}$ છે.

તથા $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{u}\nabla^2 u(\vec{r}) + V = E$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 u + Vu = Eu \text{ ------------(5)}$$

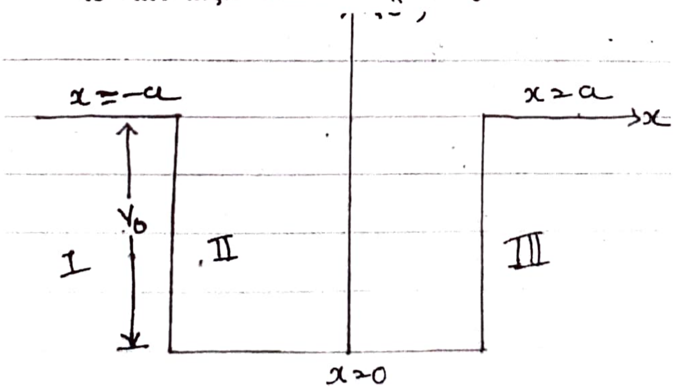
સ.ક.(5)ને સમયથી સ્વતંત્ર શ્રોડીજર સ.ક. કહે છે.

E ના ચોક્કસ (વાસ્તવિક) મૂલ્યો માટે જ સ્વીકાર્ય ઉકેલો મળી શકે છે. બંધીત કણોના કિસ્સામાં E ના આ મૂલ્યો અસતત હોય છે.આવી રીતે મળેલા E ના મૂલ્યોને ઉર્જા આયગન મૂલ્યો કહે છે અને તેને અનુરૂપ ઉકેલોને ઉર્જા આયગન વિધેય કહે છે.

જયારે કોઈ કણનો હેમિલ્ટોનિયન સમયથી સ્વતંત્ર હોય ત્યારે તે કણના યાંત્રિક ચલોના અપેક્ષા મૂલ્યો સમય પર આધાર રાખતા નથી. આવા કોયડાઓને સ્થિત સ્થિતિ કોયડાઓ કહે છે.

- **એક પારિમાણિક સ્થીતિમાન કૂપ (ona dimension potential well):**

એક પારિમાણિક સ્થીતિમાન કૂપ આકૃતિ માં દર્શાવ્યો છે.



અહી કણની સ્થિતિઉર્જા નીચે પ્રમાણે લખી શકાય.

$V(x) = 0 \qquad x < -a$

$= -V_0, \qquad -a < x < a$

$= 0, \qquad x > a$

પ્રથમ આવા સ્થીતિમાન વિધેય ધરાવતા કણની ગતિનો વિચાર પ્રચલિત યંત્રશાત્રના(classical mechanics) સંદર્ભમાં કરીએ.

ધારોકે કણની કુલ ઉર્જા E ઋણ છે.($E < 0$)

કુલ ઉર્જા E = ગતિઉર્જા + સ્થિતિઉર્જા

ગતિઉર્જા = $E - V(x)$

વિસ્તાર (1)માં $V=0$ હોવાથી ગતિઉર્જા = E જે ઋણ છે.

વિસ્તાર (2)માં ગતિઉર્જા = $E - V$

$= E + V_0 \qquad [V = -V_0]$

$E < V_0$, તેથી ગતિઉર્જા ધન થશે.

વિસ્તાર (3) માં $V=0$ હોવાથી ગતિઉર્જા = E જે ઋણ છે.

હવે પ્રચલિત યંત્રશાત્ર મુજબ કણની ગતિઉર્જા ઋણ હોઈ શકે નહી એટલેકે આ કિસ્સામાં ($E < V_0$)માં કણ વિસ્તાર (1) અને વિસ્તાર (3) માં રહી શકે નહી. આમ કણની ગતિ માત્ર $x = -a$ થી $x = a$ વચ્ચેજ સીમિત રહેવી જોઈએ. આ કિસ્સાઓને bound state problem કહેવામાં આવે છે.

હવે ક્વોન્ટમ યંત્રશાત્ર પ્રમાણે વિચારતા જુદાં જુદાં વિસ્તારમાં કણની સ્થીતિઉર્જાના બેજીક સ્વરૂપો જુદાં જુદાં હોવાથી દરેક વિસ્તાર માટે અલગ અલગ શ્રોડીજર સ.ક. લખવું જોઈએ.

સમયથી સ્વતંત્ર શ્રોડીજર સ.ક.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 u + Vu = Eu$$

વિસ્તાર(1) અને (3) માટે

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dx^2} = E\,u \text{ ------------(1) } \quad -\infty < x < -a,\ a < x < \infty$$

વિસ્તાર (2) માટે

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

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} - V_0\; u = E\, u \text{ -------------(2)} \qquad -a < x < a$$

ઉપરના સ.ક.નો ઉકેલ $E < 0$ કે $E > 0$ ઉપર આધાર રાખે છે.

$E < 0$ માટે ચર્ચા કરતાં

- <u>તરંગ વિધેય ના શક્ય ઉકેલ :</u>

સ.ક.(1) અને (2) નીચે પ્રમાણે લખી શકાય.

