GIẾNG THẾ VUÔNG HỮU HẠN

TRẦN KHÔI NGUYÊN

LÊ QUỐC DUY

PHẠM NGUYỄN THÀNH ĐẠT

NGUYỄN LÊ KHẢI HOÀN

LÊ THƯỢNG PHƯƠNG ANH

Ngày 18 tháng 10 năm 2024

Mục lục

1 Lý thuyết

1.1 Bài toán vật lý

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:

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

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):

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

$$\Rightarrow \kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2} \tag{14}$$

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

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

- **Trường hợp giếng sâu rộng:** a_0 và V_0 càng lớn nên z_0 càng lớn, đồ thị vế phải sẽ giao với đồ thị của vế trái càng nhiều điểm. Với điều kiện xác định của căn thức thì ta sẽ sẽ có tập xác định của z là $0 < z < z_0$. Cộng thêm tính tuần hoàn của $\tan z$ thì $z \in (0, \frac{\pi}{2}) \cup (\frac{\pi}{2} + k\pi, \frac{\pi}{2} + (k+1)\pi)(k = 0, 1, 2, 3...)$. Với mỗi điểm cắt sẽ ứng với một mức năng lượng (z là hàm của năng lượng). Và với mỗi điểm đó sẽ ứng với một hàm sóng.
- **Trường hợp giếng nông hẹp:** Là khi z_0 rất nhỏ. Số nghiệm của phương trình sẽ ít vì hàm căn thức rất hẹp nên sẽ cắt hàm $\tan z$ ít điểm hơn. Nhưng dù z_0 rất nhỏ tiến tới 0 thì vẫn tồn tại ít nhất một điểm cắt, nghĩa là vẫn sẽ luôn tồn tại một trạng thái cơ bản của hệ. rất yếu.

2 Phương pháp giải

2.1 Phương pháp hình học

Một cách nhanh nhất để giải và tìm nghiệm cho $\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ đó là vẽ LHS và RHS trên cùng một đồ thị. Tại những điểm cắt nhau trên đồ thị, đó là nghiệm của bài toán.

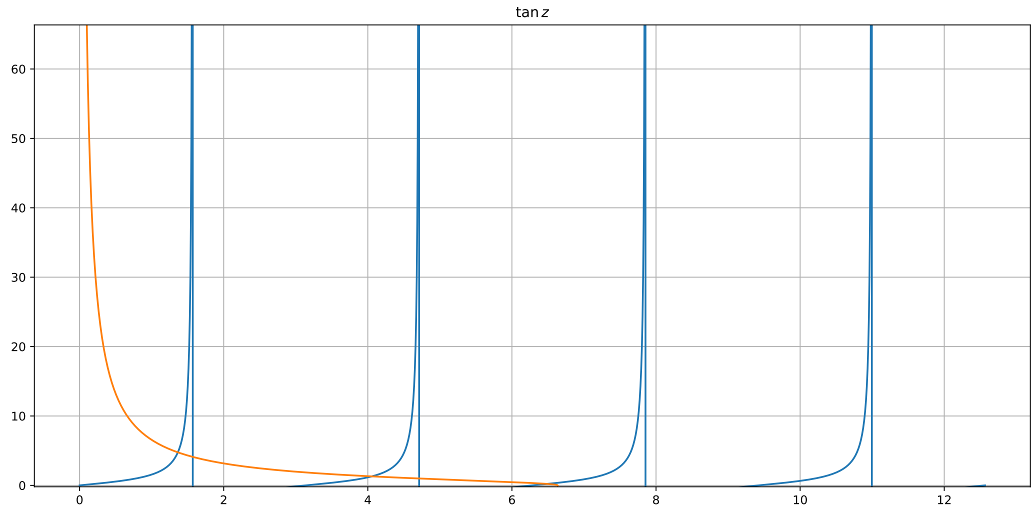

Figure. 1: Nghiệm của phương trình $\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$

Mặc dù cho z_0 rất bé, ta luôn tìm được một nghiệm chẵn. Không nhất thiết phải cần có nghiệm lẻ.

2.2 Giải số

Sử dụng phương pháp hình học đem lại cho ta kết quả nhanh, tiện lợi. Nhưng bên cạnh đó cũng có thể giải phương trình $\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ bằng thuật toán truy hồi sử dụng các phương pháp Chia đôi khoảng cách, phương pháp Newton - Raphson, phương pháp Secant.

$$y(z) = \tan z - \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} = 0 \tag{16}$$

Mục tiêu bây giờ là tìm ra điểm giao nhau bằng 0 của hàm này và đó sẽ là nghiệm ta cần tìm. Nhưng ở số hạng thứ nhất hàm tan sẽ bị phân kì khi $z = \pi/2 + k\pi$, và ở số hạng thứ hai bị phân kì khi $z = 0$ hoặc $z_0 < z$. Để giải quyết vấn đề này, chúng tôi đưa ra một phương pháp giải đó là giải số $y(z)$ trong khoảng lân cận $0 + \epsilon \to \dfrac{\pi}{2} - \epsilon$ và cứ thế tăng một $k\pi$ với $k = 0, 1, 2, 3...$

3 Kết quả

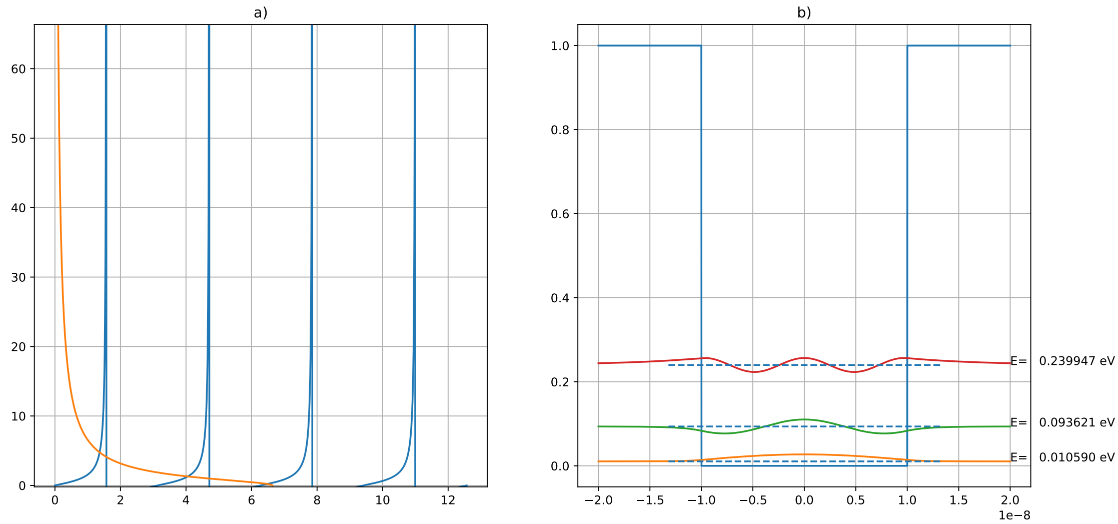

Figure. 2: a) Nghiệm của phương trình $\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$. b) Hàm sóng ứng với các mức năng lượng khi $a = 10nm, V_0 = 1eV$.

Khi giải số cho phương trình $\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$, chúng ta đã sử dụng các thông số như sau: $V_0 = 1eV, a = 10nm, m = 0.067 \times m_e, D = V_0/20$ với số lần lặp $N = 10000$.

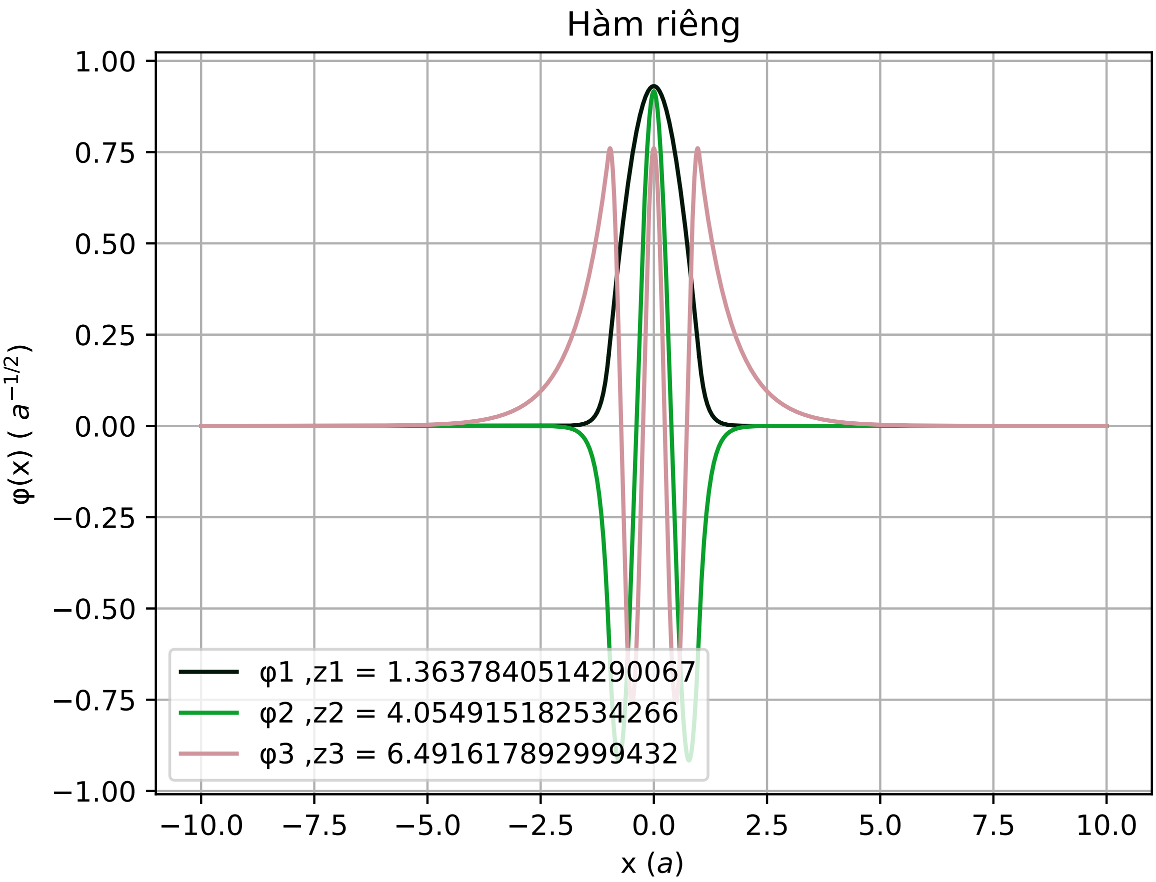

Figure. 3: Hàm sóng ở các trạng thái dừng. Với $a_0 = 10nm, V_0 = 1eV$

4 Appendix

4.1 Hệ số chuẩn hóa

$$
\begin{aligned}
1 &= 2\int_0^\infty \left|\psi(x)\right|^2 \, dx \\
&= 2\left[\int_0^a |D|^2 \cos^2(lx)\, dx + \int_a^\infty |F|^2 e^{-2\kappa x}\, dx\right] \\
&= 2\left[\int_0^a |D|^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(2lx)\right)\, dx + \int_a^\infty |F|^2 e^{-2\kappa x}\, dx\right] \\
&= 2\left[|D|^2 \left(\frac{x}{2} + \frac{\sin(2lx)}{4l}\right)\Bigg|_0^a + |F|^2 \frac{e^{-2\kappa x}}{-2\kappa}\Bigg|_a^\infty\right] \\
&= 2\left[|D|^2 \left(\frac{a}{2} + \frac{\sin(2la)}{4l}\right) + |F|^2 \frac{e^{-2\kappa a}}{2\kappa}\right]
\end{aligned}
$$

Ta xét điều kiện biên liên tục tại $x = a$:

$$
\begin{aligned}
Fe^{-\kappa a} &= D\cos(la) \\
\Rightarrow F &= De^{ka}\cos(la) \qquad (17)
\end{aligned}
$$

Xét đạo hàm theo biến x của ψ:

$$
\begin{aligned}
&\left.\frac{d(Fe^{-kx})}{dx}\right|_{x=a^+} = \left.\frac{d(D\cos(lx))}{dx}\right|_{x=a^-} \\
&\Rightarrow -\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD\sin(la) \\
&\Rightarrow \kappa = l\tan(la). \qquad (18)
\end{aligned}
$$

Thay (1) và (3) vào ta được:

$$\begin{aligned}
1 &= 2\left[|D|^2\left(\frac{a}{2}+\frac{\sin(2la)}{4l}\right)+e^{2\kappa a}\cos^2(la)\frac{e^{-2\kappa a}}{2k}\right] \\
&= 2\left[|D|^2\left(\frac{a}{2}+\frac{\sin(2la)}{4l}\right)+|D|^2\frac{\cos^2(la)}{2\kappa}\right] \\
&= |D|^2\left[a+\frac{\sin(2la)}{2l}+\frac{\cos^2(la)}{\kappa}\right] \\
&= |D|^2\left(a+\frac{\sin(2la)}{2l}+\frac{\cos^2(la)}{l\tan(la)}\right) \\
&= |D|^2\left[a+\frac{\sin(la)\cos(la)}{l}+\frac{\cos^3(la)}{l\sin(la)}\right] \\
&= |D|^2\left[a+\frac{\cos(la)}{l\sin(la)}\left(\sin^2(la)+\cos^2(la)\right)\right] \\
&= |D|^2\left[a+\frac{1}{l\tan(la)}\right] \\
1 &= |D|^2\left(a+1/\kappa\right)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow D = \sqrt{\frac{1}{a+1/\kappa}}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow F &= De^{\kappa a}\cos(la) \\
&= \sqrt{\frac{1}{a+1/\kappa}}e^{\kappa a}\cos(la)\kappa
\end{aligned}$$