كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الرابعة

المادة : علم النانو

المحاضرة : السابعة/نظري/

المحاضرة رقم 7: الميكانيك الموجي Wave Mechanics

1-3 مقدمة: Introduction

سندرس في هذا الفصل المفاهيم الفيزيائية الأساسية والمعادلات المرتبطة بسلوك الجسيمات في عالم النانو. وسنعرض المعادلة الموجية لشرودنغر من أجل الجسيمات ونحدد طرائق حساب الكميات الفيزيائية القابلة للقياس. وجدنا في الميكانيك الكمومي أنَّ حركة الجسيم المحصور في حجمٍ محدودٍ توصف دوماً بقيم متقطعة للطاقة وبتوابع موجبة شبيهة بتوابع الموجة المستقرة، أي أنَّ حركة هذا الجسيم مُكمَّاة. أمَّا حركة الجسيم في فراغٍ غير محدودٍ (أي الحركة الحرة) فليست مُكمَّاة وتوصف بأمواجٍ منتشرةٍ، وتوصف طاقته بمجالٍ مستمرٍ من القيم.

واعتماداً على الميكانيك الكمومي نحلل بعض الأمثلة التي تُسلِّط الضوء على الخصائص الكمومية المهمة للجسيمات. يمكن استخدام الكثير من الأمثلة المدروسة في هذا السياق كنماذج مبسطة للتراكيب النانوية لفهم أساسيات العمليات في الإلكترونيات النانوية.

2-3 معادلة شرودنغر The Schrodinger Wave Equation :

توصلنا في الفصل السابق إلى أنَّ الجمل الفيزيائية النانومترية هي جمل كمومية طالما يمكن مقارنة أبعادها بأطوال موجة دوبروي النموذجية للجسيمات التي تتألف منها هذه الجمل. يمكن استناداً للميكانيك الموجي تعيين التابع الموجي لجسيمٍ معزولٍ أو لمجموعةٍ كاملةٍ من الجسيمات. وكما سنرى لاحقاً، فإن معرفة التابع الموجي في الميكانيك الموجي كافية لوصف جسيمٍ أو حتى جملة جسيمات بشكل كاملٍ. وهذا يعني أنَّه يمكننا من حيث المبدأ حساب جميع الوسطاء الماكروسكوبية التي تُعيِّن خصائص الجملة المدروسة.

يُحقق التابع الموجي لجسيمٍ المعادلة الأساسية للميكانيك الموجي- **معادلة شرودنغر الموجية المرتبطة بالزمن،**

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\hat{\mathrm{H}}\,\Psi=0\,, \qquad (1\text{-}3)$$

حيث $\hbar$ ثابت بلانك المختزل والمؤثر $\hat{\mathrm{H}}$ هو هاملتونيان الجملة:

$$\hat{\mathrm{H}}=-\frac{\hbar^2\,\nabla^2}{2m}+V(\vec{r}). \qquad (2\text{-}3)$$

الهاملتونيان في الميكانيك الكمومي هو مؤثر، وذلك خلافاً للحالة في الميكانيك التقليدي حيث يكون تابعاً.

لندرس نتائج المعادلة الأساسية للميكانيك الكمومي أي المعادلة (1-3). يُبنى المؤثر الهاملتوني في الميكانيك الكمومي باستعمال الشكل التقليدي لهاملتونيان المعادلة، $\mathrm{H}\equiv-\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+V(\vec{r})$، حيث يُستبدل اندفاع الجسيم $\vec{p}$ بمؤثر الاندفاع $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}$.

وهكذا يكون الحد الأول في المعادلة (2-3) هو مؤثر الطاقة الحركية حيث ∇^2 مؤثر اللابلاسيان

$$\nabla^2=\frac{\partial}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2} \qquad (3\text{-}3)$$

وبمقارنة المعادلتين (1-3) و (2-3) من أجل الجسيمات مع المعادلة $\frac{\partial^2\vec{u}}{\partial t^2}-s^2\left(\frac{\partial^2\vec{u}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\vec{u}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\vec{u}}{\partial z^2}\right)=0$

من أجل الحقول الموجية ($\vec{u}$ متجه الإزاحة الثلاثية الأبعاد و s السرعة الطّورية للموجة المتقدمة)، يمكننا أن نلاحظ أنَّ لكلتا المعادلتين مشتقات من المرتبة الثانية بالنسبة للمتغر الفراغي، $\vec{r}$، ومن ثمَّ مشتقات من المرتبة الأولى والثانية بالنسبة للزمن t.

بصرف النظر عن الاختلاف الأخير، فمن المتوقع أن تكون حلول المعادلة (3-1) من الشكل الشبيه بالموجة.

إذا كان الكمون مستقلاً عن الزمن، يمكننا فصل المتحولات إلى زمانية ومكانية:

$$\Psi(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\,\psi(\vec{r}), \tag{4-3}$$

حيث $\psi(\vec{r})$ تابع عقدي للإحداثيات المكانية فقط.

يسمى التابع الموجي $\Psi(\vec{r},t)$ عادةً **التابع الموجي اللامستقر**، في حين يُعزى $\psi(\vec{r})$ إلى **التابع الموجي المستقر**. بالتعويض عن المعادلة (3-4) في المعادلة (3-1) نحصل على معادلة شرودنغر المستقلة عن الزمن:

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}). \tag{5-3}$$

تُمثِّل E في المعادلتين (3-4) و (3-5) الطاقة الكلية للجسيم المدروس.

تكمن إحدى الخصائص المهمة لحلول المعادلة (3-5) في تعامد *Orthonormality* الحلول $\psi_i(\vec{r})$ و $\psi_j(\vec{r})$ الموافقة للقيم المختلفة للطاقة E_i و E_j:

$$\int \psi_i^*(\vec{r})\,\psi_j(\vec{r})\,d\vec{r} \propto \delta_{ij}, \tag{6-3}$$

حيث

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & if\ i = j, \\ 0, & if\ i \neq j. \end{cases}$$

تكمن المهمة الأساسية للميكانيك الكمومي في حل معادلة شرودنغر الموجية (3-1).

نعلم من مقرر ميكانيك الكم أنَّ **التابع الموجي لجسيمٍ في الفراغ** $(V(\vec{r})=0)$ يأخذ **شكل موجة مستوية** $\Psi(\vec{r},t) = A\,\mathrm{e}^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\Omega t)}$ حيث Ω التواتر الزاوي للموجة.