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\, u \text{ ----------(3)}$$

તથા $$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} = (E + V_0)$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{-2m}{\hbar^2}(E + V_0)\, u \text{ ---------------(4)}$$

ધારોકે $\frac{2mE}{\hbar^2} = -\alpha^2$ અને $\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \beta^2$ $\alpha,\beta > 0$

સ.ક.(3) અને (4) નીચે પ્રમાણે લખાય

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \alpha^2\, u$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \alpha^2\, u = 0 \text{ -------------(5)}$$ વિસ્તાર (1),(3) માટે

તથા $$\frac{d^2u}{dx^2} = -\beta^2\, u$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \beta^2\, u = 0 \text{ ------------(6)}$$ વિસ્તાર (2) માટે

વિસ્તાર (1)

સ.ક.(5) વિસ્તાર (1) માટે છે.

એટલેકે $x = -\infty$ થી $x = -a$ સુધીનો વિસ્તાર.

સ.ક.(5) નો વ્યાપક ઉકેલ બે સ્વતંત્ર ઉકેલ $e^{\alpha x}$ અને $e^{-\alpha x}$ નું linear combination છે.

u (x) = C $e^{\alpha x}$ + D $e^{-\alpha x}$ -------------(7)

ઉપરના સ.ક.માં x= -∞ મૂકતા

u (x) = C $e^{-\infty\alpha}$ + D $e^{\infty\alpha}$

$= \frac{C}{e^{\infty\alpha}}$ + D $e^{\infty\alpha}$

= 0 + D $e^{\infty\alpha}$

જયારે X → -∞ ત્યારે u (x) → 0 થવું જોઈએ.

હવે u(x) = 0 થવા માટે D = 0 થવું જોઈએ.

u^I (x) = C $e^{\alpha x}$ -----------(8)

વિસ્તાર (3)

સ.ક.(5) વિસ્તાર (3) માં છે. એટલેકે x =a થી x = ∞ સુધી નો વિસ્તાર

X → ∞ થાય ત્યારે u(x) = 0 થવું જોઈએ.

સ.ક. (7) માં x = ∞મૂકતા

u (x) = C$e^{\infty\alpha}$ + D $e^{-\infty\alpha}$

= C$e^{\infty\alpha}$ + $\frac{D}{e^{\infty\alpha}}$

= C$e^{\infty\alpha}$ + 0

હવે U(x) =0 થાય ત્યારે C=0 થવું જોઈએ.

u^{III} (x) = D $e^{-\alpha x}$ ----------(9)

વિસ્તાર (2)

સ.ક.(6) આ વિસ્તારમાં આવે છે. તેનો ઉકેલ

u^{II}(x) = A cos βx + B sin βx -------------(10)

જ્યાં A, B, C, અને D અચળાંક છે. હવે તેની કિમત નક્કિ કરવી છે.આ ઉકેલ પર તરંગ વિધેયની સીમા શરત લાગુ પાડતા

X = - a બિંદુ પાસે વિસ્તાર (1) અને (2) ને સરખાવતાં

$u^{I}(x=-a) = u^{II}(x=-a)$

સ.ક. (8) અને (10) પરથી

$C\,e^{\alpha x} = A\cos\beta x + B\,\sin\beta x$ માં X = -a મૂકતા

$C\,e^{-\alpha a} = A\cos(-\beta a) + B\,\sin(-\beta a)$

$C\,e^{-\alpha a} = A\cos\beta a - B\,\sin\beta a$ -------------(11)

$\frac{d\,u^{I}}{dx}(x=-a) = \frac{d\,u^{II}}{dx}(x=-a)$

$C\alpha\,e^{\alpha x} = -A\beta\sin\beta x + B\beta\cos\beta x$ માં X = -a મૂકતા

$C\alpha\,e^{-\alpha a} = A\beta\sin\beta a + B\beta\cos\beta a$ -----------(12)

તેજ પ્રમાણે x = a બિંદુ પાસે વિસ્તાર (2) અને (3) સરખાવતાં

$u^{II}(x=a) = u^{III}(x=a)$

સ.ક.(9) અને (10) પરથી

$A\cos\beta x + B\,\sin\beta x = D\,e^{-\alpha x}$

X = a મૂકતા

$D\,e^{-\alpha a} = A\cos\beta a + B\,\sin\beta a$ -------------(13)

$\frac{d\,u^{II}}{dx}(x=a) = \frac{d\,u^{III}}{dx}(x=a)$

$-A\beta\sin\beta x + B\beta\cos\beta x = -D\alpha\,e^{-\alpha x}$ માં X = a મૂકતા

$-D\alpha\,e^{-\alpha a} = -A\beta\sin\beta a + B\beta\cos\beta a$ -----------(14)

સ.ક.(11) અને (13) નો સરવાળો કરતાં

$C\,e^{-\alpha a} = A\cos\beta a - B\,\sin\beta a$

$D\,e^{-\alpha a} = A\cos\beta a + B\,\sin\beta a$

$(C+D)\,e^{-\alpha a} = 2A\cos\beta a$ -----------------(15)

