

# محاسبه عددی نیروی برخوردی کوانتومی در یک چاه پتانسیل نامتناهی

مسعود رضوانی جلال\*، احسان پاکدامن رسا، مرضیه فراهانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر

پذیرش: ۹۹/۱۰/۱۷

دریافت: ۹۸/۸/۷

## چکیده

در این مقاله، با در نظر گرفتن یک چاه پتانسیل دوبعدی مربعی با دیواره‌های نامتناهی (ظرف نفوذ ناپذیر)، نیروی برخوردی ناشی از ذره کوانتومی محبوس در آن که به اجسام درون ظرف وارد می‌شود با پیروی از "مدل ذره در جعبه" به طور عددی محاسبه می‌شود. جسم‌های داخل ظرف به صورت سدچه‌ها یا چاهک‌های انرژی پتانسیل مدل‌سازی می‌شوند. از الگوریتم تفاضل محدود برای حل معادله شرودینگر و یافتن ویژه توابع و انرژی‌ها و از تانسور تنش کوانتومی نیز برای محاسبه نیرو استفاده می‌شود. برای مورد تک جسم، محاسبات نشان می‌دهند که بسته به نوع جسم و موقعیت آن درون ظرف و نیز شکل تابع موج ذره محبوس، نیروهای متفاوتی بر جسم وارد می‌آید. این نیروها با نحوه تغییرات مکانی انرژی ذره محبوس مرتبط هستند. هنگامی که بیش از یک جسم در ظرف قرار گیرد نیروی برخوردی وارد بر آنها یک نیروی جاذبه یا دافعه ظاهری بین اجسام ایجاد می‌کند. وجود پتانسیل خارجی در فضای ظرف (مثل پتانسیل گرانشی زمین) نیز بر نیروی برخوردی وارد بر اجسام تأثیرگذار است و باعث ایجاد نیروی خالصی در جهت شیب پتانسیل خارجی (مشابه نیروی بالابری ارشمیدس) و یا عکس آن می‌شود.

**واژگان کلیدی:** چاه پتانسیل نامتناهی، نیروی برخوردی کوانتومی، هیدرودینامیک کوانتومی.

## مقدمه

با قوانین ترمودینامیک و مکانیک آماری می‌توان نشان داد فشاری که یک گاز ایده‌آل  $N$ -اتمی ( $N \gg 1$ ) به دیواره‌های ظرف حاوی گاز و سایر اجسام موجود در ظرف وارد می‌کند از رابطه  $p = 2u/3$  به دست می‌آید که در آن  $u$  چگالی حجمی انرژی درونی گاز است. این فشار دارای یک مقدار همگن و همسانگرد بوده و مستقل از شکل ظرف و موقعیت اجسام درون آن است و فقط به دمای گاز بستگی دارد [۱]. مسأله برای حالتی که فقط یک اتم گازی ( $N=1$ ) در داخل ظرف وجود داشته باشد کاملاً متفاوت است و نیروی برخوردی و فشار ناشی از این اتم به جزئیات دقیق حرکت آن بستگی خواهد داشت.

\*نویسنده مسئول: rezvanijalal@malayeru.ac.ir

ذره پویایی که در یک فضای بسته محبوس است نیروی برخوردی به دیواره ظرف و اجسام درون آن وارد می‌کند. از دیدگاه کلاسیکی، برای ظرفی با دیواره‌های صلب و نفوذناپذیر این نیرو به صورت آنی است و دارای اندازه بی‌نهایت می‌باشد. به دست آوردن مسیر حرکت ذره و مشخص کردن زمان و محل برخورد ذره با دیواره‌ها که به اطلاعات اولیه ذره و نیز شکل ظرف و موقعیت اجسام درون آن بستگی دارد کار دشواری از دیدگاه کلاسیکی است. وقتی هم که یک نیروی خارجی (مثلاً جاذبه گرانشی زمین) در فضای درونی ظرف لحاظ شود پیچیدگی کار دو چندان خواهد شد. خوشبختانه، بررسی این نوع مسائل از دیدگاه کوانتومی که در آن چیزی به نام مسیر حرکت ذره، برخورد لحظه‌ای آن با دیواره و نیز نیروی ضربه‌ای بی‌نهایت وجود ندارد کار چندان چالش‌انگیزی نیست. با داشتن تابع موج ذره و استفاده از تانسور تنش کوانتومی (که از معادلات هیدرودینامیک کوانتومی تک ذره‌ای به دست می‌آید) می‌توان توزیع نیروی برخوردی وارد بر دیواره‌ها را با جزئیات کامل محاسبه کرد [۳ و ۲]. مقالات زیادی در مراجع به چشم می‌خورند که از مدل "ذره در جعبه" استفاده کرده و به بررسی نیروی برخوردی کوانتومی با استفاده از فرمول اهرنفسست یا فرمول بوهم (یا همان تانسور تنش کوانتومی) پرداخته‌اند [۵ و ۴]. البته بیشتر این بررسی‌ها به صورت یک‌بعدی هستند و در همه آنها فقط نیروی وارد بر دیواره چاه به دست آمده است. به ندرت می‌توان گزارش‌هایی پیدا کرد که در آنها نیروی برخوردی وارد بر اجسام درون چاه بررسی شده باشد در حالی که چنین مسأله‌ای می‌تواند زوایای پنهان زیادی داشته باشد که ارزش مطالعاتی دارند.

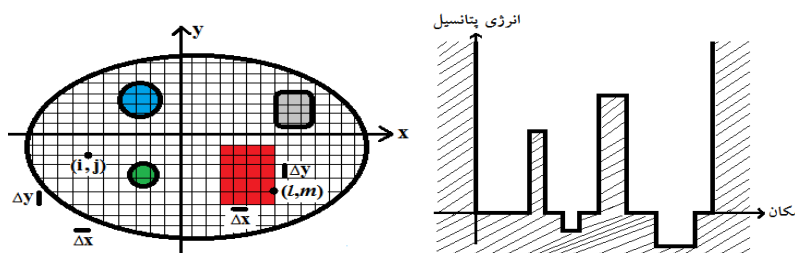
در مقاله حاضر، به محاسبه عددی نیروی برخوردی که یک ذره کوانتومی محبوس در داخل چاه کوانتومی به اجسام درون چاه وارد می‌کند پرداخته می‌شود. بدین منظور، ابتدا ویژه توابع موج ذره مورد نظر که در یک چاه پتانسیل دوبعدی مربعی با دیواره بی‌نهایت (یا همان ظرف نفوذناپذیر) رها شده و با سدچه‌ها و چاهک‌های موجود در چاه (که نماینده اجسام هستند) برهمکنش می‌کند به صورت عددی با الگوریتم تفاضل محدود به دست می‌آیند. سپس، با به کارگیری این توابع موج در تانسور تنش هیدرودینامیکی کوانتومی، نیروی برخوردی که ذره مذکور بر اجسام درون چاه وارد می‌کند به طور عددی محاسبه می‌شود.

ساختار مقاله به این صورت است: در بخش ۲ تئوری مسئله آورده می‌شود. بخش ۳ به نتایج شبیه‌سازی و بحث و بررسی آنها اختصاص داده شده است. جمع‌بندی و نتیجه‌گیری هم در بخش پایانی ارائه می‌شود.