بالتعويض عن هذا التابع الموجي في معادلة شرودنغر (3-1) نحصل على العلاقة بين المتجه الموجي للإلكترون وطاقته،

$$E = \hbar\Omega = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) = \frac{p^2}{2m}, \tag{7-3}$$

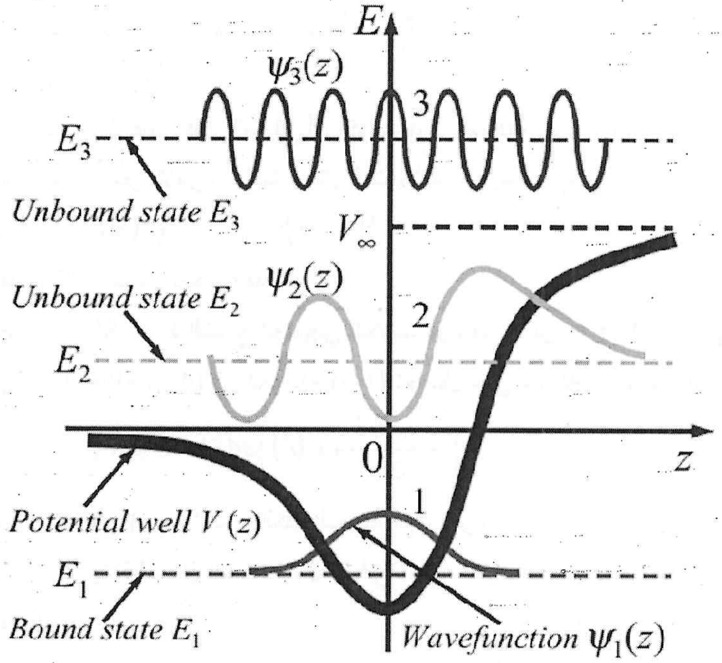
والتي تتطابق مع العلاقة التقليدية بين اندفاع الجسيم، p، وطاقته، E.

وبشكلٍ عام، **القيمة الدقيقة للطاقة E تصف الجملة** من أجل ما يسمى **بمسألة الحالة المستقرة** *Stationary-State Case* **فقط** عندما لا تتعلق الطاقة الكامنة بالزمن، ومن ثمَّ لا يتعلق الهاملتونيان بالزمن. أضف إلى ذلك، يتطلب تعيين الطاقة من أجل الحالة المستقرة زمناً لانهائياً من القياسات (مدة رصد لانهائية).

فإذا كان هذا الزمن، Δt، محدوداً، فإن عدم الدقة (الشك) في قياس الطاقة، ΔE، سيحقق اللامساواة الآتية:

$$\Delta E\,\Delta t \geq h. \tag{8-3}$$

وهذه هي **علاقة الشك** *Uncertainty Relation* بين الطاقة والزمن.



الشكل (3-1): ثلاثة أنواع لحلول معادلة شرودنغر من أجل حفرة كمون اختيارية أحادية البعد.

إنَّ المتراجحات التي تحقق عدم الدقة في قياس الاندفاع $\Delta\vec{p}$ والموضع $\Delta\vec{r}$: $\Delta p_x \ \Delta t \geq h$ و $\Delta p_y \ \Delta t \geq h$ و $\Delta p_z \ \Delta t \geq h$ والمتراجحة (3-7) تُشكِّلُ علاقات الشك الأساسية في الفيزياء الكمومية.

للمعادلة (3-5) شكلٌ يُعرفُ **بمعادلة القيم الذاتية**. فالطاقة، E، تُمثِّل قيمتها الذاتية والتابع الموجي، $\psi(\vec{r})$، تابعها الذاتي. **يمكن أن تأخذ القيمة الذاتية E قيماً متقطعةً أو مستمرةً تبعاً لشكل التابع الكموني، $V(\vec{r})$، والشروط الحديّة.**

لشرح النّوعين الممكنين لحلول معادلة شرودنغر والحالات الطاقية الموافقة وتوضيح المسائل ذات الصلة سندرس مسألة البعد الواحد من أجل جملة طاقتها الكامنة $V(\vec{r}) = V(z)$، كما يوضح الشكل (3-1) حيث يُمثِّل المحور الشاقولي الطاقة، E، وتُمثِّل z إحداثية فراغية واحدة فقط:

- الكمون الذي يمتلك نهاية حدية دنيا سالبة عند الموضع $z = 0$، يسعى نحو الصفر عندما $z \to -\infty$
- ويستقر نحو قيمة محدودة V_∞ عندما $z \to \infty$. **هذا الكمون هو الشكل الأكثر تعميماً لحفرة كمونٍ مدروسةٍ.**

وهنا ثمة دراسة كيفية موجزة تُسهم في التأكيد على أنَّ **الشروط الحدّيّة تُحدد نوع الحل** لمعادلة شرودنغر. سيتم الحصول على هذه الحلول ومناقشتها بتفصيلٍ أكبر في سياق الفصل. من ضمن الحلول الممكنة لمعادلة شرودنغر (3-5) من أجل كمونٍ اختياريٍ **حلول بطاقة سالبة** $E = E_j < 0$. والشكل (3-1) يوضح التابع الموجي الموافق للطاقة $E = E_1 < 0$ من خلال **المنحني 1**. أحد الأشياء الغريبة المميزة للحلول ذات الطاقة السالبة يكمن

في أنَّ **المنطقة الفراغية** التي يُسمح الحركة فيها تقليدياً حيث الطاقة الحركية موجبة $p^2/2m = E - V(z) > 0$، **محدودة تماماً**. في المناطق المحظورة تقليدياً يتلاشى التابع الموجي $\psi(\vec{r})$ عندما $|z| \to \infty$. حالات الجسيمات المشابهة لتلك الموصوفة للتو تسمى **بالحالات الطاقية المقيدة** *Bound States* وتوصف **بطيفٍ طاقي متقطعٍ** *DiscreteEnergy Spectrum*.

لندرس الآن النوع الآخر الممكن لحلول معادلة شرودنغر من أجل المجال الطاقي $0 \le E \le V_\infty$، المرمَّز بالمستقيم E_2 في الشكل (3-1). هذه الحلول موجودة من أجل أي قيمة لـ E؛ **فهي محدودة** عندما $z \to -\infty$ **وتتغلغل قليلاً في منطقة حاجز الكمون** $V(z) > E$ كما يوضح **المنحني 2** في الشكل (3-1).