બાદબાકી કરતાં

$(C-D)\,e^{-\alpha a} = -2B\sin\beta a$ ------------(16)

સ.ક.(12) અને (14) ની બાદબાકી કરતાં

C α $e^{-\alpha a}$ = A β sin βa + B β cos βa

- D α $e^{-\alpha a}$ = -A β sin βa + $B\,\beta$ cos βa

(C + D) α $e^{-\alpha a}$ = 2 A β sin βa -----------(17)

(C - D) α $e^{-\alpha a}$ = 2 B β cos βa -----------(18)

C + D ‡ 0 ત્યારે A ‡ 0

સ.ક.(15) ને સ.ક.(17) વડે ભાગતા

$$\frac{(C+D)\,\alpha\, e^{-\alpha a}}{(C+D)\, e^{-\alpha a}} = \frac{2\,A\,\beta\,\sin\beta a}{2\,A\,\cos\beta a}$$

α = β tan βa

α નું આ મૂલ્ય યોગ્ય સ.ક.માં મૂકતા નીચેના ઉકેલ મળશે.

$$\boxed{\begin{array}{l} \alpha = \beta \tan \beta a \\ C = D \\ B = A) \\ D = A\, e^{\alpha a} \cos \beta a \end{array}}$$

-----(A)

આ એક પ્રકારનો ઉકેલ છે.

સ.ક.(18) ને સ.ક.(16) વડે ભાગતા

$$\frac{(C-D)\,\alpha\, e^{-\alpha a}}{(C-D)\, e^{-\alpha a}} = \frac{2\,B\,\beta\,\cos\beta a}{-2B\,\sin\beta a}$$

α = - β cot βa

α નું આ મૂલ્ય યોગ્ય સ.ક.માં મૂકતા નીચેના ઉકેલ મળશે.

$$\boxed{\begin{array}{l} \alpha = -\beta \cot \beta a \\ C = -D \\ A = 0 \\ D = B\, e^{\alpha a} \sin \beta a \end{array}}$$

____(B)

આ બીજ પ્રકારનો ઉકેલ છે.

(A) અને (B) ઉકેલો મળવાથી કણના ઉર્જા આયગન મૂલ્ય અને ઉર્જા આયગન વિધેયોની માહિતી મળી શકે છે. આવા ઉકેલો આલેખની રીત અથવા સંખ્યાત્મક રીતે મેળવવામાં આવે છે.

- **(b)** ઉર્જા આયગન મૂલ્યો :

$\frac{2mE}{\hbar^2} = -\alpha^2$ અને $\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \beta^2$

$$(\alpha^2+\beta^2)\,a^2 = \left[-\frac{2mE}{\hbar^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}+\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right]a^2$$
$$= \frac{2mV_0}{\hbar^2}\,a^2$$

$$(\alpha^2+\beta^2)\,a^2 = \frac{V_0}{\Delta} \text{ ------------(1)} \quad \text{જ્યાં } \Delta = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

આમ સ.ક.(1) ની શરત સાથે સ.ક.(A) અને (B)નાં ઉકેલ મેળવવા જોઈએ.

<u>ઉકેલ (A) પ્રમાણે</u>

$$\alpha = \beta \tan \beta a$$

α અને β બંન્ને વ્યાખ્યા અનુસાર ધન છે.

તેથી $\frac{\alpha}{\beta} = \tan\beta a$ પણ ધન હોવું જોઈએ. એટલેકે βa ના એવા મૂલ્યો શક્ય છે કે જેથી $\tan\beta a$ ધન બને. βa ના મૂલ્યો પ્રથમ અને ત્રીજા ચરણમાં આવતાં હોયતો $\tan\beta a$ ધન બને.

$$2r\frac{\pi}{2} \le \beta a \le (2r+1)\frac{\pi}{2} \text{ --------------(2)}$$