## ۱- ملاحظات نظری و فرمول‌بندی

برای بررسی دینامیک کوانتومی یک ذره محبوس در داخل یک ظرف از مدل "ذره در جعبه" استفاده می‌شود. طبق این مدل می‌توان یک ظرف در بسته که امکان خروج ذرات از آن وجود ندارد را یک چاه پتانسیل با دیواره بی‌نهایت فرض کرد. در این‌جا برای سادگی کار از مدل دوبعدی استفاده می‌شود یعنی ظرفی که قرار است اجسامی در داخل آن

واقع شوند و ذره‌ای نیز در آن رها شود مانند یک چاه پتانسیل دوبعدی با مقطع دلخواه و دیواره بی‌نهایت بلند مدل‌سازی می‌شود. همین کار را می‌توان برای هر یک از جسم‌های درون ظرف نیز انجام داد و آنها را با پتانسیل‌های مناسب مدل‌سازی نمود. اگر جسمی کاملاً نسبت به ذره، نفوذ ناپذیر باشد مقدار پتانسیل معادل آن باید بی‌نهایت قرار داده شود و اگر نسبت به ذره نفوذپذیری اندکی داشته باشد می‌تواند با یک پتانسیل محدود مثبت (سدچه) و اگر هم تمایل به گیراندازی ذره داشته باشد با یک پتانسیل محدود منفی (چاهک) نشان داده شود. برای سادگی کار هیچ برهمکنشی بین خود اجسام لحاظ نمی‌شود به این معنی که اجسام هیچ جاذبه یا دافعه‌ای نسبت به هم ندارند و در وضعیت ثابت در مکان‌های مشخص واقع شده‌اند. حال در داخل چنین ظرفی که مقطعی از آن در شکل ۱ نشان داده شده است ذره‌ای به جرم  $m$  که می‌تواند آزادانه در لابه‌لای اجسام حرکت کند رها می‌شود. این ذره با دیواره ظرف و اجسام درون آن برهمکنش برخوردی می‌کند و به آنها نیرو وارد می‌سازد. ویژه انرژی‌ها و ویژه توابع موج ذره مذکور را می‌توان با حل معادله موج مستقل از زمان شرودینگر به دست آورد.



شکل ۱: نیم‌رخ یک‌بعدی از تعدادی سدچه و چاهک پتانسیل (که نماینده حضور اجسام هستند) در یک چاه پتانسیل با دیواره بی‌نهایت (شکل راست) و نمای دوبعدی آن که شبکه‌بندی فضای درون چاه را نیز نشان می‌دهد (شکل چپ).

### ۱-۲- حل عددی معادله شرودینگر

حل تحلیلی و دقیق معادله شرودینگر به جز در مسائل ساده‌ای که شامل پتانسیل‌های متقارن باشند به سادگی قابل انجام نیست و به همین دلیل در حل بسیاری از مسائل کوانتومی باید به روش‌های عددی و تقریبی روی آورد. در مقاله حاضر نیز که شامل یک چاه پتانسیل دو بعدی با مقطع دلخواه و تعدادی سدچه و چاهک پتانسیل با شکل‌ها، موقعیت‌ها و ارتفاع‌ها یا عمق‌های متنوع است برای حل معادله شرودینگر ذره ناگزیر باید به روش‌های عددی متوسل شد. الگوریتم‌های متنوعی برای حل عددی معادله شرودینگر وجود دارد که از آن جمله می‌توان به روش‌های اجزای محدود و تفاضل محدود اشاره کرد [۱۰]. در این جا از روش تفاضل محدود به دلیل سادگی زیادی که در گسسته‌سازی معادلات دیفرانسیل و اجرای رایانه‌ای دارد استفاده می‌شود. روش تفاضل محدود بر خلاف روش‌های اختلالی و تکراری نیاز به یک تابع اولیه برای شروع محاسبات ندارد و از طریق حساب ماتریسی قادر است که انرژی‌ها و توابع موج را با یک رایانه رومیزی معمولی در عرض چند دقیقه پیدا کند. طبق این الگوریتم، بعد از شبکه‌بندی فضای محاسباتی (که نمونه دکارتی آن در شکل ۱- چپ نشان داده شده است) معادله شرودینگر برای نقطه  $(i, j)$  شبکه به شکل گسسته زیر در می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\psi(i+1, j) - 2\psi(i, j) + \psi(i-1, j)}{\Delta x^2} + \frac{\psi(i, j+1) - 2\psi(i, j) + \psi(i, j-1)}{\Delta y^2} \right) + V(i, j)\psi(i, j) = E\psi(i, j) \quad (1)$$

که در آن از فرمول سه نقطه‌ای مشتق دوم در عملگر لاپلاسی استفاده شده است. برای اجرای این الگوریتم یک کد رایانه‌ای توسط نویسندگان مقاله در محیط برنامه‌نویسی ممتیکا نوشته شده است که با دریافت شکل ظرف و نیز تعداد، موقعیت و پتانسیل سدچه‌ها و چاهک‌های درون آن، ابتدا، کل فضای درون ظرف را با استفاده از یک سیستم مختصات مناسب (در اینجا دکارتی) شبکه‌بندی می‌کند. سپس نقاطی از شبکه را که در سطح ظرف و سطوح اجسام قرار دارند به عنوان نقاط مرزی شناسایی می‌کند و سایر نقاط شبکه را به عنوان نقاط غیرمرزی در نظر می‌گیرد. این کد در ادامه از طریق رابطه (۱) برای هر یک از نقاط غیرمرزی یک معادله شرودینگر گسسته بر حسب همسایگان چپ، راست، بالا و پایین نقطه می‌سازد. در آن دسته از نقاط مرزی که در سطح ظرف قرار دارند شرط صفر بودن تابع موج را (که بیانگر عدم نفوذ و خروج ذرات از ظرف است) اعمال می‌کند و در سایر نقاط مرزی که در سطح اجسام درون چاه واقع هستند نیز شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن را به کار می‌بندد. به عنوان مثال در نقطه مرزی  $(l, m)$  واقع در سطح سمت راست جسم مستطیلی بزرگ نشان داده در شکل ۱- چپ اعمال همزمان شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن (در راستای  $x$ ) منجر به رابطه زیر می‌شود:

$$\frac{\psi(l+1, m) - \psi(l, m)}{\Delta x} = \frac{\psi(l, m) - \psi(l-1, m)}{\Delta x} \quad (2)$$

که شکل ساده شده آن این گونه است:

$$\psi(l, m) = \frac{\psi(l+1, m) + \psi(l-1, m)}{2} \quad (3)$$

کد مذکور بعد از تشکیل معادلات گسسته شرودینگر در تمام نقاط غیرمرزی شبکه و نیز اعمال شرایط مرزی در نقاط مرزی، تعداد بسیار زیادی معادله-مجهول خطی ویژه مقدراری (به تعداد نقاط شبکه) ایجاد می‌کند و با حل آنها ویژه انرژی‌ها و ویژه توابع موج ذره محبوس را پیدا می‌کند. با داشتن این کمیت‌ها راه به سوی محاسبه تنش و نیروی برخوردی کوانتومی وارد بر اجسام درون ظرف از طرف ذره محبوس هموار می‌شود.

## ۲-۲- معادلات هیدرودینامیک کوانتومی

اگر ویژه انرژی‌ها و ویژه توابع موج به دست آمده در زیر بخش قبلی با شاخص  $n$  نامگذاری شوند آن‌گاه تابع موج وابسته به زمان هر کدام از این حالت‌های پایای ذره محبوس به صورت زیر خواهد بود:

$$\psi_n(i, j, t) = \psi_n(i, j) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (4)$$

این تابع موج را می توان به شکل دیگری هم نوشت:

$$\psi_n(i, j, t) = \sqrt{\rho(i, j)} e^{\frac{i}{\hbar} S(i, j, t)} \quad (5)$$

$$\rho(i, j) = |\psi_n(i, j)|^2, \quad S(i, j, t) = -E_n t$$

با استفاده از این تابع موج در تانسور تنش هیدرودینامیکی کوانتومی که دارای فرمول بندی زیر است می توان نیروی برخوردی وارد بر اجسام در برهمکنش با ذره را محاسبه کرد [۳]:

$$\vec{\Pi} = \begin{pmatrix} \Pi_{xx} & \Pi_{xy} \\ \Pi_{yx} & \Pi_{yy} \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$\Pi_{ij} = \delta_{ij} P + m(v_i v_j + u_i u_j)$$

$$P = -\frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 \rho, \quad \vec{v} = \frac{1}{m} \vec{\nabla} S, \quad \vec{u} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\vec{\nabla} \rho}{\rho}$$

در رابطه فوق  $P$  فشار هیدروستاتیک کوانتومی،  $\vec{v}$  سرعت شارش احتمال و  $\vec{u}$  سرعت پخشی احتمال است. در حالت های پایا (که مدنظر مقاله حاضر می باشد) فاز تابع موج،  $k$ ، مستقل از مکان است و به همین خاطر سرعت شارش احتمال دارای مقدار صفر خواهد بود. با استفاده از رابطه تنش (۶) می توان نیروی برخوردی وارد بر هر سطح دیفرانسیلی  $d\vec{A}$  از جسم مورد نظر را به صورت زیر حساب کرد:

$$d\vec{F} = \vec{\Pi} \cdot d\vec{A} = \begin{pmatrix} \Pi_{xx} & \Pi_{xy} \\ \Pi_{yx} & \Pi_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dA_x \\ dA_y \end{pmatrix} \quad (7)$$

