Chapter four

The Free Particle الجسيم الحر

* الجسيم الحر : هو الجسيم الذي لا يتعرض الى اي قوة خارجية ، أي انه الجسيم الذي يتحرك في مجال ذو طاقة كامنة ثابتة ، اي ان انطلاق الجسيم ثابت ،

* لنفرض جسيم حر كتلته m يتحرك في بعد واحد ، فالمؤثر الهاملتوني له يكتب بالشكل :-

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V \quad \cdots\cdots\cdots (1)$$

---

1) معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن للجسيم الحر :-

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 U(x)}{dx^2} + V\,U(x) = E\,U(x) \qquad * -\frac{2m}{\hbar^2}$$

وتصغير المعادلة :-

$$\frac{d^2 U(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\,U(x) = 0 \quad \cdots\cdots (2)$$

* اذا كان الجسيم حراً في كل حركته $\Leftarrow$ $V = 0$ $\Leftarrow$

$$\frac{d^2 U(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar}\,U(x) = 0 \quad , \text{ Let } \boxed{k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\therefore \frac{d^2 U(x)}{dx^2} + k^2 U(x) = 0 \quad \cdots\cdots\cdots (3)$$

* حل المعادلة (3) هو عبارة عن دالة الموجة المستوية وبالشكل :-

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{------} \quad (4)$$

Since, $E = T + V$ and $V = 0$

$$\Rightarrow E = T = \frac{P_x^2}{2m} \Rightarrow P_x^2 = 2mE$$

But $2mE = k^2\hbar^2 \Rightarrow P_x^2 = \hbar^2 k^2 \Rightarrow P_x = k\hbar$

So, $\boxed{k = \frac{P_x}{\hbar}}$

العلاقة (4) اعلاه ، تمثل حركة الجسيم الحر كلياً باتجاه $+x$, $-x$ وبزخم $P_x = \hbar k$.

* اذا كان الجسيم حراً "كلياً" $\Leftarrow$ لا يمكن ايجاد الاحتمالية الكلية له ، وكما يلي:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)\, u(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^* e^{-ikx}\, A e^{ikx}\, dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

ونفس النتيجة في حالة استخدام الجزء Be^{-ikx} من المعادلة رقم (4) .

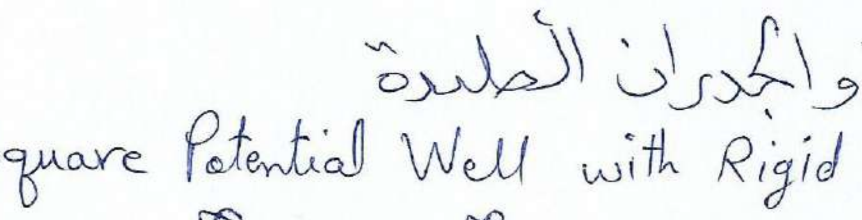
* مما سبق ، يتضح انه لا وجود لحالة الجسيم الحر كلياً؛ لذلك سندرس حالة اخرى وهي الجسيمات الطليقة . وهذه الحالة الجديدة هي الحركة جسيم ضمن بئر الجهد .

* بئر الجهد Potential Well : هو تمثيل رياضي لحركة جسيم في منطقة محددة يكون فيها الجهد ثابت ، (الجسيم حر الحركة) ، واذا اقترب الجسيم من حدود هذه المنطقة فسيتعرض الى قوة كبيرة بسبب وجود انحدار عالٍ في الجهد وهذه القوة تجبر الجسيم على العودة الى داخل المنطقة المسموحة للحركة . لذلك تمثل حافات بئر الجهد بجدران عالية وارتفاعها إما محدود أو ∞ .

(2) جسم محصور في بئر جهد احادي البعد .

(أ) بئر الجهد ذو الجدران الصلدة

Square Potential Well with Rigid Walls



$$V(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 \\ 0 & : 0 \le x \le L \\ \infty & : x > L \end{cases}$$

* عند وضع الجسيم الحر داخل بئر جهد لا نهائي فأن الجسيم يصبح مقيداً ، اي انه يكون حراً فقط داخل بئر الجهد (المنطقة ①) .

* لأيجاد الدالة الذاتية والطاقة الذاتية لجسيم في بئر جهد ، نستخدم المعادلة (2) وكما يلي :-

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

* في المنطقة $x < 0$ والمنطقة $x > L$ ، الجهد $V(x) = \infty$ ، وهذا يعني ان الجسيم لا يمكنه تجاوز جدران البئر ولن يتواجد

الدالة في هاتين المنطقتين ، اي ان $U_2(x)=0$ و $U_3(x)=0$ «الدوال الموجية خارج بئر الجهد = صفر» لعدم تواجد الجسيم في خارج البئر».

* في المنطقة $0 \leq x \leq L$ «المنطقة ①» هي داخل بئر الجهد وهنا $\underline{V=0}$

والمعادلة (2) ستصبح كما في المعادلة رقم (3) مع استبدال $U(x)$ بـ $U_1(x)$:

$$\frac{d^2 U_1(x)}{dx^2} + K^2 U_1(x) = 0 \quad \text{------} (5)$$

* حل المعادلة (5) هو نفسه تماماً المعادلة (4) ، أي أن :

$$U_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{......} (6)$$

* نطبق الشروط الحدودية لإيجاد قيم الثوابت A و B «شرط الاستمرارية» :

$$U_1(0) = U_2(0)$$

But outside potential well $U_2(0)=0$, So $U_1(0)=0$

$\Rightarrow$ eq. (6) will be $=0$:

$$A \underbrace{\sin(0)}_{=0} + B \underbrace{\cos(0)}_{=1} = 0 \quad \Rightarrow A \neq 0 \text{ and } B=0$$

Also, $U_1(L) = U_3(L) = 0$ لنفس السبب السابق (لعدم تواجد الجسيم خارج بئر الجهد).

we have $B=0$, So eq. (6) will be :

$$A \sin(KL) = 0 \Rightarrow KL = n\pi \Rightarrow \boxed{K = \frac{n\pi}{L}}$$

, $\boxed{n = 1, 2, 3, \ldots}$

from $K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2} \text{------} (7)$$

المعادلة (7) هي طاقة جسيم مقيد الحركة في بئر جهد ذو جدران لانهائية
وهي طاقة مكممة (منفصلة / متميزة / غير متصلة).