يمكن تمثيل هذه الحلول، عندما $z \to -\infty$، **على شكل مجموعٍ لموجتين راحلتين في اتجاهين متعاكسين**:

- موجة واردة إلى حاجز الكمون وأخرى مرتدة عنه.
- **ويوجد من أجل كل طاقة** في المجال $0 \le E \le V_\infty$ **حلٌ واحدٌ فقط** يُحققُ المتطلبات الفيزيائية.

← فمن أجل أي طاقة $E > V_\infty$ **يوجد حلان مستقلان**؛ لاحظ المنحني 3 في الشكل (3-1) الموافق للطاقة E_3.

← **يمكن اختيار أحد الحلين** بحيث يكون على شكل موجة منتشرة من اليسار نحو اليمين؛ فعندما $z \to \infty$ **يملك هذا الحل مركبةً واحدةً فقط**، وتحديداً الموجه التي تتغلب على حاجز الكمون، وعندما $z \to -\infty$ **يوجد تراكبٌ** للموجتين الواردة والمنعكسة.

يجب التأكيد على أنَّ الموجة المنعكسة عن الحاجز لدى تجاوز طاقتها ارتفاع هذا الحاجز تظهر في الفيزياء الكمومية فقط.

← ويمكن اختيار التابع الموجي الآخر على شكل أمواج منتشرة من اليمين إلى اليسار، وهي مثال على الأطياف الطاقية المستمرة ذات الطاقات $E > V_\infty$ **عندما تنتهي هذه الأمواج بعيداً عن منحني الكمون**.

إنَّ هذه الدراسات تؤكد على أهمية الشروط الحديّة من أجل المعادلة (3-5):

فإذا كان المطلوب تلاشي التوابع الموجية بعيداً عن حاجز الكمون (أي $\psi \to 0$ عندما $z \to \pm\infty$)، فيمكن إيجاد الطاقات المتقطعة والحالات المقيدة وهي مسألة غاية في الأهمية؛ إذا وافقت الشروط الحدّيّة الموجة الواردة نحصل على أطياف طاقية مستمرة. نختم مناقشة الشروط الحدّيّة بأن نتذكر أنّنا نستخدم الطاقات الكامنة متقطعةً عادةً. وفي هذه الحالة، يجب أن تتحقق عند نقطة انقطاع الكمون **استمرارية كلٍ من التابع الموجي ومشتقه بالنسبة للإحداثيات**.

بما أنَّ معادلة شرودنغر **خطيّة** فمن الواضح أنّه إذا كان التابع Ψ حلاً لهذ المعادلة، فإن أي تابع من الشكل $\text{constant} \times \Psi$ يكون حلاً أيضاً للمعادلة ذاتها. وللتخلص من هذا الالتباس أو الغموض يجب أن نأخذ بالحسبان السلوك الاحتمالي للتابع الموجي. فعلاً، إذا أُحيطت جملة فيزيائية بحيّزٍ محدودٍ، فإن الاحتمالية الفعلية لإيجاد جسيمٍ في هذا الحيّز يجب أن يساوي الواحد، أي أنَّ:

$$\int \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r} = 1. \qquad (3\text{-}9)$$

تسمى المعادلة (3-9) **بشرط التنظيم**؛ فهي تضمن الشرط اللازم لتعيين عامل الضرب الثابت للتابع الموجي من أجل حالة جملة محدودة البعد (الحجم).

إذا دُرس حجمٌ لامحدودٌ ولم يكن التكامل في المعادلة (3-9) محققاً، فإنّ شروط تنظيمٍ أخرى تكون بديلاً عن المعادلة (3-9). لندرس على سبيل المثال ما يسمى بمسألة التبعثر التي تأتي فيها الإلكترونات من اللانهاية وتتبعثر على كمونٍ موضعي. توافق هذه الحالة الطاقتين E_2 و E_3 من أجل الحركة الجسيمية في مقطع الكمون في الشكل (3-1). ومن أجل هذه المسألة يمكن أن نفرض أنَّ الموجة الواردة موجة مستوية بمطالٍ A معلوم: $\Psi(z,t) = A\, e^{ikz}\, e^{-iEt/\hbar}$. وعندها ستتناسب كمّية الأمواج المتبعثرة مع المطال A بسبب خطّيّة معادلة شرودنغر. يُنظر في الكثير من الأحيان إلى الشرط الأخير على أنّه شرطٌ أوليّ عوضاً عن كونه شرط حدّي، لأننا نتعامل مع الحالة قبل التبعثر والحالات بعد التبعثر.

في الميكانيك الكمومي من المفيد جداً إدخال كثافة تدفق الجسيمات، $\vec{i}$. فكثافة التدفق في الفيزياء التقليدية كمّية متجهة تُحدد اتجاه التدفق الجسيمي وطويلتها تساوي عدد الجسيمات التي تقطع وحدة المساحة بشكلٍ عمودي على المساحة في وحدة الزمن. أمّا في الفيزياء الكمومية فهذه الكمية تُعطى بالعلاقة الآتية:

$$\vec{i} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^{*}\nabla\psi - \psi\nabla\psi^{*}\right). \qquad (10\text{-}3)$$

فعلى سبيل المثال، يمكن إيجاد كثافة تدفق الجسيمات الموصوفة بالموجة المستوية بالمعادلة (2-43)، $\Psi(\vec{r},t) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\Omega t)}$، مباشرةً بحيث تساوي:

$$\vec{i} = \frac{\hbar\vec{k}}{m}|A|^2 = \frac{\vec{p}}{m}|A|^2 = \vec{\upsilon}\,|A|^2 .$$

القيم الوسطية للكميات الفيزيائية Average Values of Particl Quantities

في ضوء السلوك الاحتمالي لوصف جمل الميكانيك الكمومي، يجب أن نوضّح كيفية إيجاد القيم الوسطية للكميات التي تصف هذه الجمل؛ أبسط حالة في هذا السياق هي حساب الإحداثية الوسطية لجسيم. فعلاً، إنَّ **مربع القيمة المطلقة للتابع الموجي المنظَّم يُعطي الاحتمالية الفعلية في وحدة الحجم لإيجاد جسيمٍ في نقطة معيَّنة من الفراغ** (راجع الفقرة 2-4). وهكذا فإن القيمة الوسطية لإحداثية معيَّنة، z مثلاً، تُعطى بالعلاقة

$$\langle z\rangle = \int \psi^{*} z\psi\, d\vec{r} = \int z\,|\psi|^2\, d\vec{r}. \qquad (11\text{-}3)$$

وهكذا، يُعطي التكامل على كامل الفراغ القيمة الوسطية، أي القيمة **المتوقعة** *Expectation*، للإحداثية z.