المان سطح  $d\vec{A}$  برای هندسه دوبعدی (که مدنظر مقاله حاضر است) دارای شکل کلی زیر می باشد:

$$d\vec{A} = dA_x \hat{i} + dA_y \hat{j} = dy dz \hat{i} + dz dx \hat{j} \quad (8)$$

در هر نقطه مرزی از سطح یک جسم (که می تواند هر شکلی مانند مستطیل، دایره، بیضی و غیره داشته باشد) به راحتی می توان بردار  $d\vec{A}$  را به صورت حاصل ضرب دیفرانسیل مساحت  $dA$  در بردار یکه عمود بر سطح در آن نقطه تعریف کرد. برای مثال در نقطه مرزی  $(l, m)$ ، شکل ۱- چپ، مولفه های دکارتی دیفرانسیل سطح به صورت  $dA_x \approx \Delta z \Delta y$  و  $dA_y = 0$  خواهند بود که در آن به خاطر دوبعدی بودن مسأله (یعنی وابستگی به  $x$  و  $y$  و استقلال از  $z$ ) می توان  $\Delta z = 1$  را در نظر گرفت و به عبارت دیگر نیروی برخوردی را در واحد طول محور  $z$  محاسبه کرد.

کد کامپیوتری نوشته شده قادر است بعد از محاسبه توابع موج و انرژی ها و تبدیل آنها به شکل رابطه (۵) و استفاده از روابط (۶) و (۷) توزیع سطحی نیروی برخوردی وارد بر اجسام را محاسبه کند. نکته مهمی که باید مدنظر باشد این

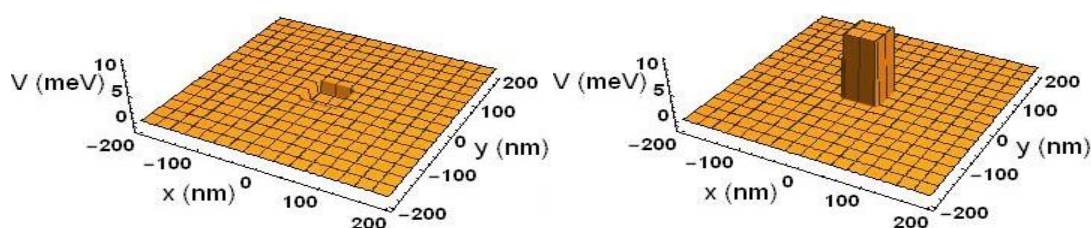
است که به دلیل نفوذ تابع موج به درون سدچه‌ها و چاهک‌ها لازم است تنش وارد بر اجسام هم از قسمت درونی جسم و هم قسمت بیرونی آن حساب شود و در نهایت حاصل جمع آن دو به صورت تنش خالص لحاظ شود.

## ۲- نتایج محاسبات عددی و بحث و بررسی آنها

برای انجام محاسبات، یک چاه پتانسیل مربعی به ضلع  $400 \text{ nm}$  و دیواره‌های بی‌نهایت در نظر گرفته می‌شود. در بخش اول شبیه‌سازی، یک جسم منفرد در داخل ظرف قرار می‌گیرد و نیروی برخوردی وارد بر آن که از برهمکنش ذره کوانتومی محبوس در ظرف نشأت می‌گیرد محاسبه می‌شود. در بخش بعدی هم نیروهای وارد بر دو جسمی که درون ظرف جای داده شده اند مورد شبیه‌سازی قرار می‌گیرد.

### ۳-۱- نیروی برخوردی وارد بر تک جسم

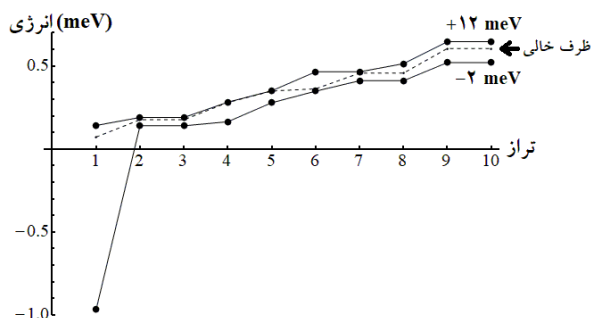
برای سادگی کار جسمی با مقطع مربعی به ضلع  $30 \text{ nm}$  که در مرکز ظرف نفوذ ناپذیر قرار گرفته است لحاظ می‌شود. همان‌طور که قبلاً هم گفته شد حضور جسم را می‌توان با پتانسیل‌های یکنواخت مثبت (سدچه) و یا منفی (چاهک) بسته به نوع جسم (با توجه به میزان نفوذپذیری یا گیراندازی ذره برخورد کننده با آن) مدل‌سازی کرد. برای کلی بودن محاسبات، حضور جسم یک بار با پتانسیل منفی (با مقدار دلخواه  $2 \text{ meV}$ ) و یک بار هم با پتانسیل مثبت (مثلاً  $12 \text{ meV}$ ) نشان داده می‌شود. البته انتخاب این مقادیر در عین حالی که کاملاً اختیاری است ولی به گونه‌ای لحاظ شده‌اند که با ساختارهای فیزیکی واقعی مانند نانوسیم‌ها و نقاط کوانتومی همخوانی داشته باشند [۷ و ۸]. در شکل ۲ توزیع پتانسیلی مسئله نشان داده شده است.



شکل ۲: حضور یک جسم دلخواه با مقطع مربعی به ضلع  $30 \text{ nm}$  در مرکز یک ظرف نفوذ ناپذیر مربعی به ضلع  $400 \text{ nm}$  وقتی که با پتانسیل مثبت (شکل راست با مقدار اختیاری  $12 \text{ meV}$ ) و یا پتانسیل منفی (شکل چپ با مقدار  $2 \text{ meV}$ ) مدل‌سازی شده باشد.

به منظور محاسبه نیروی برخوردی وارد بر جسم، ابتدا، معادله شرودینگر برای ذره‌ای به جرم اختیاری  $m = 0.067 m_e$  که در ظرف رها شده و با دیواره ظرف و جسم موجود در آن برهمکنش می‌کند حل می‌شود و انرژی‌ها و توابع موج آن

به دست می‌آیند. باز هم لازم به توضیح است که این انتخاب جرم (که در آن جرم الکترون آزاد است) به نحوی صورت گرفته که با جرم مؤثر الکترون در ساختارهای فیزیکی مانند نقاط کوانتومی هم مرتبه باشد [۱۰ و ۱۱]. مقدار انرژی محاسبه شده ده تراز اول ذرهٔ محبوس در ظرف خالی و نیز ظرفی که شامل یکی از این دو جسم باشد در شکل ۳ نشان داده شده است.



