

GIỀNG THỀ VUÔNG HỮU HẠ

TRẦN KHÔI NGUYỄN

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:

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

trong đó V_0 là hằng số dương.

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

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

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

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

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

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

với $l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$. 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:

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad (-a < x < a), \quad (5)$$

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 $x \rightarrow \infty$. Vậy hàm sóng đơn giản thành:

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

Hàm sóng cho 3 vùng có dạng:

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

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

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

và tính liên tục của đạo hàm hàm sóng ψ :

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

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

$$\kappa = l \tan(la) \quad (10)$$

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

$$l^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (11)$$

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

$$z \equiv la, \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \quad (12)$$

Phân tích thứ nguyên cho z_0

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

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

Từ phương trình (11):

$$(l^2 + \kappa^2)a = a \frac{2mV_0}{\hbar^2} = z_0^2$$

$$\Rightarrow \kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2} \quad (14)$$

$$\Rightarrow \tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}. \quad (15)$$

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

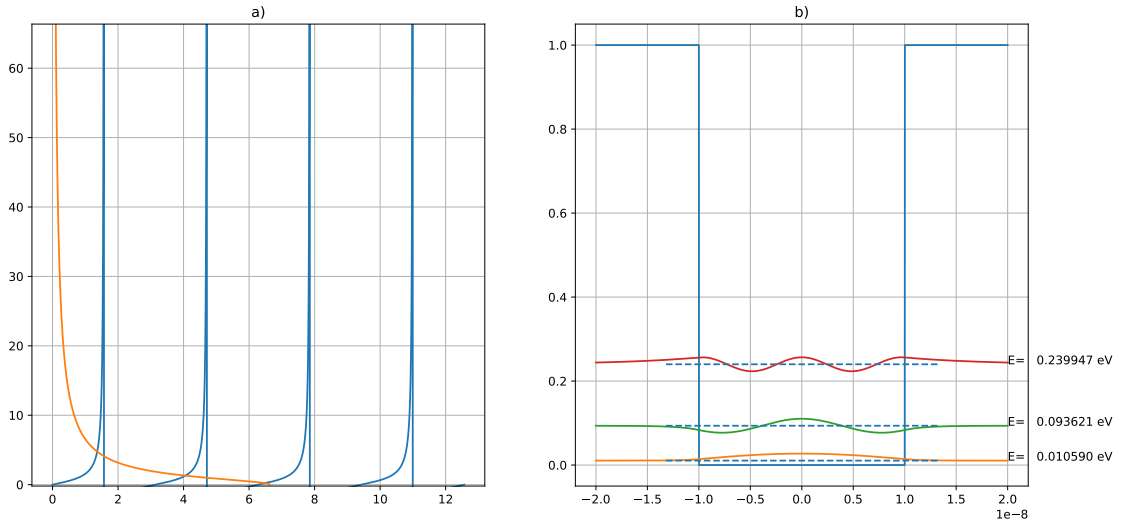


Figure. 1: a) Nghiệm của phương trình $\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$. b) Hàm sóng ứng với các mức năng lượng khi $a = 10nm, V_0 = 1eV$.