يجب التأكيد مرةً أخرى أنَّ القيمة المتوقعة هي وسطي عدد القياسات للإحداثية z **التي تجري على مجموعة من الجسيمات المتطابقة.**

يمكن تعميم المعادلة (3-11) على شكلٍ أكثر تعميماً من أجل حساب القيمة المتوقعة لأي حدث قابل للقياس a.

$$\langle a\rangle = \langle \hat{A}\rangle = \int \psi^{*}\hat{A}\psi\, d\vec{r}\ , \qquad (12\text{-}3)$$

حيث يرتبط المؤثر $\hat{A}$ بالحدث القابل للقياس a.

يمكن أن نرى من تعريف القيمة المتوقعة $\hat{A}$، المعادلة (12-3)، أنَّه إذا كان ψ_a تابعاً خاصاً للمؤثر $\hat{A}$ ويوافق قيمةً خاصةً محددةً a،

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a , \qquad (13\text{-}3)$$

فإن القيمة المتوقعة لحدث فيزيائي قابل للقياس a تتطابق مع القيمة الذاتية: $\langle a\rangle = a$. فعلى سبيل المثال: إذا كان التابع الموجي حلاً لمعادلة شرودنغر (5-3)، فيمكن حساب الطاقة الوسطية،

$$\langle E\rangle = \langle \hat{H}\rangle = \int \psi_E^*(\vec{r})\,\hat{H}\,\psi_E\, d\vec{r} = E . \qquad (14\text{-}3)$$

ولكن إذا كان الجسيم في حالةٍ بطاقة عير معرَّفة جيداً، كأن تكون حالة توصف بتراكب الحلول ψ_{E_i}،

$$\psi = \sum_i C_i\,\psi_{E_i} , \qquad (15\text{-}3)$$

فيمكن الحصول على الطاقة الوسطية بالشكل

$$\langle E\rangle = \sum_i |C_i|^2\, E_i \quad \text{حيث} \quad \sum_i |C_i|^2 = 1 \qquad (16\text{-}3)$$

نأخذ هنا بالحسبان شروط التعامد والتنظيم أي المعادلتين (6-3) و (9-3).

من الضروري تفسير الاختلافات بين الحالتين الممثلتين (14-3) و (16-3)؛ فالحالة الأولى مرتبطة بجملةٍ توصف بتابعٍ موجيٍ يُعدُّ تابعاً خاصاً للمؤثر $\hat{A}$؛ وفي هذه الحالة الخاصة $\hat{A} = \hat{H}$. أمَّا الحالة الثانية فتوافق مسألةً توصف بتراكب التوابع الموجية لنفس المؤثر. قياسات قيمة الطاقة من أجل الحالة الأولى ستعطي النتيجة ذاتها، E مهما تكررت. وفي الحالة الثانية، ستعطي القياسات نتائج احتمالية مختلفة: ستكون الطاقات مُقاسةً باحتمالياتها $|C_i|^2$، ووسطي هذه الطاقات، $\langle E\rangle$، فقط سيبقى ذاته.

تُظهر الحسابات المباشرة لمشتقات وسطي متجهة الإحداثيات $\langle \vec{r}\rangle$ بالنسبة للزمن باستخدام معادلة شرودنغر أنَّ:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle \vec{r}\rangle = -\left\langle \frac{dV(\vec{r})}{d\vec{r}} \right\rangle ,$$

أي تُستعاد معادلة نيوتن التقليدية (8-2) بدلالة قيم متوقعة يتم الحصول عليها باستخدام الميكانيك الموجي.

وهكذا، **تصف معادلة شرودنغر تطور التابع الموجي لجملة كمومية من الجسيمات**. حلها من أجل شروط حدّيّة أو أولية دقيقة أو الأثنين معاً يُقدم كل المعلومات الضرورية لحساب الوسطاء الماكروسكوبية للجملة الفيزيائية وعمل الجهاز المراد تحليله.

3-3 أمثلة مختارة في الميكانيك الموجي للجسيمات:

Wave Wechanics of Particles: Selected Examples

تمت مناقشة المبادئ الأساسية للميكانيك الكمومي في الفقرة 3-2. ولفهم الأشياء الغريبة والمميزة للجسيمات التي تبرز بفضل المثنوية الموجية– الجسيمية، فإن هذه المبادئ تُطبق هنا من خلال بعض الأمثلة التوضيحية. وأبسط هذه الأمثلة مرتبط بما يسمى بالحالة أحادية البعد التي تُدرس فيها الحلول أحادية البعد فقط.

بالطبع نحن نعيش في "عالمٍ ثلاثي الأبعاد"، وبالتالي الجسيمات الحقيقية مرتبطة بمتجه الإحداثيات الثلاثية الأبعاد $\vec{r}$. ولكن **الطاقة الكامنة تكون عادةً مرتبطة بإحداثية وحيدة أو بإحداثيتين**. ومن أجل حالات كهذه توجد تبسيطات مهمة يتمتع بها توصيف الميكانيك الكمومي. فعلاً، **ليكن V تابعاً للإحداثية z فقط**؛ في هذه الحالة يمكننا إدخال المتجه الموجي ثنائي البعد $\vec{k}_{||} = \{k_x, k_y\}$ وكتابة التابع الموجي بالشكل

$$\Psi(t,\vec{r}) = \mathrm{e}^{i(k_x x + k_y y - \Omega t)}\,\psi(z), \tag{17-3}$$

وهذا يعني أنَّ التابع الموجي موجةً مستويةً منتشرةً في المستوي-$\{x, y\}$ **بمطالٍ متغيرٍ في الاتجاه** z. وبالتعويض عن المعادلة (3-17) في المعادلة (3-1) نحصل على المعادلة الأحادية البعد

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V(\vec{r}) - \varepsilon\right)\psi(z) = 0\,, \tag{18-3}$$