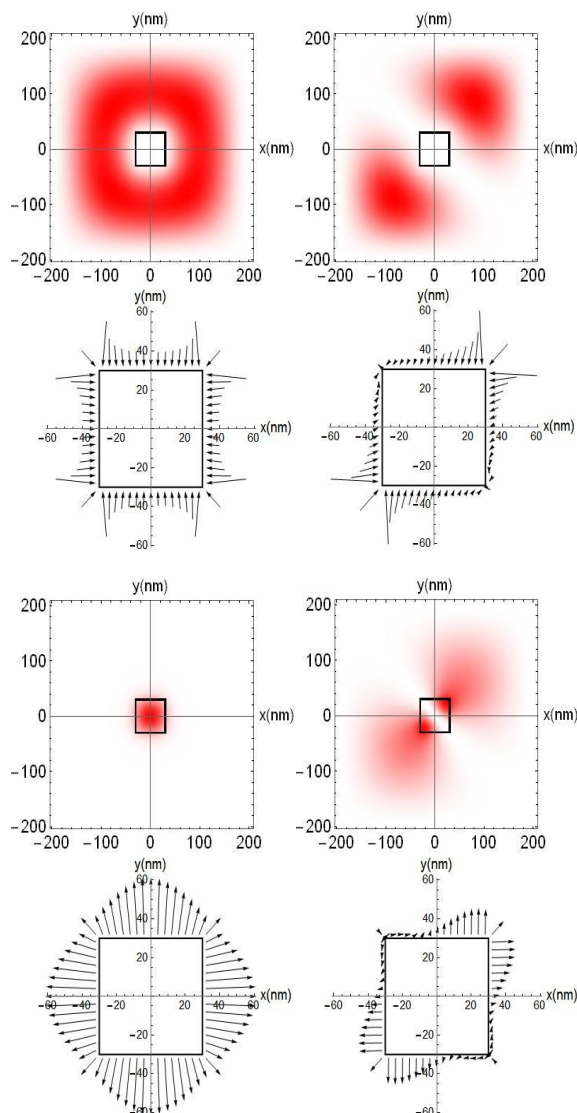
شکل ۳: مقادیر محاسبه شده انرژی ده تراز اول ذرهٔ محبوس در ظرف خالی و ظرفی که یک جسم (مثبت یا منفی) در آن قرار دارد.

این نمودارها نشان می‌دهند که انرژی ذرهٔ محبوس در حضور جسم مثبت (منفی) اندکی نسبت به انرژی ظرف خالی افزایش (کاهش) داشته است که با توجه به بالا رفتن (پایین آمدن) پتانسیل میانگین کف چاه قابل توجیه است. لازم به ذکر است که ظرف مذکور در عدم حضور اجسام خارجی در حقیقت یک چاه پتانسیل دوبعدی مستطیلی با دیوارهٔ بی‌نهایت است. برای چنین چاهی انرژی‌ها از فرمول تحلیلی زیر نیز قابل محاسبه هستند [۷]:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} \right), \quad m, n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

انرژی‌های به دست آمده از محاسبات ظرف خالی (شکل ۳) تطابق کاملی با این فرمول تحلیلی دارند که نشان دهندهٔ درستی آنها می‌باشد.

در شکل ۴ تابع موج دو تراز اول و نیز توزیع نیروی برخوردی وارد بر سطح جسم نشان داده شده است.

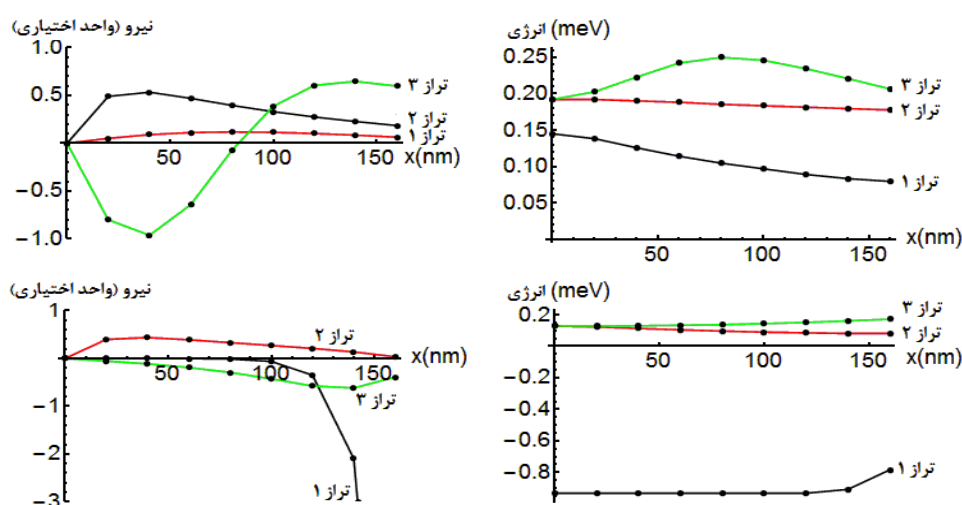


شکل ۴: توابع موج و توزیع نیروی برخوردی وارد بر سطح جسم (که با پیکان مشخص شده‌اند) برای وقتی که ذرهٔ محبوس در تراز اول (ستون چپ) و تراز دوم (ستون راست) با جسم مدل شده با پتانسیل مثبت (دو سطر بالا) و با پتانسیل منفی (دو سطر پایین) برهمکنش دارد.

از شکل ۳ کاملاً واضح است که تراز اول ذره برهمکنش کننده با جسم منفی تشکیل یک حالت مقید (یعنی انرژی منفی) می‌دهد ولی سایر ترازها (چه در جسم مثبت و چه در منفی) حالت‌های آزاد است. البته باید توجه داشت که با افزایش عمق پتانسیلی جسم منفی و پهنای آن، تعداد حالات مقید نیز بیشتر می‌شود. مقید بودن ذره در تراز ۱ جسم منفی و عدم تراوش آزادانهٔ آن به فضای ظرف نیز به خوبی در شکل ۴ (ستون چپ، سطر دوم از پایین) مشخص است. دقت در نمودارهای نیروی وارد بر اجزای سطح جسم مثبت یا منفی (که با پیکان‌های ریزی در شکل ۴ مشخص شده‌اند) این نکته را فاش می‌کند که توزیع سطحی نیروی برخوردی نیز متقارن است و به همین دلیل هیچ نیروی برخوردی



خالصی که بتواند جسم را جابه‌جا کند تولید نمی‌شود و جسم در حال تعادل به سر خواهد برد. برای این‌که بتوان نوع تعادل جسم از بابت پایداری و ناپایداری را مشخص کرد باید آن را اندکی از حالت تعادل منحرف کرده و نیروی خالص وارد بر آن را محاسبه نمود. برای فهمیدن این موضوع و نیز کسب اطلاعات بیشتر، جسم مربعی مذکور در مکان‌های مختلفی از محور  $x$  (یا هر راستای اختیاری دیگر) قرار داده شد و نیروی برخوردی کل وارد بر آن شبیه‌سازی شد. در ستون چپ شکل ۵ نحوه تغییرات نیروی کل وارد بر جسم بر حسب موقعیت طولی آن برای تراز اول، دوم و سوم ذره محبوس در ظرف ترسیم شده است.



شکل ۵: نیروی وارد بر جسم (ستون چپ) و انرژی ذره محبوس (ستون سمت راست) بر حسب موقعیت جسم مثبت (سطر بالا) یا جسم منفی (سطر پایین) روی محور  $x$  برای تراز ۱، تراز ۲ و تراز ۳ ذره محبوس.

انرژی سه تراز اول ذره و وابستگی آنها به مکان جسم مثبت و منفی نیز در ستون راست شکل ۵ آورده شده است. نمودارهای نیرو در شکل ۵ به وضوح نشان می‌دهند که به محض خارج شدن جسم از موقعیت تعادلی، یک نیروی برخوردی خالص بر آن وارد می‌شود. مقدار و جهت این نیرو به نوع جسم، مکان آن و نیز تابع موج ذره محبوس بستگی دارد.

در جسم مثبت (شکل ۵-ستون چپ-ردیف بالا)، نیروی برخوردی اعمال شده از طرف ذره واقع در تراز ۱ و تراز ۲ همواره دارای مقدار مثبت (یعنی در جهت مثبت محور  $x$ ) است و باعث رانده شدن جسم به سمت دیواره راست ظرف می‌شود. به عبارت دیگر، تعادل جسم مثبت در برهمکنش با ذره موجود در تراز ۱ و تراز ۲ از نوع تعادل ناپایدار است و کوچک‌ترین انحراف از وضعیت تعادل باعث طرد شدن آن از موقعیت تعادلی می‌شود. از طرف دیگر، نیروی وارد بر جسم مثبت در تراز ۳ ذره محبوس به صورت تناوبی است. این نیرو با دور شدن جسم از وسط ظرف ابتدا مقادیر منفی به خود می‌گیرد ولی از یک فاصله‌ای به بعد ( $x \approx 83 \text{ nm}$ ) مقدار آن مثبت می‌شود. این بدان معناست که تعادل جسم مثبت در

این حالت از نوع پایدار است و منحرف کردن آن از وضعیت تعادلی باعث تولید نیروی بازگرداننده‌ای می‌شود که جسم را وادار به برگشت به نقطه تعادل و نوسان حول آن می‌کند.

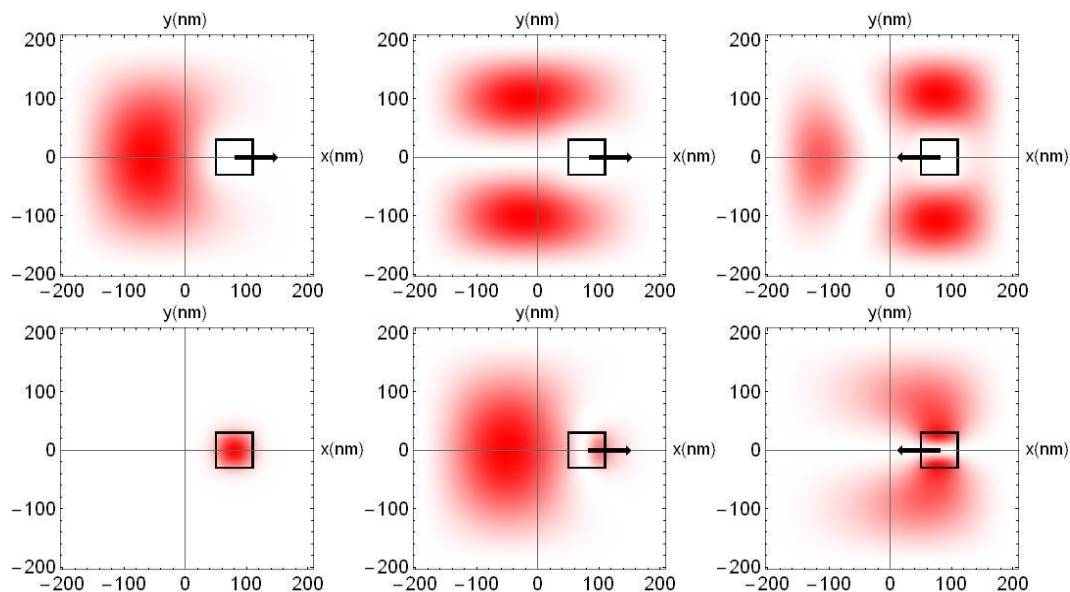
وضعیت نیروی برخوردی برای جسم منفی کاملاً متفاوت است (شکل ۵- ستون چپ- ردیف پایین). نیرو در تراز ۱ ذره (که یک حالت مقید است) دارای مقادیر منفی است. مقدار این نیرو تا فواصل زیادی از مرکز ( $x \approx 100 \text{ nm}$ ) تقریباً صفر است ولی بعد از آن با نزدیک شدن جسم به دیواره شروع به رشد سریع و نمایی می‌کند. با توجه به زیاد شدن اندازه این نیرو، مقادیر آن برای فواصل بیشتر از  $140 \text{ nm}$  ترسیم نشده است. از این نوع رفتار می‌توان استنباط کرد که تعادل جسم از نوع بی‌تفاوت است بدین معنی که با منحرف کردن آن (البته نه بیش‌تر از فاصله  $100 \text{ nm}$ ) هیچ نیروی قابل ملاحظه‌ای که بخواهد جسم را از تعادل دورتر کند و یا به آن بازگرداند احساس نمی‌شود. البته همان‌طور که گفته شد با نزدیک شدن بیش از حد جسم به دیواره ظرف، نیروی برخوردی باعث ایجاد یک دافعه قوی بین آنها می‌شود. این نیروی قوی در واقع از دیواره بلند ظرف نشأت می‌گیرد و باعث رانده شدن ذره مقید در جسم به سمت مرکز ظرف و در نتیجه دفع جسم از نزدیک شدن به دیوار می‌شود. نیرو در تراز ۲ مثبت است و ناپایداری تعادل را نشان می‌دهد ولی در تراز ۳ منفی است که به معنای پایداری تعادل است.

رفتار جالب نیروهای برخوردی که در بالا به آن اشاره شد با استفاده از تغییرات انرژی ذره کوانتومی محبوس (ستون راست شکل ۵) نیز قابل توجیه است. دقت در نمودار تغییرات مکانی انرژی ذره و مقایسه آن با نمودار متناظر نیرو نشان می‌دهد که اندازه و جهت نیروی وارد بر جسم با شیب انرژی ذره مرتبط است. هر جا شیب تغییرات انرژی مثبت است نیروی منفی بر جسم وارد می‌شود و بالعکس، هر جایی هم که دارای شیب منفی باشد یک نیروی مثبت به وجود می‌آید. به عبارت دیگر می‌توان رابطه آشنای زیر را برای نیروی برخوردی کوانتومی وارد بر اجسام نیز لحاظ کرد:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}E \quad (10)$$

البته باید دقت داشت که این رابطه فقط نیروی برخوردی کل را محاسبه می‌کند و هیچ اطلاعاتی از توزیع نیرو در سطح جسم (که فقط با تانسور تنش کوانتومی قابل بررسی است) به دست نمی‌دهد.

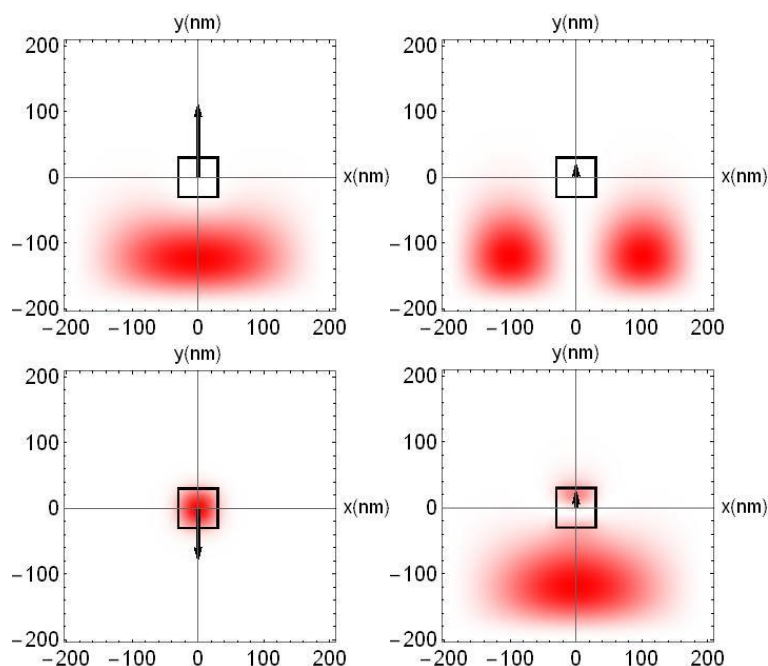
از شکل توابع موج نیز می‌توان اطلاعات کیفی درستی در مورد نیروی برخوردی وارد بر جسم کسب کرد. برای داشتن یک دید کلی از نحوه تغییرات تابع موج بر حسب  $x$ ، توابع موج تراز ۱، تراز ۲ و تراز ۳ ذره در برهمکنش با جسم مثبت یا منفی واقع در مکان دلخواه  $x=80 \text{ nm}$  در شکل ۶ نشان داده شده‌اند.



شکل ۶: توابع موج ذره واقع در تراز ۱، تراز ۲ و تراز ۳ (از چپ به راست) در وضعیتی که جسم مثبت (سطر بالا) یا جسم منفی (سطر پایین) در موقعیت  $x=80 \text{ nm}$  قرار گرفته باشد. علامت پیکان نشان دهنده جهت نیروی برخوردی کل وارد بر جسم از سمت ذره می‌باشد.

