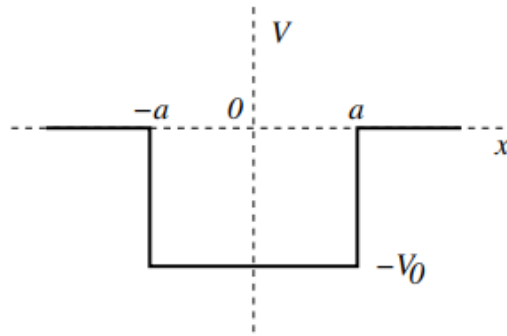


# BÀI TOÁN GIỀNG THỂ VUÔNG HỮU HẠN Ở TRẠNG THÁI LIÊN KẾT VỚI HÀM SÓNG LÀ HÀM CHẴN

21130243 - Phạm Hoàng Minh Quang, 21130270 - Huỳnh Anh Thư,  
21130271 - Nguyễn Đàm Minh Thư, 21130299 - Thạch Thị Huyền Trân,  
21130182 - Trần Đại Bảo Khanh

Ngày 21 tháng 10 năm 2024

## 1. Mô tả bài toán vật lý



Giếng thế vuông hữu hạn được mô tả bởi thế năng  $V(x)$  như sau:

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

Trong đó:

- $a$  là nửa chiều rộng của giếng thế.
- $V_0$  là độ sâu của giếng thế.

Hạt có năng lượng  $E$  nằm trong khoảng  $0 < E < V_0$ , tức là năng lượng của hạt nhỏ hơn độ sâu của giếng, điều này dẫn đến các trạng thái ràng buộc (hạt bị giới hạn trong giếng).

### Phương trình Schrödinger

Phương trình Schrödinger độc lập với thời gian cho bài toán này là:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

### Giải phương trình cho từng miền của $x$

**Ngoài giếng thế:**  $V(x) = 0$

Xét trường hợp  $x < -a$ : Phương trình Schrödinger trở thành:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} = -\kappa^2\psi(x)$$

Trong đó  $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ .

Nghiệm tổng quát:

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$$

Để đảm bảo hàm sóng  $\psi(x)$  không phân kỳ khi  $x \rightarrow -\infty$ , ta chọn  $A = 0$ , nên:

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

Xét trường hợp  $x > a$ : Phương trình Schrödinger trở thành:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} = -\kappa^2\psi(x)$$

Nghiệm tổng quát trong vùng này là:

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$$

Tương tự, để hàm sóng  $\psi(x)$  không phân kỳ khi  $x \rightarrow +\infty$ , ta chọn  $G = 0$ :

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

**Bên trong giếng thế:**  $-a < x < a$

Với  $V(x) = -V_0$ , phương trình Schrödinger trở thành:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x) \rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -l^2\psi(x)$$

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

Nghiệm tổng quát trong vùng này là:

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

## Điều kiện biên và tính chất hàm sóng chẵn

Trong bài toán, ta xét hàm sóng là hàm chẵn:  $\psi(x) = \psi(-x)$ , dẫn đến các hệ số  $C = 0$  vì  $\sin(kx)$  là hàm lẻ).

Như vậy, hàm sóng bên trong giếng sẽ có dạng:

$$\psi(x) = D \cos(lx)$$

Bên ngoài giếng, để hàm sóng tránh sự phân kỳ khi  $x \rightarrow \infty$ , ta chọn  $G = 0$ . Do đó, nghiệm bên ngoài giếng là:

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}$$

## Tính liên tục của hàm sóng

Xét tại biên  $x = a$ : Hàm sóng liên tục:

$$\text{Bên trong giếng thế: } -a < x < a : \quad \psi(a) = D \cos(la)$$

$$\text{Bên ngoài giếng thế: } x > a : \quad \psi(a) = F e^{-\kappa a}$$

$$\Rightarrow D \cos(la) = F e^{-\kappa a}$$

## Đạo hàm của hàm sóng liên tục

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

Hàm sóng là hàm chẵn có dạng:

$$\psi(x) = F e^{-\kappa x}, \quad x > a$$

$$\psi(x) = D \cos(lx), \quad 0 < x < a$$

$$\psi(x) = F e^{-\kappa x}, \quad x < 0$$

Sử dụng các phương trình:

$$F e^{-\kappa a} = D \cos(la)$$

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

Chia phương trình trên cho phương trình dưới:

$$\frac{-\kappa F e^{-\kappa a}}{F e^{-\kappa a}} = \frac{-lD \sin(la)}{D \cos(la)}$$