حيث

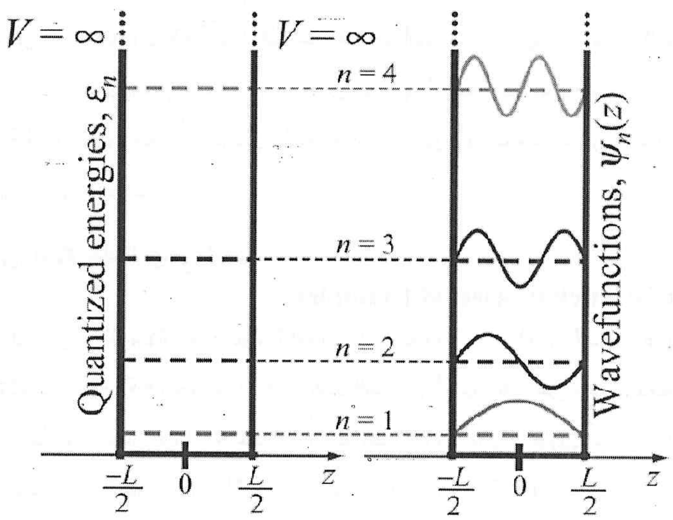
$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m}\,. \tag{19-3}$$

يمكن هنا تفسير E و $\hbar^2 k_{||}^2/2m$ على أنَّهما الطاقة الكليّة والطاقة الحركية "للحركة الحرة" على طول الإحداثيتين x و y، على الترتيب و ε الطاقة المرتبطة بالحركة في الكمون $V(z)$. توضح المعادلتان (3-17) و (3-18) من أجل الحالة قيد الدراسة أنَّ الحركة على طول الإحداثية z مستقلة عن الحركة في الاتجاهين الآخرين ويمكن تحليلها بدلالة حركة أحادية البعد $\varepsilon_n = n^2\varepsilon_1$.

دراسة جسيمة واقعة بين حاجزي كمون جاسئين A Particle between Two Impenetrable Walls:

لندرس في البداية الحالة أحادية البعد **عندما تقع جسيمة ما بين حاجزي كمون جاسئين** (غير قابلين للاختراق) عند المستويين $z = \pm\frac{1}{2}L$، كما يوضح الشكل (3-2). وتبعاً للشكل، يرمز L إلى عرض حفرة كمونٍ وحيدة البعد بحواجز كمونٍ لانهائية الارتفاع، وتحديداً $V(z) = 0$ داخل الحفرة و $V(z) = \infty$ خارجها:

$$V(z) = \begin{cases} 0\,, & for\ |z| < \frac{1}{2}L\,, \\ +\infty, & for\ |z| > \frac{1}{2}L\,. \end{cases} \tag{20-3}$$



الشكل (3-2): حلول معادلة شرودنغر من أجل حفرة كمون بحدودٍ لا متناهيةٍ. تُعيَّن الكاقات الذاتية، ε_n بالشكل $\varepsilon_n = n^2\varepsilon_1$، حيث $\varepsilon_1 = \hbar^2\pi^2/2mL^2$.

جزء التابع الموجي المرتبط فراغياً يُحقق معادلة شرودنغر المستقلة عن الزمن (3-18):

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}+\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\psi(z)=0 \qquad \text{أو} \qquad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}-\varepsilon\right)\psi(z)=0\,. \tag{21-3}$$

يأخذ حل المعادلة (3-21) في الحالة العامة الشكل:

$$\psi(z)=A\mathrm{e}^{iKz}+B\,\mathrm{e}^{-iKz}\,, \tag{22-3}$$

حيث

$$K=\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}\,. \tag{23-3}$$

تبدو الحواجز غير القابلة للاختراق كحدودٍ تحظر وجود الجسيم خارج الحفرة، وعلى وجه الخصوص، تساوي احتمالية إيجاد الجسيم في المنطقة $z\geq\frac{1}{2}L$ أو المنطقة $z\leq-\frac{1}{2}L$ الصفر، من أجل حالة الحواجز غير القابلة للاختراق، أي

$$\psi\left(-\tfrac{1}{2}L\right)=\psi\left(\tfrac{1}{2}L\right)=0\,. \tag{24-3}$$

وهذه هي الشروط الحدّيَّة من أجل التابع الموجي لجسيمٍ في حفرة كمونٍ ذات حواجز جاسئة. وبتطبيق هذه الشروط الحدّيَّة على التابع الموجي (3-22) نحصل على الحلول

$$\begin{aligned} &A\mathrm{e}^{-iKL/2}+B\mathrm{e}^{iKL/2}=0 \qquad for\ z=-\tfrac{1}{2}L\,,\\ &A\mathrm{e}^{iKL/2}+B\mathrm{e}^{-iKL/2}=0 \qquad for\ z=\tfrac{1}{2}L\,. \end{aligned} \tag{24-3}$$

ثمة حلّ غير مبتذل لهذه الجملة الجبرية من المعادلات عندما وفقط عندما يساوي المعيَّن الآتي الصفر:

$$\begin{vmatrix} \mathrm{e}^{-iKL/2} & \mathrm{e}^{iKL/2}\\ \mathrm{e}^{iKL/2} & \mathrm{e}^{-iKL/2} \end{vmatrix}=0\,, \tag{25-3}$$

والذي يؤدي إلى

$$\sin(KL)=0 \quad \text{or} \quad KL=\pi n\,, \tag{26-3}$$

تُعيِّن المعادلة الأخيرة "القيم الذاتية"، K_n:

$$\boxed{K_n=\frac{\pi}{L}n\,, \qquad n=\pm1,\pm2,\pm3,\ldots;} \tag{27-3}$$

حيث القيمة $n=0$ مرفوضة، لأن المعادلتان (3-25) و (3-22) تعطيان $\psi(z)\equiv0$ من أجل $K_0=0$.

ومن أجل المعادلتين (3-23) و (3-27) نحصل على الطاقات الممكنة لهذا الجسيم:

$$\varepsilon_n=\frac{\hbar^2K_n^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2\,. \tag{28-3}$$

بتعويض المعادلة (3-27) في المعادلة (3-22) يمكن التحقق بسهولة من أنَّه من أجل قيمة معطاة لـ n تأخذ العلاقة بين المعاملين A و B الشكل $B=-\mathrm{e}^{i\pi n}A=(-1)^{n+1}A$. وهكذا، إذا كانت n عدداً صحيحاً فردياً نحصل من المعادلة (3-22) على توابع موجية متناظرة من الشكل الآتي:

$$\boxed{\psi_n(z)=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{\pi nz}{L}\right), \quad n=\pm1,\pm3,\ldots} \tag{29-3}$$

وإذا كانت n عدداً صحيحاً زوجياً نحصل من المعادلة (3-22) على **توابع موجية لامتناظرة** من الشكل الآتي:

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n z}{L}\right), \quad n = \pm 2, \pm 4, \ldots \tag{30-3}$$

يظهر العامل $\sqrt{2/L}$ في هذه التوابع بنتيجة شرط تنظيم التوابع الموجية:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(z)|^2 dz = 1. \tag{31-3}$$

يسمى العدد الصحيح n **بالعدد الكمومي** *Quantum Number*. فعلياً، نرى أنَّ **الطاقات** ε_n **غير مرتبطة بإشارة** العدد الكمومي n. والكلام ذاته صحيح من أجل الكمية $|\psi_n(z)|^2$ المهمة فيزيائياً. **ولهذا السبب، يمكننا استعمال الأعداد الكمومية الموجبة** $n > 0$ **فقط**. لنكتب الآن وبشكلٍ صريحٍ الحالات الأربع الأخفض طاقياً:

$$\begin{aligned}
n &= 1, & \varepsilon_1 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}, & \psi_1(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right); \\
n &= 2, & \varepsilon_2 &= 4\varepsilon_1, & \psi_2(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right); \\
n &= 3, & \varepsilon_3 &= 9\varepsilon_1, & \psi_3(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{3\pi z}{L}\right); \\
n &= 4, & \varepsilon_4 &= 16\varepsilon_1, & \psi_4(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{4\pi z}{L}\right).
\end{aligned} \tag{32-3}$$

تسمح لنا هذه الحلول بالحصول على بعض الاستنتاجات المهمة.

أولاً– **الطيف الطاقي لجسيمٍ محصورٍ في حفرة كمونٍ متقطعٌ**. هذا يعني أنَّه بدلاً من التغير المستمر لطاقة الجسيم الذي يتميز به في الفيزياء التقليدية بمقدور الجسيم الكمومي الواقع في حفرة كمونٍ أن يمتلك قيم طاقة متقطعة فقط. بتعبيرٍ آخر، يُصبح الطيف الطاقي **مُكمَّى** *Quantized*، كما يُوضح الشكل (3-2). يُعزى عادةً هذا النوع من الأطياف الطاقية إلى **مجموعةٍ من المستويات الطاقية المتقطعة** *Set of Discrete Energy Levels*.

من المهم الإشارة من أجل الحالة المدروسة هنا إلى أنَّ الفواصل الطاقية، $\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n$، **تزداد بارتفاع عدد المستويات** n.

ثانياً– **المستوي الطاقي الأخفض** (الذي يسمى عادةً **الحالة الأرضية** *Ground State*) **ليس صفراً**؛ فهو محدودٌ. هذا يعني أنَّ الجسيم لا يستطيع أن يمتلك الطاقة الصفرية!. **فعلياً، هذا ناتجٌ من مبدأ الشك مباشرةً.**

في الواقع، الجسيم الواقع في حفرة كمونٍ يكون متوضعاً في منطقة فراغية بُعدها L، أي أنَّ الشك في Δz أقل من أو يساوي L. وتبعاً للمعادلة (3-47)، يؤدي مثل هذا التوضع إلى شكٍ في الاندفاع مقداره $\Delta p \geq \Delta p_z \sim h/L$. وعندها، يمكن تقدير اندفاع الجسيم بـ $p \geq \Delta p$، وهذا يعني أنَّ **الاندفاع ليس صفراً** وتوجد **طاقة كليّة غير صفرية.**

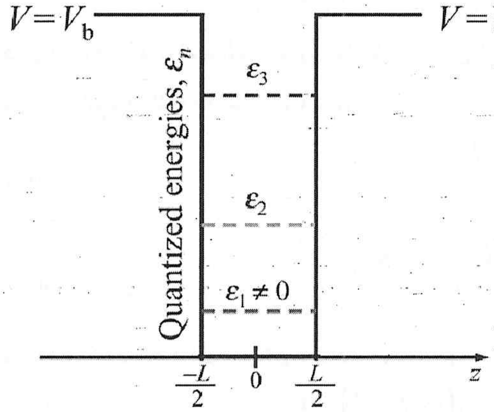
ثالثاً– في الحقيقة، **التوابع الموجية** هي **أمواج مستقرة** *Standing Waves* ويمكن أن توجد وبدقة أعداد صحيحة من أنصاف الأمواج بين حواجز الكمون غير القابلة للاختراق. إنَّ هذه النتيجة تشبه رياضياً حالة تكميّة الأمواج المرنة المستقرة بين الحواجز الجاسئة، كما يوضح الشكل (2-4).

دراسة جسيمة واقعة في حفرة كموميةٍ بحواجز كمون منتهية:

A Particle in a Quntum Well with Finite Potential Barriers

سندرس الآن حالة جسيمٍ محبوسٍ في حفرة كمونٍ بحواجز كمونٍ ارتفاعاتها منتهية. سنعتمد هنا الشكل المثالي الآتي للكمون، كما يوضح الشكل (3-3):

$$V(z)=\begin{cases}0, & for\ |z|\le \tfrac{1}{2}L,\\ V_b, & for\ |z|\ge \tfrac{1}{2}L,\end{cases} \tag{33-3}$$



الشكل (3-3): الطاقات الذاتية لجسيم في حفرة كمونٍ بحواجز كمونٍ محدودةٍ.

حيث V_b ارتفاع الحفرة و L عرضها. وفي هذه الحالة، يكون الطيف الطاقي مكمًّى بحيث تسمى **حفرة الكمون بحفرةٍ كموميةٍ بحواجز كمونٍ منتهيةٍ** *Quntum Well with Finite Potential Barriers*.

اعتماداً على بديهيات الفيزياء التقليدية يمكننا أن نتوقع أنَّ يكون الجسيم محبوساً في حفرةٍ إذا كانت طاقته أقل من ارتفاعها، $\varepsilon<V_b$. في البداية علينا أن نحل المعادلة (3-18). داخل الحفرة، $V_z=0$، والحل عبارة عن تركيب بسيط لتابعين جيبي وتجيبي كما في الحالة السابقة؛ المعادلتان (3-29) و (3-30). إذن، من الملائم إعادة كتابة الحل على شكل تركيب لهما:

$$\psi_n(z)=C\cos(k_w z)+D\sin(k_w z),\quad for\ |z|\le \tfrac{1}{2}L, \tag{34-3}$$

حيث

$$k_w=\sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}, \tag{35-3}$$

و C و D ثابتان اختياريان.