જ્યાં $r = 0,1,2,$-----

સ.ક.(1) માં $\alpha = \beta \tan\beta a$

$$(\beta^2 \tan^2\beta a + \beta^2)\,a^2 = \frac{V_0}{\Delta}$$

$$\beta^2 a^2(\tan^2\beta a + 1) = \frac{V_0}{\Delta}$$

$$\beta^2 a^2 \sec^2\beta a = \frac{V_0}{\Delta}$$

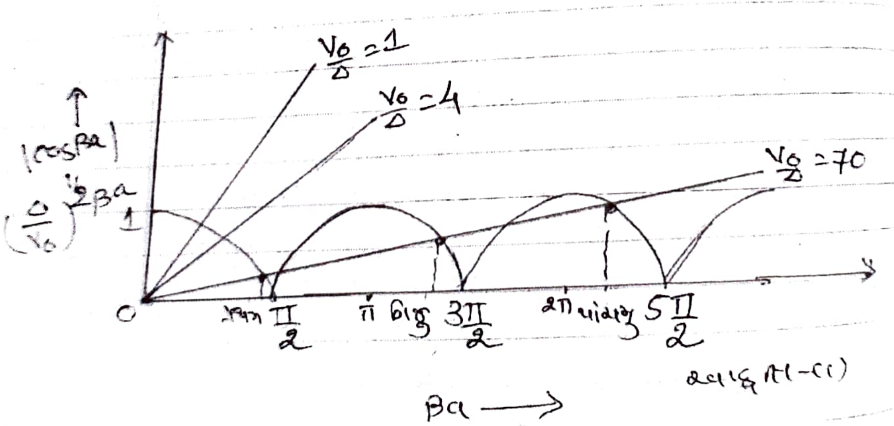
$$\sec^2\beta a = \frac{V_0}{\Delta\beta^2 a^2}$$

$$\cos^2\beta a = \frac{\Delta}{V_0}\beta^2 a^2$$

$$|\cos\beta a| = \left(\frac{\Delta}{V_0}\right)^{\frac{1}{2}}\beta a \text{ -------------(3)}$$

સ.ક.(3) ને સંતોષતિ βa ની કીમતો મેળવવા માટે.

$|\cos\beta a| \rightarrow \beta a$ અને $\left(\frac{\Delta}{V_0}\right)^{\frac{1}{2}}\beta a \rightarrow \beta a$ ના આલેખ દોરવામાં આવે છે. આ આલેખ નીચે આકૃતિમાં દર્શાવ્યો છે. $\left(\frac{\Delta}{V_0}\right)^{\frac{1}{2}}\beta a \rightarrow \beta a$ નો આલેખ સુરેખા મળે છે.



આકૃતિ-(1)

આકૃતિમાં $\frac{V_0}{\Delta}$ ની ત્રણ જુદી જુદી કીમતો માટે આલેખો દર્શાવ્યા છે.તે $\cos\beta a$ ના આલેખને પહેલા, ત્રીજા, પાંચમાં ચરણમાં એકબીજાને છેદે છે તે ઉપરથી βa ની કિમત મેળવી ઉર્જા આયગન મૂલ્યો E_n મેળવવામાં આવે છે.

ઉકેલ **(B)** પ્રમાણે :

$$\alpha = -\beta \cot\beta a$$

$$\frac{\alpha}{\beta} = -\cot\beta a$$

α અને β ધન હોવાથી βa ના મુલ્યો એવા લેવા જોઈએ કે જેથી $\cot\beta a$ ઋણ મળે. βa ના મૂલ્યો બીજા, ચોથા ચરણમાં હોય તો જ $\cot\beta a$ ઋણ બને.

$(2r-1)\frac{\pi}{2} \leq \beta a \leq 2r\frac{\pi}{2}$ -------------(4) જ્યાં $r = 1, 2, 3,$---

સ.ક.(1) માં $\alpha = -\beta\cot\beta a$ મૂકતા

$$(\beta^2 \cot^2 \beta a + \beta^2)\, a^2 = \frac{V_0}{\Delta}$$

$$\beta^2 a^2(\cot^2 \beta a + 1) = \frac{V_0}{\Delta}$$

$$\beta^2 a^2 \ cosec^2\, \beta a = \frac{V_0}{\Delta}$$

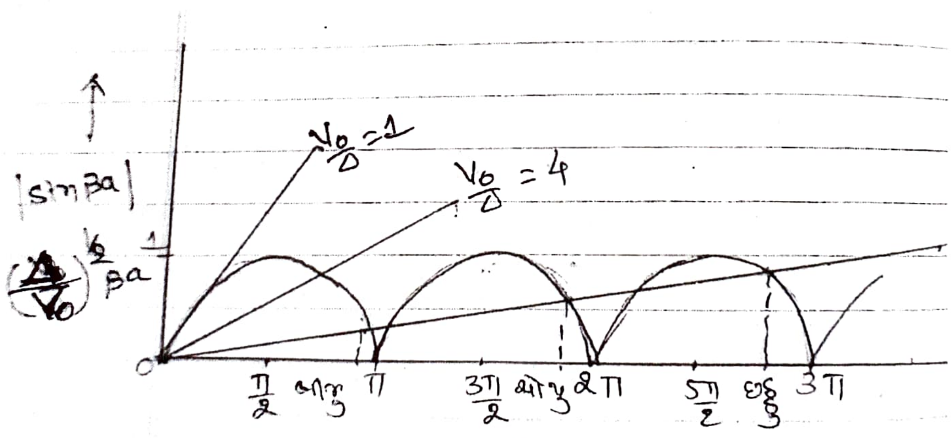
$$cosec^2\, \beta a = \frac{V_0}{\Delta\beta^2 a^2}$$

$$\sin^2 \beta a = \frac{\Delta}{V_0}\ \beta^2 a^2$$

$$|\sin\beta a| = \left(\frac{\Delta}{V_0}\right)^{\frac{1}{2}}\ \beta a \text{ -------------(5)}$$

સ.ક.(5) ને સંતોષતિ βa ની કીમતો મેળવવા માટે

$|\sin\beta a| \rightarrow \beta a$ અને $\left(\frac{\Delta}{V_0}\right)^{\frac{1}{2}}\ \beta a \rightarrow \beta a$ ના આલેખ દોરવામાં આવે છે. આ આલેખ નીચે આકૃતિમાં દર્શાવ્યો છે.