* بعد معرفة قيمة $B=0$ فأن معادلة (6) ستصبح :-

$$U_1(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \text{.......} (8)$$

المعادلة (8) تمثل الدالة الذاتية للجسيم الحر المقيد في بئر جهد عرضه L
وطاقته هي كما في المعادلة رقم (7).

* لأيجاد الثابت A سوف نطبق شرط المعايرة :-

$$\int_0^L U_1^*(x)\, U_1(x)\, dx = 1$$

$$\int_0^L A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \cdot A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = 1$$

$$A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = 1 \quad , \text{ But } \sin^2\theta = \frac{1-\cos 2\theta}{2}$$

$$\Rightarrow A^2 \int_0^L \left[\frac{1-\cos\left(2\frac{n\pi}{L} x\right)}{2}\right] dx = 1 \text{ --------} (*)$$

التكامل في (*) $\Rightarrow$

$$\frac{A^2}{2}\left[\int_0^L dx - \int_0^L \cos\left(2\frac{n\pi}{L}x\right)dx\right]$$

$$= \frac{A^2}{2}\left[L - \frac{L}{2\pi n}\int_0^L \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)\cdot\frac{2\pi n}{L}\cdot dx\right]$$

$$= \frac{A^2}{2}\left[L - \underbrace{\frac{L}{2\pi n}\sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)\Big|_0^L}_{=0}\right]$$

$$= \frac{A^2}{2} \quad \text{------} (*2)$$

نعوض (*2) في (*) $\Leftarrow$

$$\frac{A^2}{2} = 1 \Rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

$$\therefore \boxed{u_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)} \quad \text{------} (9)$$

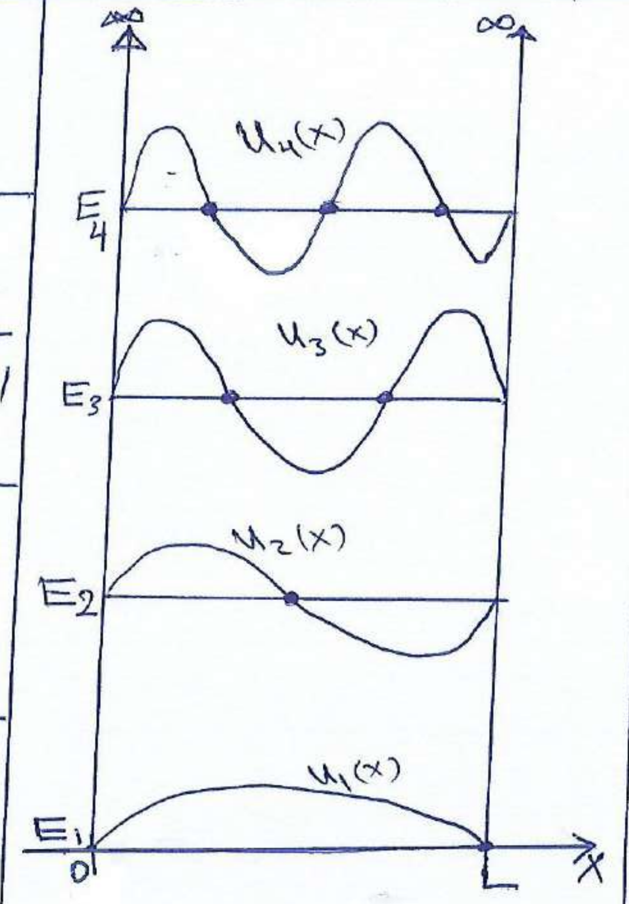
الصيغة النهائية لمعادلة الدالة الذاتية لجسيم حر داخل بئر الجهد .

* شرط العيارية والتعامد orthonormalization Condition :

$$\int_0^L u_m^*(x)\,u_n(x)\,dx = \delta_{mn} \begin{cases} =0 & : m \neq n \quad \text{تعامد} \\ =1 & : m = n \quad \text{عيارية} \end{cases}$$

* الدالة الموجية المعتمدة على الموقع والزمن $\Psi(x,t)$ هي عبارة عن حاصل ضرب المعادلة (9) مع الجزء المعتمد على الزمن ، اي ان :

$$\boxed{\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-iE_n t/\hbar}} \quad \text{------} (10)$$

n	$U_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$	$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$	fig. of $U_n(x)$, $0\leq x\leq L$	nodes $(n-1)$	Parity
1	$U_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$	$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$		0	زوجي
2	$U_2(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$	$E_2=4\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}=4E_1$		1	فردي
3	$U_3(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)$	$E_3=9E_1$		2	زوجي
4	$U_4(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{4\pi}{L}x\right)$	$E_4=16E_1$		3	فردي

* تماثل الدالة هو عكس رقم المستوى ، وعدد العقد في المنحنى = $n-1$.

* فرق الطاقة بين مستويين متتاليين مثلاً $n=1$ و $n=2$ ⇐

$$\Delta E_{21}=E_2-E_1$$
$$=4E_1-E_1=3E_1=\frac{3}{2}\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}$$

, $\Delta E_{32}=?$ and $\Delta E_{43}=?$

ص ١٠٧