ويأخذ الحل خارج الحفرة الشكل

$$\psi(z)=\begin{cases}A\,e^{-k_b(z-L/2)}, & for\ z\ge +\tfrac{1}{2}L,\\ B\,e^{k_b(z+L/2)}, & for\ z\le -\tfrac{1}{2}L,\end{cases} \tag{36-3}$$

حيث $\kappa_b=\sqrt{-2m(\varepsilon-V_b)/\hbar^2}$.

وبحكم تناظر المسالة المدروسة، نختار إمَّا التراكيب **الزوجية** وإمَّا التراكيب **الفردية** في المعادلتين (3-34) و (3-36). وبالنتيجة، **تستوجب استمرارية التوابع الموجية أنَّ يكون** $A=B$ من أجل الحلول الزوجية و $A=-B$ من أجل الحلول الفردية. إذن، لدينا الآن ثابتان من أجل الحلول الزوجية وثابتان من أجل الحلول الفردية. فمن أجل الحلول الزوجية نجد

$$\psi(z)=\begin{cases} C\cos(k_{\mathrm{w}}z), & for\ |z|\le \frac{1}{2}L,\\ A\,\mathrm{e}^{\mp\kappa_{\mathrm{b}}(z\mp L/2)}, & for\ |z|\ge \frac{1}{2}L,\end{cases} \tag{37-3}$$

حيث توافق الإشارتان "+" و "−" القيم الموجبة والسالبة لـ z على الترتيب.

تكمن الخطوة التالية في إيجاد الحل في مواءمة التوابع الموجية ومشتقاتها بالنسبة لـ z عند النقاط $z=\pm L/2$. فمثلاً من أجل **الحلول الزوجية** نحصل من المعادلة (3-37) على جملة المعادلات الجبرية

$$\begin{aligned} &C\cos(k_{\mathrm{w}}L/2)-A=0,\\ &Ck_{\mathrm{w}}\sin(k_{\mathrm{w}}L/2)-A\kappa_{\mathrm{b}}=0.\end{aligned} \tag{38-3}$$

يكون لجملة هاتين المعادلتين حلولاً إذا كان المعيَّن الموافق لهما مساوياً الصفر. وهكذا نحصل، من أجل الحلول الزوجية والحلول الفردية على المعادلتين:

$$\tan\left(\frac{k_{\mathrm{w}}L}{2}\right)=\frac{\kappa_{\mathrm{b}}}{k_{\mathrm{w}}}, \tag{39-3}$$

$$\cot\left(\frac{k_{\mathrm{w}}L}{2}\right)=-\frac{\kappa_{\mathrm{b}}}{k_{\mathrm{w}}}. \tag{40-3}$$

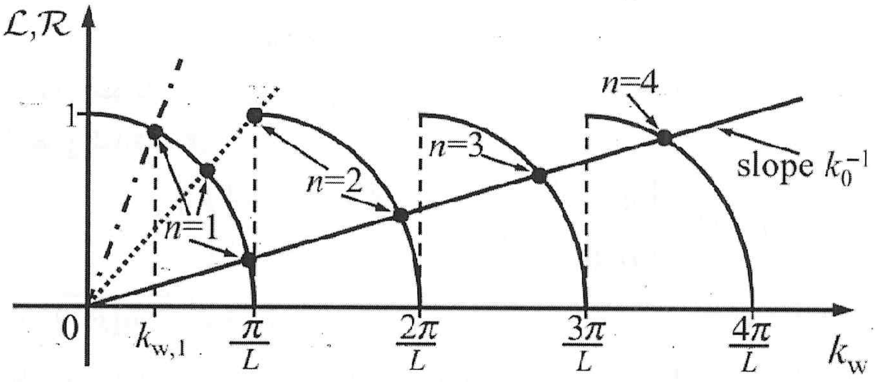
يمكن حل هذه المعادلات المثلثية عددياً، ولكن من الأفضل تحليلها بيانياً. ولذلك سنحولها إلى الشكل الآتي:

$$\cos(k_{\mathrm{w}}L/2)=\pm k_{\mathrm{w}}/k_0 \qquad for\ \tan(k_{\mathrm{w}}L/2)>0, \tag{41-3}$$

$$\sin(k_{\mathrm{w}}L/2)=\pm k_{\mathrm{w}}/k_0 \qquad for\ \cot(k_{\mathrm{w}}L/2)<0, \tag{42-3}$$

حيث $k_0=\sqrt{2mV_{\mathrm{b}}/\hbar^2}$.

يجب اختيار الإشارتين "+" و "−" في المعادلة (3-41) عندما تكون قيم $\cos(k_{\mathrm{w}}L/2)$ **موجبةً** وعندما تكون **سالبة** على الترتيب. والإجراء ذاته صحيحٌ من أجل الإشارتين "+" و "−" بالنسبة للمقدار $\sin(k_{\mathrm{w}}L/2)$ في



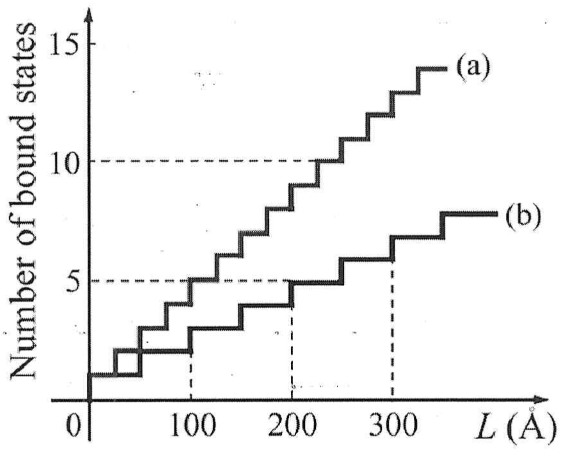
الشكل (3-4): حل بياني من أجل المعادلتين (3-41) و (3-42). توافق الحلول نقاط تقاطع المنحنيات حيث يوافق الخط المتقطع− المنقط قيمة صغيرة لـ κ_0 مما يؤدي إلى حلٍ واحدٍ فقط للمعادلة (3-41). ويوافق الخط المنقط قيمة حرجة لـ κ_0 التي يتلاشى عندها مستوى الطاقة الثاني في الحفرة بنتيجة حل المعادلة (3-41). ويوافق الخط المستقين المتواصل قيمة وسطية لـ κ_0 مما يؤدي إلى أربعة حلول.

المعادلة (3-42) من أجل الحلول الفردية.

يمكن رسم الأطراف اليسرى $\mathcal{L}$ واليمنى $\mathcal{R}$ للمعادلتين (3-41) و (3-42) على نفس مخطط الرسم كتابعين للكمية k_{w}؛ الشكل (3-4). الأطراف اليمنى للمعادلتين (3-41) و (3-42) **هي توابع خطّيّة بميلٍ يساوي** $1/k_0$ **والطرف الأيسر هو** تابع تجيبي **أو** تابع جيبي. تعطي تقاطعات هذين المنحنيين قيم $k_{\mathrm{w},n}$ التي من أجلها تمتلك المسألة المدروسة هنا حلولاً تحقق كل الشروط الضرورية.

لتحليل النتائج نلاحظ أنّ المسألة المدروسة هنا توصف بوسيطين مستقلين: ارتفاع حفرة الكمون، V_b، وعرضه، L. بمقدورنا تثبيت أحد الوسيطين وتغيير الآخر. لنغيّر ارتفاع الحفرة، أي الوسيط k_0. في هذه الحالة لا يتغير الطرف الأيسر للمعادلة (3-41) والمنحنيات $\mathcal{L}$ الموافقة له موضحة في الشكل (3-4)، ولكن ميل الخط المستقيم، k_{w}/k_0، يُضبط بالكمية k_0. نرى من أجل قيم k_0 الصغيرة (V_b الصغير)، عندما يكون الميل كبيراً، كما يوضح الخط المتقطع− المنقط في الشكل (3-4)، وجود حلٍ واحدٍ $k_{\mathrm{w},1}$ فقط يوافق k_0 الصغيرة. يوجد الحل الأول من أجل أي قيمة لـ k_0 ويعطي المستوى الطاقي الأول $\varepsilon_1 = \hbar^2 k_{\mathrm{w},1}^2/(2m)$. وكلما ازدادت قيمة k_0 يظهر مستوى طاقة جديد عندما $k_{\mathrm{w}} = k_0 = \pi/L$، كما يوضح الخط المنقط في الشكل (3-4)، بطاقةٍ أخفض بقليل من V_b، $\varepsilon_2 \approx V_{\mathrm{b}}$. وبازدياد k_0 أكثر فأكثر يُصبح المستويان الطاقيان الأول والثاني أعمق والمستوى الثالث يظهر في الحفرة، وهكذا دواليك. في الحقيقة، تظهر مستويات طاقية جديدة عندما يُصبح الوسيط $\sqrt{2mV_{\mathrm{b}}L^2/\pi^2\hbar^2}$ عدداً صحيحاً.

يُظهر الشكل (3-5) عدداً من الحالات المقيّدة كتابعٍ لسماكة الحفرة من أجل قيمتين خاصتين لـ V_b ومن أجل كتلتين فعّالتين للجسيم المدروس. الوسطاء التي تمّ اختيارها مميزة من أجل حفر كمومية اصطناعية صنّعت على أساس المواد AlGaAs/GaAs (راجع الفصل القادم). يمكن أن نرى أنّه من أجل حفر كمومية "رقيقة" $\left(L < 100\ \mathring{\mathrm{A}}\right)$ تظهر مستويات طاقة جديدة فقط.



الشكل (3-5): عدد الحالات المقيّدة لحفرة كمونٍ مربعةٍ كتابعٍ لسماكة الحفرة: **(a)** $V_b = 224\ \mathrm{meV}$, $m = 0.067\ m_0$، **(b)** $V_b = 150\ \mathrm{meV}$, $m = 0.4\ m_0$.

المثال الأول الذي قمنا بدراسته مرتبط بحفرة كمونٍ لانهائية في العمق، عندما $k_0 \to \infty$. في هذه الحالة، يسعى ميل التابع الخطي في الشكل (3-4) نحو الصفر، والحلول توافق $k_w = \pi n/L$، ومستويات الطاقة تُعطى بالمعادلة (3-28) كما ذكرنا سابقاً.

وعلى غرار ما وجدنا في المثال الأول، تكون مستويات الطاقة من أجل حفرة كمونٍ بحواجز منتهية الارتفاع، متقطعةً أيضاً. المستوى الطاقي الأخفض (الحالة الأرضية) ليس صفرياً أيضاً. ولكن عدد المستويات المتقطعة منتهياً (محدوداً). والظاهرة المهمة الأخرى هي ظاهرة **تغلغل الجسيم** *Penetration of a Particle* من تحت الحاجز. تصف المعادلة (3-36) التابع الموجي تحت الحاجز. ولتفسير هذه الظاهرة ندرس الطاقة (2-9)، $\mathrm{H} \equiv \dfrac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$، من أجل جسيمٍ تقليديٍ: $\varepsilon = p^2/2m + V(z)$. بما أنَّ p^2 موجب دوماً، فإن حركة الجسيم ممكنة في المنطقة الفراغية المحققة للشرط $\varepsilon - V(z) \geq 0$. ومن أجل $\varepsilon < V_b$ تتطابق المنطقة "المسموحة تقليدياً" مع المنطقة "داخل" الحفرة الكمونية. حركة جسيم تقليدي كهذا مقيدة دوماً بمجال إحداثيات محدودٍ ولن نرى الجسيم التقليدي خارج المنطقة "المسموحة" على الإطلاق حيث طاقته الكليّة أقل من الطاقة الكامنة: هذا يعني أنَّ الجسيم التقليدي يتعامل مع أي حاجزٍ كحاجزٍ غير قابلٍ للاختراق. يُظهر تحليل الميكانيك الكمومي أنَّ التوابع الموجية محدودةً عند أي إحداثية ويمكن إيجاد الجسيم حتى في المناطق المحظورة تقليدياً، أو كما يُقال، تحت الحاجز.

يسمى مفعول تغلغل جسيمٍ من تحت الحاجز **بمفعول النفق** *Tunneling Effect*. وهو ظاهرة كمومية أساسية. فاحتمالية إيجاد الجسيم تتناقص بسرعة عند الابتعاد عن المجال المسموح تقليدياً.