

محاسبات تحلیلی احتمال عبور با استفاده از مدل پتانسیل مستطیلی

مریم السادات رفیعی^۱، علی مقاری^{۲*}

۱- دکتری، شیمی فیزیک، پردیس علوم، دانشکده شیمی، دانشگاه تهران، رایانامه: maryam.rafiei@ut.ac.ir

۲ و* - دکتری، شیمی فیزیک، پردیس علوم، دانشکده شیمی، دانشگاه تهران، رایانامه: maghari@ut.ac.ir

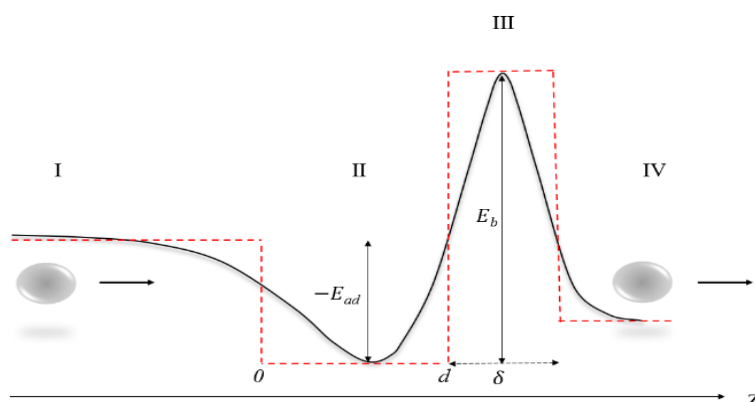
واژگان کلیدی: احتمال عبور، رزونانس، محاسبات تحلیلی.

۱- مقدمه

بدون تردید، تونل زنی کوانتومکانیکی از مهم ترین و شناخته شده ترین اثرات کوانتومی است که نقش حیاتی در علوم طبیعی از زمینه های مختلف فیزیک و شیمی تا زیست شناسی را ایفا می کند (کالان، ۱۹۷۷). در این مقاله مدل پتانسیل قابل حل (تحلیلی) که به طور تقریب با واقعیت فیزیکی سیستم های گاز-غشا سازگار باشد را به کار گرفته و با حل معادله شرودینگر احتمال عبور مولکول های گاز را به شکل عبارت های تحلیلی به دست می آوریم.

۲- روش

با توجه به شکل (۱) با در نظر گرفتن پتانسیل به صورت مستطیلی ساده، مولکول های گاز برای عبور از غشا از چهار منطقه عبور می کنند: (۱) منطقه فاز گازی که مولکول های گاز در فاصله ای دور از غشا قرار دارند (منطقه I)، انتقال این مولکول ها متناظر با جریان ورودی از سمت راست و جریان بازتابی به سمت چپ هستند؛ (۲) منطقه جذب درون چاه پتانسیل (منطقه II)، مولکول های گاز در این ناحیه به داخل چاه پتانسیلی که قبل از رسیدن مولکول ها به حفره ها قرار دارد، پخش می شوند؛ (۳) مولکول ها به دلیل نیروهای دافعه مرتبط با عبور از منطقه فشرده حفره های نانو به سدی برای عبور برخورد می کنند (منطقه III)؛ (۴) مولکول های گاز در صورت عبور از سد پتانسیل به فضای باز منتقل می شوند (منطقه IV).



شکل ۱: نمودار شماتیک عبور مولکول ها از میان حفره غشا. خط پر پتانسیل واقعی و خط چین مدل پتانسیل مستطیلی مورد استفاده در این تحقیق است

با استفاده از معادلات تابع موج در چهار ناحیه ذکر شده و حل معادلات شرودینگر با اعمال شرایط مرزی و همچنین به کارگیری متغیرهای کاهش یافته، می توان ضرایب عبور، جذب، واجذب و بازگشت را محاسبه کرد.

۳- بحث

با استفاده از روش های ذکر شده در بخش قبل، با حل جبری معادلات تمام ضرایب (جذب، واجذب و بازگشت) به صورت تابعی از ضریب عبور به دست خواهند آمد. بدین ترتیب، با داشتن ضریب عبور می توان سایر ضرایب ذکر شده را محاسبه و بررسی کرد. احتمال عبور به صورت کاهش یافته (بی بعد) مطابق با معادله (۱) به دست آمد.

$$|T|^2 = \frac{4\tilde{k}^2\tilde{k}''^2 \left[(\tilde{k}^2 + \tilde{k}'^2) \sin^2(\tilde{k}'\tilde{d}) + 4\tilde{k}^2\tilde{k}'^2 \cos^2(\tilde{k}'\tilde{d}) \right] / (\tilde{k}' - \tilde{k})^2}{|\mathcal{D}(\tilde{k}, \tilde{k}', \tilde{k}''; \tilde{d}, \tilde{\delta})|^2} \quad (1)$$

به طوری که مخرج کسر $|\mathcal{D}(\tilde{k}, \tilde{k}', \tilde{k}''; \tilde{d}, \tilde{\delta})|^2 = (\tilde{k}^2 + \tilde{k}'^2)(\tilde{k}'^2\mathcal{P}^2 + \tilde{k}^2\mathcal{R}^2)$ می باشد که در آن، $\mathcal{P} = \tilde{k}' \sinh(\tilde{k}''\tilde{\delta}) - \tilde{k}'' \cosh(\tilde{k}''\tilde{\delta})$ و $\mathcal{R} = \tilde{k}' \sinh(\tilde{k}''\tilde{\delta}) \cos(\tilde{k}'\tilde{d}) - \tilde{k}'' \cosh(\tilde{k}''\tilde{\delta}) \sin(\tilde{k}'\tilde{d})$ می باشند. همچنین بزرگی اعداد موجی k, k' و k'' به صورت $k \equiv \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}, k' \equiv \frac{\sqrt{2m(\epsilon + \epsilon_{ad})}}{\hbar}$ و $k'' \equiv \frac{\sqrt{2m(\epsilon_b - \epsilon)}}{\hbar}$ تعریف شده اند که ϵ انرژی جنبشی مولکول ورودی، ϵ_{ad} عمق چاه پتانسیل مولکولی (انرژی جذب)، ϵ_b سد پتانسیل مولکولی، d پهنای چاه پتانسیل، δ پهنای سد انرژی، m جرم مولکول و $\hbar$ ثابت پلانک کاهش یافته است. متغیرهای کاهش یافته نیز به صورت $\tilde{z} = \frac{z}{\delta}, \tilde{d} = \frac{d}{\delta}, \tilde{\delta} = 1$ می باشد که مشخص شد که شاهد تکینگی در احتمال عبور هستیم که باعث پیدایش پدیده رزونانس می گردد. اگر شرایط فیزیکی حالت رزونانس را تامین کند، در این صورت جداسازی سامانه ها یا ایزوتوپ های مختلف یک مولکول با بیشینه بازدهی رخ می دهد. برای داشتن رزونانس با استفاده از پتانسیل مورد بررسی در این پژوهش باید شرط $\epsilon = \frac{1}{2m} \left(\frac{n + \frac{\pi}{4}\hbar}{d} \right)^2 - \epsilon_{ad}$ تامین شود که یک معادله کلی برای تمام سامانه ها است و وابسته به جرم و پارامترهای غشا و سامانه است. به طور مثال، با استفاده از این معادله دمای مورد نیاز برای ایجاد رزونانس برای هر یک از ایزوتوپ های $^{16}\text{O}_2$ و $^{18}\text{O}_2$ به ترتیب با ۱۱۱ و ۸ برابر است. بنابراین، با استفاده از معادله حاصل شده، می توان دما و انرژی فرودی (که با شتاب دهنده قابل کنترل است) را به نحوی تنظیم کرد که بهترین شرایط برای جداسازی ایزوتوپ ها یا مولکول ها از یک غشا فراهم شود. از طرف دیگر، با در نظر گرفتن معادله (۱) می توان به تاثیر سد انرژی، انرژی چاه پتانسیل و نسبت پهنای چاه پتانسیل به پهنای سد انرژی رسید. با بررسی مقادیر مختلف اعداد موجی $\tilde{k}, \tilde{k}_{ad}$ و $\tilde{k}_b$ و همچنین $\tilde{d}$ می توان دریافت که هرچه مقادیر اعداد موجی کاهش یافته $\tilde{k}_{ad}$ و $\tilde{k}_b$ کوچک تر باشد، یا به عبارتی دیگر، با داشتن حفره و مولکول مشخص، هرچه انرژی چاه پتانسیل و سد پتانسیل کم تر باشد، احتمال عبور بالاتر خواهد بود. همچنین به ازای اعداد موجی کاهش یافته $\tilde{k}_{ad}$ و $\tilde{k}_b$ ثابت، مقدار بهینه ای برای نسبت پهنای چاه پتانسیل به پهنای سد پتانسیل برای رسیدن به بیشینه احتمال عبور به دست می آید که می تواند به ساخت و یا تنظیم غشا برای جداسازی هرچه بهتر در سامانه مشخص مورد نظر کمک کند.

۴- نتیجه گیری

در این مقاله با بررسی تحلیلی احتمال عبور ذرات از غشا مشاهده گردید که در نقاطی شاهد تکینگی هستیم که منجر به ایجاد پدیده رزونانس می گردد. همچنین به منظور رسیدن به مقدار بیشینه احتمال عبور، تاثیر مقادیر چاه پتانسیل، سد انرژی و نسبت پهنای چاه پتانسیل به سد انرژی مورد بررسی قرار گرفت.

منابع و مراجع

[1] Callan Jr, C. G., & Coleman, S. (1977). Fate of the false vacuum. II. First quantum corrections. *Physical Review D*, 16(6), 1762.