با دقت در این توابع موج می‌توان نیروی برخوردی وارد بر جسم را به طور کیفی درک کرد. شکل تابع موج تراز ۱ و تراز ۲ و تمرکز آن در پشت جسم مثبت باعث رانده شدن آن به سمت دیواره ظرف می‌شود (تعادل ناپایدار). به همین صورت، بیشتر بودن غلظت تابع موج تراز ۳ در جلوی جسم مثبت نسبت به پشت آن باعث ایجاد یک نیروی بازگرداننده به سمت مرکز ظرف می‌شود (تعادل پایدار). در برهمکنش تراز ۱ ذره محبوس با جسم منفی (یا همان حالت مقید) شکل تابع موج تفاوت چندانی با شکل آن در وضعیت تعادلی (شکل ۴، ستون چپ، سطر دوم از پایین) ندارد و از این رو نیروی برخوردی خالص وارد بر آن صفر است و تعادل بی‌تفاوت دارد. ازدحام تابع موج تراز ۲ در پشت جسم منفی آن را به سمت دیواره سوق می‌دهد (ناپایدار) و شکل خاص تابع موج تراز ۳ نیز جسم را به سمت مرکز ظرف باز می‌گرداند (پایدار). البته همه این تفاسیر کیفی است و محاسبه دقیق نیرو همان طور که در بالا انجام شد فقط از طریق تانسور تنش کوانتومی میسر است.

در انتهای این زیر بخش به حضور یک پتانسیل خارجی در فضای ظرف و تأثیر آن بر نیروی برخوردی وارد بر جسم پرداخته می‌شود. برای سادگی، یک پتانسیل خطی افزایشی بر حسب  $y$  (مانند پتانسیل گرانشی زمین که با ارتفاع زیاد می‌شود و نیروی رو به پایین وارد می‌کند) به فضای ظرف افزوده می‌شود. توابع موج تراز ۱ و تراز ۲ ذره محبوس و نیروی برخوردی وارد بر جسم مثبت و منفی واقع در مرکز ظرف برای پتانسیل اضافه شده اختیاری  $V(y)=y/400$ ، که در آن  $y$  بر حسب نانومتر و انرژی پتانسیل بر حسب میلی‌الکترون ولت است، در شکل ۷ نشان داده شده است.

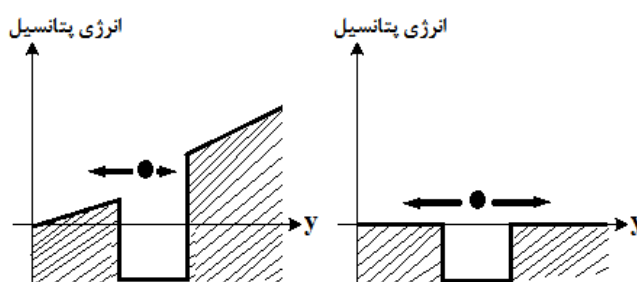


شکل ۷: نیروی برخوردی کل (مشخص شده با علامت پیکان) وارد بر جسم مثبت (سطر بالا) و جسم منفی (سطر پایین) در تراز ۱ (ستون چپ) و تراز ۲ (ستون راست) وقتی که به فضای ظرف یک پتانسیل خطی افزایشی (با  $y$ ) اضافه شود. توجه: طول پیکان‌ها بهنجار (یعنی هم-مقیاس) است و معیاری از اندازه نیرو می‌باشد.

همان‌طور که واضح است بر خلاف شکل ۴ (که هیچ نیروی خالصی روی جسم واقع در مرکز ایجاد نشده است) حضور پتانسیل اضافی (که تقارن پتانسیلی مسئله را بر هم زده است) باعث وارد آمدن یک نیروی خالص بر جسم می‌شود. این نیرو برای برهمکنش تراز ۱ و ۲ ذره با جسم مثبت (سطر بالای شکل ۷) در جهت مثبت محور  $y$  است. دقت در توزیع تابع موج آنها نشان می‌دهد که احتمال حضور ذره در نواحی پایینی ظرف بیشتر از نواحی بالایی آن می‌باشد. این موضوع از دید کلاسیکی نیز قابل درک است بدین معنا که ذرهٔ محبوس توسط نیروی خارجی از نواحی پتانسیل بالا به سمت نواحی کم پتانسیل حرکت می‌کند و به زبان مکانیک کوانتومی ازدحام تابع موج در نواحی کم پتانسیل (در این‌جا پایین ظرف) بیشتر می‌شود. همین تمرکز تابع موج در نواحی زیرین جسم مثبت است که باعث ایجاد نیروی برخوردی رو به بالا به آن شده است.

به طور مشابه، نیروی رو به بالای ایجاد شده در تراز ۲ جسم منفی (سطر پایین شکل ۷، ستون راست) نیز از تمرکز تابع موج ذره در ناحیهٔ زیرین جسم سرچشمه می‌گیرد. ولی وضعیت در برهمکنش تراز ۱ با جسم منفی که نیروی برخوردی رو به پایین وارد می‌کند متفاوت است (سطر پایین شکل ۷، ستون چپ). ذره تراز ۱ در برهمکنش با جسم منفی، همان‌طور که قبلاً نیز گفته شد، یک حالت مقید تشکیل داده و، به عبارت دیگر، در داخل جسم منفی گرفتار شده است. این ذره در برهمکنش با دیوارهٔ داخلی جسم منفی به آن نیروی برخوردی وارد می‌آورد. وقتی که هیچ پتانسیل خارجی وجود نداشته باشد این ضربات برخوردی به صورت متقارن است و باعث می‌شود، همان‌طور که قبلاً در شکل ۴

(ستون چپ، سطر دوم از پایین) ذکر شد، هیچ نیروی برخوردی خالصی از طرف جسم احساس نشود. ولی هنگامی که ذره مقید با یک پتانسیل خارجی که میل دارد آن را به سمت پایین ظرف بکشد نیز برهمکنش کند آن گاه ضربات برخوردی بیشتری به کف جسم اعمال می‌کند. به همین دلیل جسم منفی یک نیروی برخوردی خالص در جهت نیروی خارجی (در این جا پایین ظرف) دریافت خواهد کرد. این موضوع را می‌توان بر اساس پدیده تونل‌زنی نیز توجیه کرد. ذره مقید در جسم منفی به خاطر محدود بودن عمق چاهک می‌تواند به بیرون جسم تونل بزند. موقعی که پتانسیل خارجی وجود نداشته باشد آهنگ تونل‌زنی از دیواره بالا و پایین جسم یکسان است و به همین خاطر نیروی برخوردی خالصی به جسم وارد نمی‌شود، شکل ۸- راست. از طرف دیگر، وقتی که یک پتانسیل خارجی افزایشی (مثلاً در راستای  $y$ ) به فضای درون ظرف اعمال شود آن گاه عمق چاهک در یک سمت کم و در سمت دیگر زیاد می‌شود و همین امر آهنگ تونل‌زنی را در قسمت کم عمق بیشتر و در قسمت عمیق کمتر می‌کند و باعث وارد شدن نیروی برخوردی بیشتری به دیواره کم عمق چاهک می‌شود، شکل ۸- چپ.



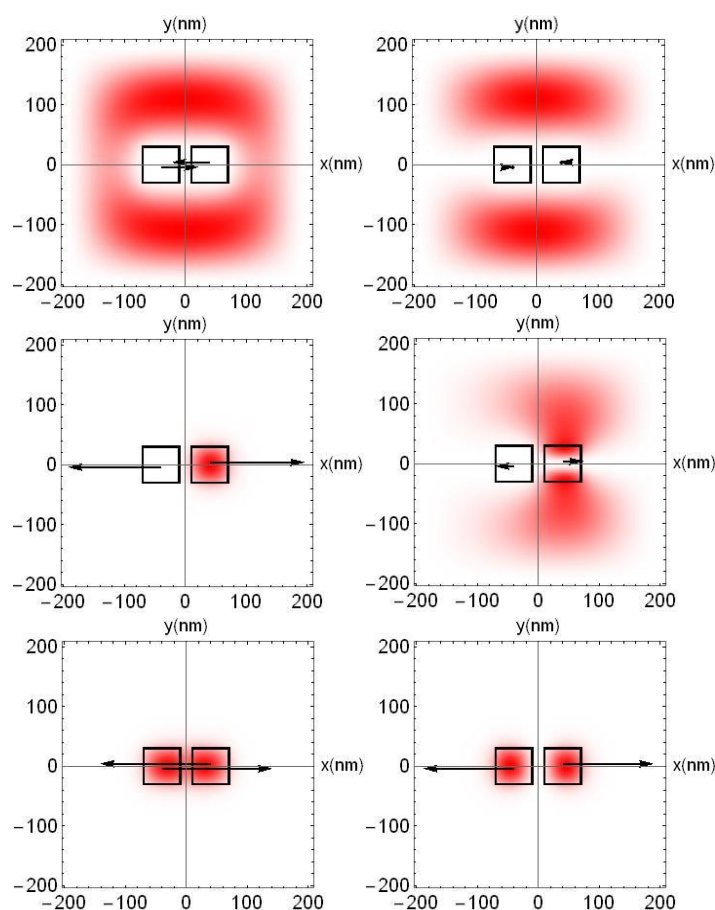
شکل ۸: توزیع پتانسیل یک چاهک در عدم حضور پتانسیل خارجی (شکل راست) و حضور یک پتانسیل خارجی افزایشی بر حسب  $y$  (شکل چپ). تونل‌زنی (و اعمال نیروی برخوردی) ذره گرفتار در چاهک برای شکل راست به صورت متقارن و برای شکل چپ نامتقارن رخ می‌دهد.