Từ đó ta có:

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

Đặt:

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

Từ phương trình  $\kappa = l \tan(la)$ , ta có:

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

Cuối cùng, ta có:

$$\Rightarrow \tan(z) = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$$

Việc tìm  $z$  và  $z_0$  giúp ta xác định trạng thái năng lượng và điều kiện biên của hàm sóng.

## 2. Tìm hệ số chuẩn hóa của hàm sóng

Sử dụng điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng. Đồng thời, hàm sóng đang xét là hàm chẵn nên ta được:

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

Mà ta có điều kiện biên - tính liên tục của  $\psi$  tại biên  $x = a$ :  $F e^{-\kappa a} = D \cos(la) \rightarrow F = D e^{\kappa a} \cos(la)$

$$1 = |D|^2 \left( a + \frac{\sin(2la)}{2l} + \frac{\cos^2(la)}{\kappa} \right).$$

mà ta có:  $\kappa = l \tan(la)$

$$\begin{aligned} 1 &= |D|^2 \left( a + \frac{2 \sin(la) \cos(la)}{2l} + \frac{\cos^3(la)}{l \sin(la)} \right) \\ &= |D|^2 \left( a + \frac{\cos(la)}{l \sin(la)} (\sin^2(la) + \cos^2(la)) \right) \\ &= |D|^2 \left( a + \frac{1}{l \tan(la)} \right) = |D|^2 \left( a + \frac{1}{\kappa} \right). \end{aligned}$$

Do đó,

$$\begin{aligned} |D|^2 \left( a + \frac{1}{\kappa} \right) &= 1, \\ |D| &= \frac{1}{\sqrt{a + \frac{1}{\kappa}}}, \quad F = \frac{e^{\kappa a} \cos(la)}{\sqrt{a + \frac{1}{\kappa}}}. \end{aligned}$$

## 3. CODE

### 3. Thuật toán

#### Step 1: Khởi tạo các hàm

Hàm  $f$ :

$$f(z, z_0) = \tan(z) - \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$

Hàm đạo hàm  $f'$ :

$$f'(z, z_0) = \frac{1}{\cos^2(z)} + \frac{z_0^2}{z^3 \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}}$$

## Step 2: Chia khoảng tìm nghiệm

**Input:**  $f, z_0, z_{\min}, z_{\max}, \Delta z$

**Output:** intervals # Các khoảng  $(b, c)$  chứa nghiệm.

## Step 3: Phương pháp Bisection

**Input:**  $f, z_0, b, c, N, \text{tol} = 1 \times 10^{-8}$

## Step 4: Phương pháp Newton-Raphson

**Input:**  $f, g, x_0, z_0, N, \epsilon$

## Step 5: Phương pháp Secant

**Input:**  $f, z_0, x_0, x_1, N, \epsilon$

## Step 6: Tính hàm sóng $\psi(x)$

**Input:**  $x, a, \kappa_{\text{values}}, l_{\text{values}}$  **Output:** all\_ $\psi$ , STOP

## Step 7: Vẽ đồ thị

**Đồ thị 1:** Vẽ  $\tan(z)$  và  $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$

**Đồ thị 2:** Vẽ các hàm sóng  $\psi(x)$  cho các giá trị khác nhau của  $\kappa$  và  $l$ .

## Step 8: Chạy chương trình chính main()

**Input các thông số:**

**Tính  $z_0$ :**

$$z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_{0\text{Joules}}}$$

**Tìm khoảng có nghiệm:**

$$\text{intervals} = \text{find\_intervals}(f, z_0, 10^{-10}, z_0, 10^{-5})$$

Tạo thông số để lưu kết quả của  $\kappa$ ,  $l$  và  $E$  vào cùng một file. Ghi các nghiệm tìm được vào các file:

- `result_Bisection.txt`: Lưu nghiệm từ phương pháp Bisection
- `result_NR.txt`: Lưu nghiệm từ phương pháp Newton-Raphson
- `result_Secant.txt`: Lưu nghiệm từ phương pháp Secant
- `kappa_l_E_data.txt`: Lưu giá trị  $(\kappa, l, E)$

Tính toán hàm sóng  $\psi(x)$ :

$$\text{all\_}\psi_{\text{values}} = \text{find\_all\_}\psi(x_{\text{values}}, a, \kappa, l)$$

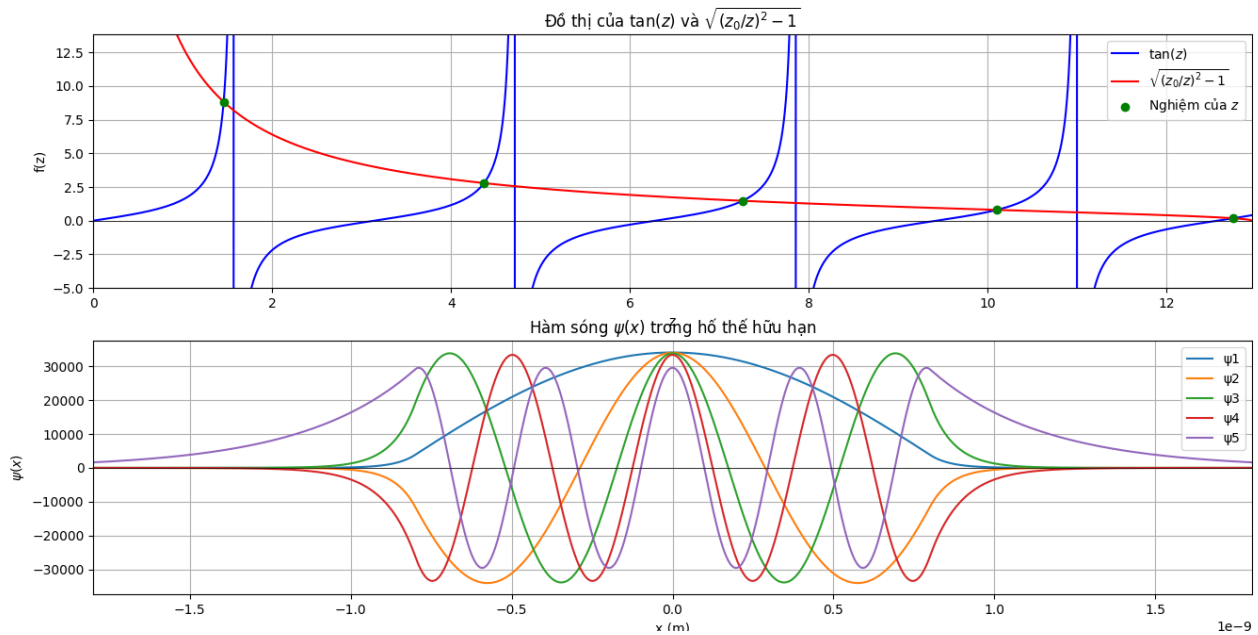
Gọi hàm vẽ đồ thị:

$$\text{plot\_graph}(z_0, z_{\text{values}}, \tan(z), \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}, f_{\text{max}}, x_{\text{values}}, \text{all\_}\psi_{\text{values}}, z, \kappa, l)$$

## Step 9: Kết thúc chương trình

## 4. Mô phỏng kết quả

Hình dưới là cho trường hợp giếng thế sâu rộng, với các giá trị đầu vào là:



Hình dưới là cho trường hợp giếng thế nông hẹp, với các giá trị đầu vào là:

