GIẾNG THẾ VUÔNG HỮU HẠN

TRẦN KHÔI NGUYÊN

LÊ QUỐC DUY

PHẠM NGUYỄN THÀNH ĐẠT

NGUYỄN LÊ KHẢI HOÀN

LÊ THƯỢNG PHƯƠNG ANH

Ngày 16 tháng 10 năm 2024

1 Lý thuyết

1.1 Giếng thế vuông hữu hạn

Xét giếng thế vuông hữu hạn:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 \quad , & -a \leq x \leq a, \\ \\ 0 \quad , & |x| > a, \end{cases} \tag{1}$$

trong đó V_0 là hằng số dương.

Xét trường hợp trạng thái liên kết. Trong vùng $x < a$, $V(x) = 0$(nằm ngoài giếng), phương trình Schrödinger có dạng:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \text{hoặc } \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi, \tag{2}$$

với $\kappa \equiv \dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ là số thực dương. Nghiệm tổng quát cho $\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$. Số hạng thứ nhất bị triệt tiêu khi $x \to -\infty$. Nên nghiệm tổng quát cho ψ đơn giản thành:

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad (x < -a) \tag{3}$$

Trong vùng $-a < x < a$, phương trình Schrödinger có dạng:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi, \quad \text{hoặc } \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi, \tag{4}$$

với $l \equiv \dfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$. Mặc dù E mang giá trị âm, nhưng đối với trạng thái liên kết, E vẫn phải lớn hơn $-V_0$, và l cũng phải là số thực dương. Nghiệm tổng quát cho ψ trong vùng $-a < x < a$ là:

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx), \qquad (-a < x < a), \tag{5}$$

C, D là các hằng số bất kì. Nghiệm tổng quát cho ψ tại vùng $x > a$: $\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$, nhưng số hạng cuối bị triệt tiêu khi $x \to \infty$. Vậy hàm sóng đơn giản thành:

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}, \qquad (x > a). \tag{6}$$

Hàm sóng cho 3 vùng có dạng:

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x}, & (x > a), \\ D\cos(lx), & (0 < x < a), \\ \psi(-x), & (x < 0). \end{cases} \tag{7}$$

Nhờ vào tính liên tục của hàm sóng ψ, tại $x = a$:

$$Fe^{-\kappa a} = D\cos(la), \tag{8}$$

và tính liên tục của đạo hàm hàm sóng ψ:

$$-\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD\sin(la) \tag{9}$$

Chia 2 vế phương trình (8) , (9) ta được:

$$\kappa = l\tan(la) \tag{10}$$

Khi lấy $l^2 + \kappa^2$, thành phần năng lượng bị triệt tiêu. Nên ta có:

$$l^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \tag{11}$$

Vì κ, l là các hàm theo E, để giải tìm E chúng ta sẽ cần đưa ra một số kí hiệu:

$$z \equiv la, \qquad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} \tag{12}$$

Phân tích thứ nguyên cho z_0

$$\begin{aligned} [z_0] &= \left[\frac{m}{eV \times s}(kg \times eV \times 1.6e - 19)^{1/2}\right] \\ &= \left[\frac{m}{eV \times s}(kg \times J)^{1/2}\right] \\ &= \left[\frac{m}{eV \times s}(kg \times \frac{kg \times m^2}{s^2})^{1/2}\right] \\ &= \left[\frac{kg \times m^2}{eV \times s^2}\right] = \left[\frac{J}{eV}\right] = constant, \end{aligned} \tag{13}$$

ta có thể thấy z_0 là đại lượng không có thứ nguyên.

Từ phương trình (11):

$$(l^2 + \kappa^2)a = a\frac{2mV_0}{\hbar^2} = z_0^2$$
$$\Rightarrow \kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2} \tag{14}$$
$$\Rightarrow \tan z = \sqrt{\left(\frac{z0}{z}\right)^2 - 1}. \tag{15}$$

Phương trình (15) có thể giải số để tìm ra tất cả nghiệm có thể bằng các điểm cắt nhau giữa RHS và LHS.

- **Giếng sâu, rộng**. Với $a, V_0 \gg$, điều này đồng nghĩa với $z_0 \gg$.
- **Giếng nông, hẹp**. Với $a, V_0 \ll$, điều này đồng nghĩa với $z_0 \ll$. z_0 càng giảm ta càng có ít nghiệm cho trạng thái liên kết. Với $z_0 < \frac{\pi}{2}$, ta chỉ còn lại một nghiệm cho trạng thái liên kết. Mặc cho z_0 có nhỏ bao nhiêu, ta luôn tìm được một nghiệm cho trạng thái liên, mặc dù rất yếu.

2 Giải số

giải số như nào v.v

3 Phương pháp

3.1 Phương pháp Bisection

```
def bisection(f, a, b, eps, N, z0):
for i in range(N):
        c = (a + b) / 2
        if abs(f(c, z0)) < eps:
                break
        if f(a, z0) * f(c, z0) < 0:
                b = c
        elif f(c, z0) * f(b, z0) < 0:
                a = c
        else:
                break
return c
```

3.2 Phương pháp Newton Raphson

```
def newton(f, p0, eps, N, z0):
p0_n = p0
for n in range(0, N + 1):
p0_n = p0_n - f(p0_n, z0) / df(p0_n, z0)
if df(p0_n, z0) == 0:
        break
if abs(f(p0_n, z0)) < eps:
        break
return p0_n
```

3.3 Phương pháp Secant

```
def secant(f, p0, p1, eps, N, z0):
p0_n = p0
p1_n = p1
for n in range(N + 1):
        df = (f(p1_n, z0) - f(p0_n, z0)) / (p1_n - p0_n)
        p_n = p0_n - f(p0_n, z0) / df
if f(p0_n, z0) * f(p_n, z0) < 0:
        p0_n = p0_n
        p1_n = p_n
elif f(p1_n, z0) * f(p_n, z0) < 0:
        p0_n = p_n
        p1_n = p1_n
if abs(f(p_n, z0)) < eps:
        break
if abs(p1_n - p0_n) < eps:
        break
if f(p_n, z0) == 0:
        break
return p_n
```

4 Kết quả

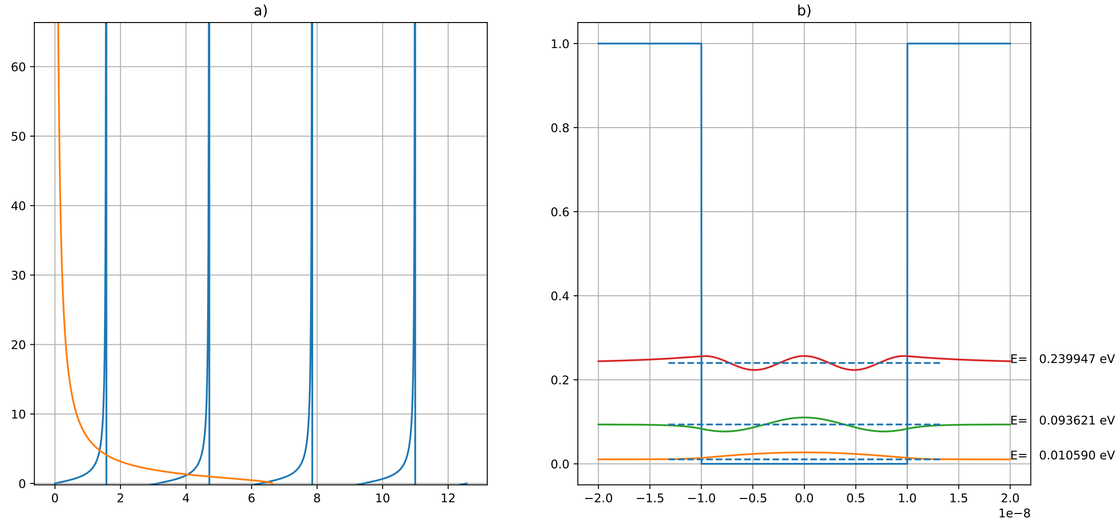

Figure. 1: a) Nghiệm của phương trình $\tan z = \sqrt{\left(\frac{z0}{z}\right)^2 - 1}$. b) Hàm sóng ứng với các mức năng lượng khi $a = 10nm, V_0 = 1eV$.