همان‌طور که قبلاً گفته شد محاسبات این بخش برای یک جسم منفی مربعی به ضلع  $30 \text{ nm}$  با عمق چاهکی  $meV$  ۲- انجام شده است. در چاهک‌هایی با عمق بیشتر و ابعاد بزرگ‌تر تعداد حالات مقید بیشتری ایجاد می‌شود. محاسبات مربوط به آنها (که در این جا آورده نشده است) نشان می‌دهد که در تمام حالات مقید ذره- چاهک یک نیروی برخوردی خالص در جهت نیروی خارجی توسط جسم دریافت می‌شود. همه این موارد، توجیه ذکر شده در بالا (یعنی تونل‌زنی و عدم تقارن برخوردی) را تأیید می‌کنند.

یافته‌های جالبی که در بالا به دست آمدند در هیچ مقاله یا کتابی ذکر نشده است. آن‌چه که در منابع قابل دسترس (مثل مراجع [۵ و ۴]) دیده می‌شود صرفاً محاسبه نیروی برخوردی کوانتومی ناشی از ذره محبوس به دیواره‌های ظرف می‌باشد و در هیچ کدام از آنها نیروی وارد بر جسم درون ظرف بررسی نشده است.

## ۳-۲- نیروی برخوردی وارد بر دو جسم

در این بخش نیروی برخوردی کوانتومی وارد بر دو جسم نزدیک به هم که در داخل ظرف قرار دارند مورد بررسی قرار می‌گیرد. برای مقایسه آسان‌تر با مورد تک‌جسمی، هر دوی این اجسام نیز به شکل مربع با ضلع  $30 \text{ nm}$  انتخاب شده و به صورت متقارن روی محور  $x$  با فاصله مرکز تا مرکز اختیاری  $80 \text{ nm}$  قرار داده می‌شوند. سه ترکیب پتانسیلی مختلف برای مدل‌سازی این دو جسم در نظر گرفته می‌شود: (۱) هر دو مثبت باشند، (۲) یکی (در این جا جسم سمت چپ) مثبت و دیگری (جسم راست) منفی باشد، و (۳) هر دو منفی باشند. باز هم مقدار  $12 \text{ meV}$  برای جسم مثبت و مقدار  $meV$  برای جسم منفی لحاظ خواهد شد. در شکل ۹ توابع موج تراز ۱ و تراز ۲ ذره محبوس به همراه نیروی برخوردی خالص وارد بر هر جسم در این سه پیکربندی نشان داده شده است.



شکل ۹: نیروی برخوردی کوانتومی وارد بر هر جسم در تراز ۱ (ستون چپ) و تراز ۲ (ستون راست) ذره محبوس درون ظرف برای وضعیتی که هر دو جسم مثبت باشند (سطر بالا)، جسم چپ مثبت و جسم راست منفی باشد (سطر وسط)، و هر دو منفی باشند (سطر پایین). توجه شود که طول پیکان‌ها در هر سطر هم-مقیاس است ولی طول آنها در سطرها مختلف مقیاس‌های متفاوتی دارد.

اطلاعات ارزشمندی از این نمودارها قابل حصول است. در پیکربندی اول (هر دو مثبت) که یک وضعیت کاملاً متقارن است به هر یک از دو جسم یک نیروی برخوردی هم‌اندازه ولی مختلف‌العلامه وارد می‌آید که باعث جذب شدن آنها به سمت هم می‌شود. البته باید دقت داشت که در فرض مسأله هیچ برهمکنشی بین خود اجسام لحاظ نشده است و این نیروی جاذبه‌ی ظاهری در حقیقت از برخورد کوانتومی ذره‌ی محبوس در چاه با اجسام تشکیل شده است. میزان این نیرو باز هم به تابع موج ذره‌ی محبوس (یعنی این که در کدام تراز باشد) بستگی دارد.

در پیکربندی نامتقارن دوم (یکی مثبت و دیگری منفی)، تراز ۱ (که باز هم یک حالت مقید با تمرکز تابع موج در داخل جسم منفی است) باعث ایجاد نیروی برخوردی دورکننده در هر جسم می‌شود. این دو نیروی مختلف‌العلامه هستند ولی اندازه آنها برابر نیست و علت آن توزیع نامتقارن تابع موج در اطراف هر جسم است. در تراز ۲ نیز یک نیروی دافعه (البته ضعیف‌تر از قبل) بین اجسام شکل می‌گیرد.

پیکربندی سوم (هر دو منفی) نیز یک وضعیت کاملاً متقارن دارد و از این رو نیروهای وارد بر هر دو جسم باید مساوی و مختلف‌العلامه باشند که همین‌طور هم هست. نکته جالب این‌جاست که هم تراز ۱ و هم تراز ۲ تشکیل حالت مقید با انرژی منفی داده‌اند و تابع موج در داخل اجسام متمرکز است. در حالت مقید اول (شکل ۹، سطر پایین، ستون چپ) یک نیروی جاذبه بین دو جسم برقرار است ولی در حالت مقید دوم (شکل ۹، سطر پایین، ستون راست) یک نیروی دافعه بین آنها وجود دارد. چنین به نظر می‌آید که نیروی برخوردی ذره به دام افتاده در حالت مقید اول نوعی همگرایی و میل به تشکیل پیوند در بین دو جسم ایجاد می‌کند و، برعکس، در حالت مقید دوم نوعی واگرایی و از هم‌گریزی بین آنها شکل می‌دهد.

همان‌طور که گفته شد در این مقاله هیچ برهمکنشی (جاذبه یا دافعه) بین اجسام لحاظ نشده است. البته تا حدی می‌توان بر اساس مفهوم جمع نیروها حدس زد که اگر چنین برهمکنشی وجود داشته باشد چه اتفاقی می‌افتد. فرض کنید که دو جسم دارای جاذبه باشند. در این صورت، بسته به حالت کوانتومی ذره‌ی محبوس، نیروی برخوردی ممکن است هم جهت با جاذبه باشد (مثل شکل ۹، سطر پایین، ستون چپ) و آنرا تقویت کند و یا این که خلاف جهت آن باشد و آن را تضعیف کند (مثل شکل ۹، سطر پایین، ستون راست). این وضعیت برای حالتی که اجسام برهمکنش دافعه‌ای داشته باشند نیز رخ می‌دهد.

مباحثی که به آن اشاره شد برای وضعیتی بود که هر دو جسم به صورت متقارن در مرکز ظرف قرار گرفته باشند. می‌توان وضعیت‌های نامتقارنی نیز برای آنها لحاظ کرد و حتی تأثیر پتانسیل خارجی بر آنها را هم بررسی نمود ولی در این‌جا برای پرهیز از زیاد شدن حجم مقاله از آنها اجتناب می‌شود. همان‌طور که در ابتدای بخش ۲ نیز گفته شد اجسامی که بررسی شدند همگی ثابت و بی‌حرکت بودند. این فرض برای وقتی که جرم اجسام بی‌نهایت باشد کاملاً درست است. اگر جرم جسم بی‌نهایت نباشد ولی در مقایسه با جرم ذره‌ی محبوس خیلی بیشتر باشد (مثل الکترون‌ها و یون‌ها در داخل یک نقطه‌ی کوانتومی) می‌توان حرکت آن را به صورت کلاسیکی و از طریق قانون دوم نیوتون با استفاده از نیروهای

برخوردی که در این جا به دست آمده‌اند حل کرد. وقتی هم جرم اجسام با جرم ذره مقید قابل مقایسه باشد باید حرکت آنها را نیز از طریق معادله شرودینگر در حل مسئله وارد کرد.

در مرجع [۷]، مولکول‌های چند اتمی (مثل  $C_8H_8$ ) مانند یک جعبه کوانتومی (یا همان ظرف نفوذناپذیر) مدل‌سازی شده‌اند و الکترون (یا الکترون‌های) آزاد آن نیز همانند ذره محبوس در چاه در نظر گرفته شده‌اند. در آن جا توزیع تکانه الکترونی در داخل مولکول به دست آمده است ولی هیچ مطالعه‌ای روی نیروی برخوردی وارد بر اتم‌ها (یعنی اجسام) صورت نگرفته است. مطالبی که در بالا ذکر شد می‌تواند در کنار کاربردی بودن برای نقاط و سیم‌های کوانتومی در مطالعه این نوع مولکول‌ها و نیز خوشه‌های اتمی و مولکولی نیز کاربرد داشته باشد.

### ۳- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در پژوهش حاضر، نیروی برخوردی کوانتومی ناشی از یک ذره محبوس در ظرف که به اجسام درون آن وارد می‌شود با استفاده از تانسور تنش هیدرودینامیکی کوانتومی و طراحی یک کد کامپیوتری حجیم مورد محاسبه و بررسی عددی قرار گرفت. نتیجه‌گیری‌های نهایی از موارد بحث شده به شرح ذیل می‌باشند.

#### مورد تک‌جسمی

- محاسبات نیرو و توزیع سطحی آن در وضعیت تک‌جسمی این نکته را فاش کرد که وقتی یک جسم دارای مرکز متقارن (مثل جسم مربعی در این جا) به طور متقارن در مرکز تقارن ظرف قرار گیرد توزیع نیروی برخوردی وارد بر سطح آن نیز متقارن خواهد بود. به همین خاطر هیچ نیروی برخوردی خالصی که بتواند جسم را جابه‌جا کند تولید نمی‌شود و جسم در حالت تعادل به سر خواهد برد. البته پایداری، ناپایداری و بی‌تفاوتی این تعادل نسبت به انحراف‌های کوچک توسط تابع موج ذره محبوس مدیریت خواهد شد. با دقت در شکل توابع موج و توزیع سطحی نیرو می‌توان به این نکته نیز پی برد که شباهت زیادی بین تقارن تابع موج و تقارن نیروی برخوردی وارد بر سطوح وجود دارد. این نکته می‌تواند پایه و اساسی برای طراحی یک روش جهت یافتن تابع موج بر حسب توزیع سطحی نیروی برخوردی قلمداد شود.

- محاسبات نشان داد که نیروهای برخوردی متنوعی از نوع جاذبه، دافعه و تناوبی بر حسب میزان انحراف از وضعیت تعادل بر جسم وارد می‌آید. جالب‌ترین آنها ظهور یک نیروی برخوردی بسیار قوی (از نوع دافعه) برای حالت مقید در نزدیکی دیواره ظرف بود که باعث دور شدن جسم از آن می‌شد. این نیرو از تأثیر دیواره بلند چاه بر تابع موج ذره مقید در جسم نشأت می‌گرفت.

- هنگامی که یک نیروی خارجی (مانند جاذبه زمین) به فضای ظرف اعمال شود یک نیروی برخوردی برآیند در خلاف جهت نیروی خارجی بر اکثر وضعیت‌های جسم مثبت وارد می‌آید. این نیروی برخوردی را می‌توان مشابه نیروی



بالابری (یا همان نیروی ارشمیدس) در سیالات دانست که در خلاف جهت نیروی جاذبه است. البته این نیروی بالابری کوانتومی بر خلاف نیروی بالابری سیال کلاسیکی که فقط با حجم جسم و چگالی سیال متناسب است به شکل تابع موج نیز بستگی دارد. محاسبات همچنین نشان داد که وقتی حالت مقید جسم منفی در حضور نیروی خارجی قرار گیرد نیروی برخوردی برآیند وارد بر آن در جهت نیروی خارجی خواهد بود که با تونلزنی نامتقارن ذره به بیرون جسم قابل توجهی می‌باشد.

### مورد دو جسمی

• محاسبه نیروی برخوردی کوانتومی وارد بر هر جسم از یک سیستم چند جسمی نشان داد که بسته به نوع و موقعیت اجسام و نیز تابع موج ذره محبوس، نیروی‌های مختلفی بر هر جسم وارد می‌شود. این نیروهای برخوردی در ظاهر به صورت نیروهای جاذبه یا دافعه در بین اجسام نمود پیدا می‌کنند. وضعیت مربوط به دو جسم منفی که تشکیل دو حالت مقید می‌دهند از جذابیت خاصی برخوردار است. در اولین حالت مقید، نیروی برخوردی ذره باعث ایجاد نوعی جاذبه و تمایل به تشکیل پیوند در بین اجسام می‌شود ولی در حالت مقید دوم نوعی دافعه و از هم‌گریزی بین آنها برقرار می‌کند. مشابه این وضعیت در پیوند بین اتم‌های فیزیکی (مانند نقاط کوانتومی و یا میکروکاوک‌های فوتونیک) نیز وجود دارد که به حالت‌های پیوندی و پاد پیوندی معروف هستند [۸].

مباحث فوق نشان می‌دهد که حالات مقید خصوصیات جالب‌تری نسبت به حالات آزاد دارند. تعادل بی‌تفاوت آنها در فضای زیادی از ظرف، دریافت نیروی دافعه قوی حین نزدیکی به دیواره ظرف، میل به حرکت در جهت نیروهای خارجی، و نیز تشکیل پیوندها و پاد پیوندها از جمله از این خصوصیات است. بررسی جزئیات بیشتری از آنها در کارهای آتی نویسندگان مقاله انجام خواهد شد. نتایج حاصل از این پژوهش می‌تواند در فهم بهتر مسأله برخورد در کوانتوم و نیز طرح مباحث نوینی مانند موتورها و ماشین‌های کوانتومی و همچنین کشف خواص جدید نقاط کوانتومی، خوشه‌های اتمی و مولکولی و ماکرومولکول‌ها مفید و قابل استفاده باشد [۷ و ۹].

### منابع

1. R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Second Edition, Elsevier (1996).
2. R. E. Wyatt, *Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics*, Springer (2000).
3. M. Tsubota, M. Kobayashi, H. Takeuchi, "Quantum hydrodynamics", *Physics Reports* **522** (2013) 191–238.

4. S. D. Vincenzo, "Confinement, average forces, and the Ehrenfest theorem for a one-dimensional particle", *Pramana journal of physics* **80** (5) (2013) 797–810.
5. S. V. Mousavi, "Quantum effective force in an expanding infinite square-well potential and Bohmian perspective", *Physica Scripta* **86** (3) (2012) 035004.
6. Yiming Li, O. Voskoboynikov, C. P. Lee, S. M. Sze, "Energy and coordinate dependent effective mass and confined electron states in quantum dots", *Solid State Commun.* **120** (2001) 79-83.
7. M. Vos, E. Weigold, "Particle-in-a-box momentum densities compared with electron momentum spectroscopy measurements", *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **123** (2002) 333–344.
8. K. J. Vahala, "Optical microcavities", *Nature* **424** (2003) 839-846.
9. H. T. Quan, "Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. II.", *PHYSICAL REVIEW E* **79**, 041129, (2009) 1-10.

۱۰. طهماسب مردانی، "محاسبه ویژه توابع و ویژه انرژی‌ها در نانوسیم‌ها با استفاده از روش اجزای محدود"، *مجله پژوهش فیزیک ایران*، جلد ۱۲، شماره ۴، (زمستان ۱۳۹۱) صفحات ۳۹۵–۳۹۹.

۱۱. ابراهیم صادقی، "ویژه مقادیر انرژی حامل‌ها در سیم‌های کوانتومی مستطیلی با جرم مؤثر فضایی"، *مجله پژوهش فیزیک ایران*، جلد ۳، شماره ۴، (تابستان ۱۳۸۲)، صفحات ۲۸۹–۲۹۳.