આકૃતિ. (2)

આ આલેખના બીજા, ચોથા ----- ચરણોમાં આંતરછેદ ના બિંદુ શોધી βa ની કિમત મેળવી ઉર્જા આયગન મૂલ્ય મેળવવામાં આવે છે. હવે

$\beta^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$

$E + V_0 = \beta^2 \frac{\hbar^2}{2m}$

$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\beta_n{}^2 - V_0$

$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_n{}^2 a^2 - V_0$

$= \Delta\, \beta_n{}^2 a^2 - V_0$

$= V_0 \left[\frac{\Delta}{V_0}(\beta_n a)^2 - 1\right]$ ----------(6)

સ્થીતિમાન કૂપ ગમે તેટલો છીછરો હોયતો પણ ઓછમાં ઓછી એક bound સ્થીતિતો મળેજ.

- **(c) આયગન વિધેયો, પેરીટી :**

$u^I(x) = C\, e^{\alpha x}$ $-\infty < x < -a$ ----------(1)

$u^{II}(x) = A\cos\beta x + B\sin\beta x$ $-a < x < a$ -----(2)

$u^{III}(x) = D\, e^{-\alpha x}$ $a < x < \infty$ --------(3)

સ.ક.(1,2,3) ના ઉકેલ (A)

$\alpha = \beta\tan\beta a$, C = D, B = 0, $D = A\,e^{\alpha a}\cos\beta a$

અનુસાર નક્કિ થતા આયગન મૂલ્યો માટે આ વિધેયો નીચેના સ્વરૂપ ધારણ કરશે. α અને β નાં સ્વીકૃત મુલ્યોને α_n અને β_n વડે દર્શાવતા

$u_n^I = A\, e^{\alpha_n a}\cos\beta_n a\; e^{\alpha_n x}$ ----------(4)

$u_n^{II} = A\cos\beta_n x$ ---------------(5)

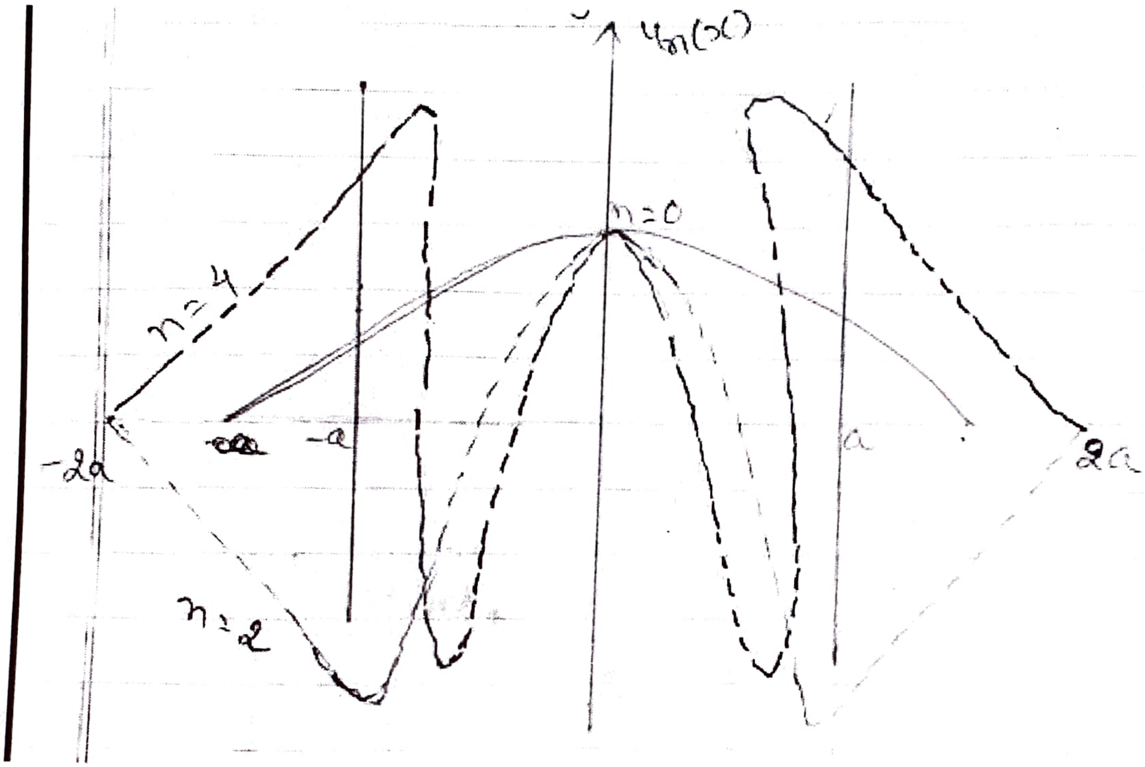
$u_n^{III} = = A\, e^{\alpha_n a}\cos\beta_n a\; e^{-\alpha_n x}$ --------(6)

જ્યાં n = 0,2,4,-----

n ના જુદા જુદા મૂલ્યો માટે આ વિધેયોના આલેખો નીચે આકૃતિ માં દર્શાવ્યા છે. આ આલેખો ઉદગમ(origin) $u_n(x)$ થી બન્ને બાજુ સમાન છે.

$u_n(x) = u_n(-x)$

જે તરંગ વિધેયો આવો ગુણધર્મ ધરાવે છે તેને 'even parity' (બેકી) વાળું તરંગ વિધેય કહે છે.



સ.ક.(1,2,3) ના ઉકેલ (B)

α = - β cot βa, C = - D, A = 0, D = B $e^{\alpha a}$ sin βa

અનુસાર નક્કિ થતા આયગન મૂલ્યો માટે આ વિધેયો નીચેના સ્વરૂપ ધારણ કરશે.

u_n^I = - B $e^{\alpha_n a}$ sin β_n a $e^{\alpha_n x}$ ------------(7)

u_n^{II} = B sin $\beta_n x$ -------------(8)

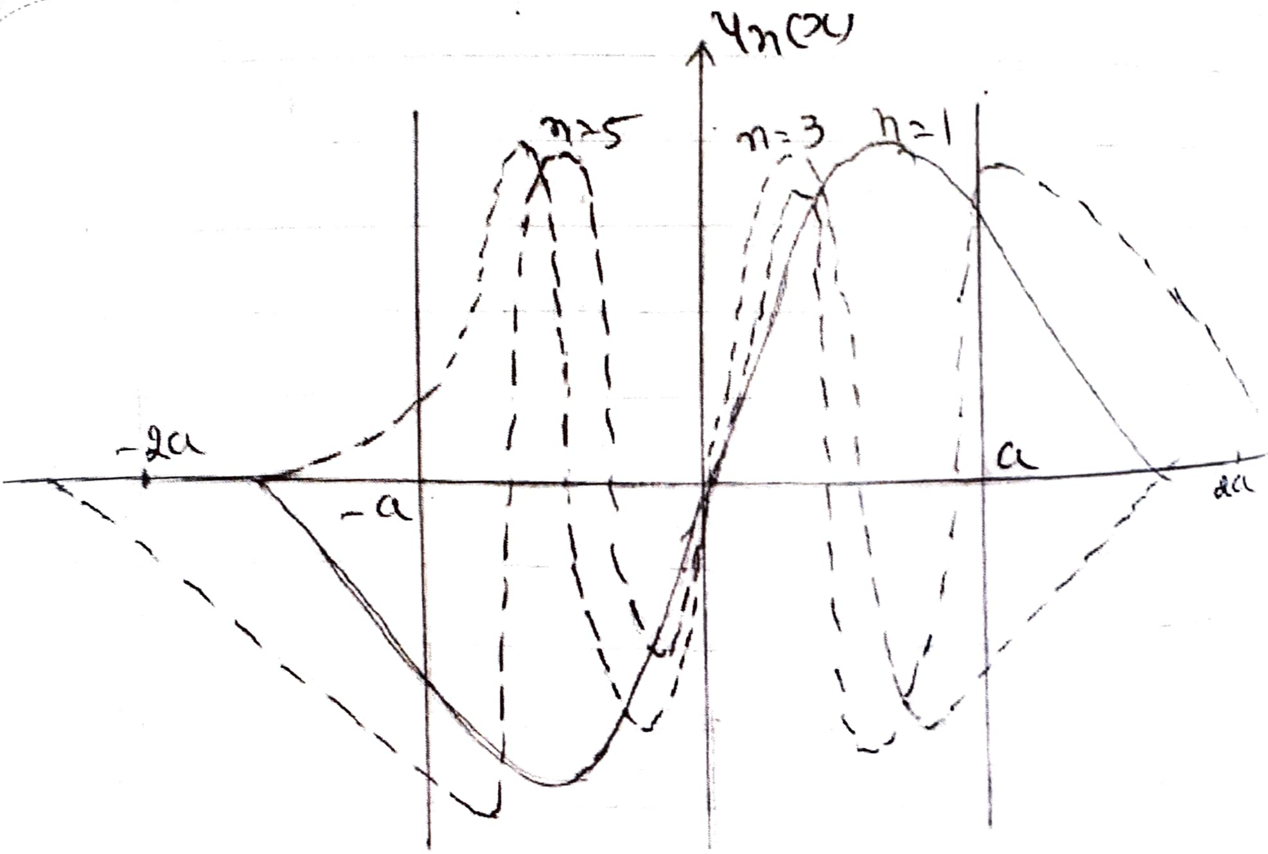
u_n^{III} = = B $e^{\alpha_n a}$ sin $\beta_n a$ $e^{-\alpha_n a}$ ---------(9)

જ્યાં n = 1,3, -------

આ વિધેયોના આલેખો નીચે આકૃતિમાં દર્શાવ્યા છે. આ આલેખો ઉદગમ(origin) થી સમાન નથી.

u_n(x) = - u_n(- x)

જે તરંગ વિધેયો આવો ગુણધર્મ ધરાવે છે તેને ‘ odd parity’ વાળું (એકી) વિધેય કહે છે.



પ્રચલિત યંત્રશાત્ર અનુસાર પ્રતિબંધિત વિસ્તારમાં કણનું ભેદન:

પ્રચલિત યંત્રશાત્ર અનુસાર $E < 0$ ઉર્જાવાળો કણ પ્રચલિત યંત્રશાત્ર અનુસાર $x < -a$ અને $x > a$ વિસ્તારમાં રહી શકે નહી.જો ક્વોન્ટમ યંત્રશાત્ર અનુસાર પણ આમજ હોયતો આ વિસ્તારમાં તરંગ વિધેયો શૂન્ય મળ્યા હોત. ઉપરની આકૃતિ પરથી કહી શકાયકે આ વિસ્તારમાં તરંગ વિધેયો શૂન્ય નથી. એટલેકે ક્વોન્ટમ યંત્રશાત્ર અનુસાર આ વિસ્તારમાં કણની હોવાની સંભાવના શુન્ય નથી પરંતુ આ વિસ્તારોમાં $|\psi|^2 \rightarrow 0$ હોવાથી x નાં ઘણા મોટા મુલ્યો માટે કણને શોધવાની સંભાવના$\rightarrow 0$ થાય છે. પરીણામે કણ અમર્યાદ અંતર સુધી છટકી શકતું નથી અને કૂપ સાથે બંધિત રહે છે.

- **ચોરસ સ્થીતિમાન કૂપ $E > 0$ કિસ્સો:**

જુદા જુદા વિસ્તારમાં શ્રોડીજર સ.ક. નીચે પ્રમાણે લખાશે $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} = E\,u$ ------------(1) $-\infty < x < -a$, $a < x < \infty$

$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} - V_0\ u = E\,u$ -------------(2) $-a < x < a$

અહી $E > 0$ એટલેકે ઉર્જા ધન છે.

ધારોકે $\frac{2mE}{\hbar^2} = K^2$ અને $\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \beta^2$

તેથી સ.ક.(1) અને (2) નીચે પ્રમાણે લખાશે.

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} Eu$$

$$= -K^2 u$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} + K^2 u = 0 \text{--------------} (3)$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} ((E + V_0)$$

$$= -\beta^2 u$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \beta^2 u = 0 \text{ -----------} (4)$$

વિસ્તાર (1):

સ.ક.(3) વિસ્તાર (1) માં છે એટલેકે $-\infty < x < -a$ સુધીનો વિસ્તાર. તેનો સામાન્ય ઉકેલ e^{iKx} અને e^{-ikx} નો રેખીય સરવાળો (linear combination) છે.

$u^I(x) = C_+ e^{iKx} + C_- e^{-ikx}$ ----------(5)

વિસ્તાર (3):

સ.ક.(3) વિસ્તાર (3) માં એટલેકે $a < x < \infty$ સુધીનો વિસ્તાર. તેનો સામાન્ય ઉકેલ

$u^{III}(x) = D_+ e^{iKx} + D_- e^{-ikx}$ --------(6)

વિસ્તાર (2):

સ.ક.(4) વિસ્તાર (2)માં એટલેકે $-a < x < a$ સુધીનો વિસ્તાર. તેનો સામાન્ય ઉકેલ

$u^{II}(x) = A_+ e^{i\beta x} + A_- e^{-i\beta x}$ -----------(7)

ભૌમીતિક અર્થઘટન:

સ.ક.(5) માં $C_+ e^{iKx}$ $x = -\infty$ થી $x = -a$ તરફ(જમણી બાજુ) ગતિ કરતાં કણની રજૂઆત કરે છે.તેજ રીતે $C_- e^{-ikx}$ $x = -a$ થી $x = -\infty$ તરફ(ડાબી બાજુ) ગતિ કરતાં કણની રજૂઆત કરે છે. તેજ પ્રમાણે $D_+ e^{iKx}$ અને $D_- e^{-ikx}$ તરંગો

$x = +a$ $x = +\infty$ વચ્ચે અનુક્રમે જમણી અને ડાબી તરફ ગતિ કરતાં કણોની રજૂઆત કરે છે. તેજ પ્રમાણે $A_+ e^{i\beta x}$ અને $A_- e^{-i\beta x}$ તરંગો $x = -a$ થી $x = +a$ વિસ્તારમાં અનુક્રમે જમણી અને ડાબી તરફ ગતિ કરતાં કણો દર્શાવે છે.

$E > 0$ કિસ્સામાં સીમા શરતોથી ચાર સમીકરણ મળે છે જયારે છ અજ્ઞાત ($A_\pm$, $C_\pm$ $D_\pm$) છે. સમીકરણ કરતાં ની સંખ્યા વધારે હોવાથી અનંત સંખ્યાના ઉકેલો મળી શકે છે.($E > 0$ એવું ઉર્જાનું

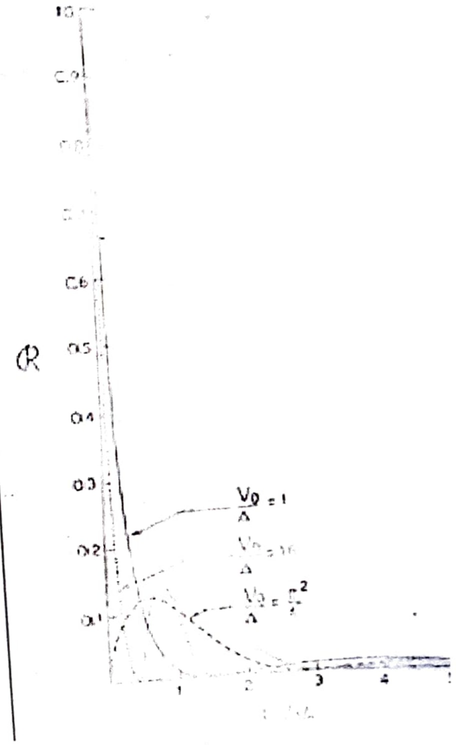
કોઇપણ મૂલ્ય શક્ય છે) આમ ઉર્જા આયગન મૂલ્યો 'સતત વર્ણપટ રચે છે. અહી હોવાથી કણ ત્રણેય વિસ્તારમાં રહે છે તેથી કણની પરાવર્તન થવાની સંભાવના રહેલી છે

$\left|\frac{C_-}{C_+}\right|^2$ એ ડાબીબાજુથી જમણીબાજુ (ધન x દિશામાં) ગતિ કરતાં કણની કૂપ વડે પરાવર્તન થવાની સંભાવના દર્શાવે છે.

પરાવર્તન ગુણાંક (Reflection coefficient) નું સૂત્ર નીચે પ્રમાણે છે.

$$R = \left[1 + \frac{4E(E+V_0)}{V_0^2 \sin^2\left\{2\sqrt{\frac{(E+V_0)}{\Delta}}\right\}}\right]^{-1} \text{---------------(8)} \qquad \text{જ્યાં } \Delta = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

આકૃતિમાં $\frac{V_0}{\Delta}$ ના આપેલા મૂલ્યો માટે ઉર્જા ગુણોત્તર $\frac{E}{V_0}$ ના વિધેય રૂપે R ને દર્શાવે છે.



આકૃતિ ઉપરથી

(1) સ.ક. (1) માં $\sin^2\left\{2\sqrt{\frac{(E+V_0)}{\Delta}}\right\}$ અવયવને લીધે $\frac{E}{V_0}$ ના મોટા મૂલ્યો માટે R માં દોલન જોવા મળે છે. જેમ $\frac{E}{V_0}$ વધે તેમ આ દોલનોનો કંપવિસ્તાર ઘટતો જાય છે.

(2) જ્યારે $\sin^2\left\{2\sqrt{\frac{(E+V_0)}{\Delta}}\right\} = 1$ થાય ત્યારે R નાં મહત્તમ મૂલ્યો મળે છે.

$$2\left(\frac{E+V_0}{\Delta}\right)^{\frac{1}{2}} = (2n+1)\frac{\pi}{2}$$

n = 0,2, ----

મહત્તમ R માટેની શરત છે.

(3) જ્યારે $sin^2\left\{2\sqrt{\frac{(E+V_0}{\Delta}}\right\}$ = 1 થાય ત્યારે

$$R = \left[1 + \frac{4E(E+V_0)}{V_0^{\,2}}\right]^{-1}$$

આમ R નો કંપવિસ્તાર $\Delta = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ પર એટલેકે કૂપની પહોળાઈ પર આધાર રાખતા નથી.

(4) R ના દોલનોની આવૃત્તિ $\Delta = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ એટલેકે કુપની પહોળાઈ પર આધાર રાખે છે.

(5) R = 0 નું મૂલ્ય દર્શાવે છે કે બિલકુલ પરાવર્તન થતું નથી પરંતુ સંપૂર્ણ પણે પારગમન થાય છે. સ.ક.(8) પરથી R = 0 થવા માટે

$$sin\left\{2\sqrt{\frac{(E+V_0}{\Delta}}\right\} = 0$$

$$2\sqrt{\frac{E+V_0}{\Delta}} = 2n\pi$$

$$\frac{E+V_0}{\Delta} = n^2\pi^2 \text{ --------(A)}$$

હવે $\beta^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$

$$\beta^2 a^2 = \frac{2m\, a^2(E+V_0)}{\hbar^2}$$

$$\beta^2 a^2 = \frac{E+V_0}{\Delta} ----(B)$$

$\beta^2 a^2 = n^2\pi^2$ $\quad$ $\beta a = n\pi$ (R =0 માટે ની શરત)

****