

Giếng thế vuông hữu hạn

1

Nhắc lại: 2 dạng phương trình vi phân phổ biến

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -\mathbf{k^2}\psi \quad \text{với } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (E > 0)$$

Nghiệm: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \mathbf{\kappa^2}\psi \quad \text{với } \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (E < 0)$$

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

2

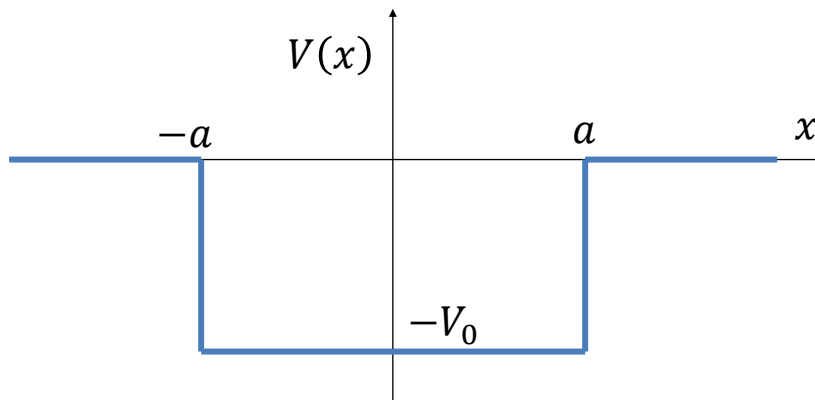
Các bước giải phương trình Schrödinger với thế delta hoặc hữu hạn

- Xét từng trường hợp: trạng thái liên kết ($E < 0$) và trạng thái tán xạ ($E > 0$)
- Trong mỗi trường hợp như thế, chia và xét từng miền khác nhau của x (dựa vào điều kiện của bài toán để xét)
- Mỗi miền của $x \rightarrow V(x) \rightarrow$ Pt. Schrödinger \rightarrow nghiệm trong mỗi miền
- Điều kiện liên tục tại biên của hàm sóng và đạo hàm của hàm sóng \rightarrow xác định các hệ số, năng lượng ...

3

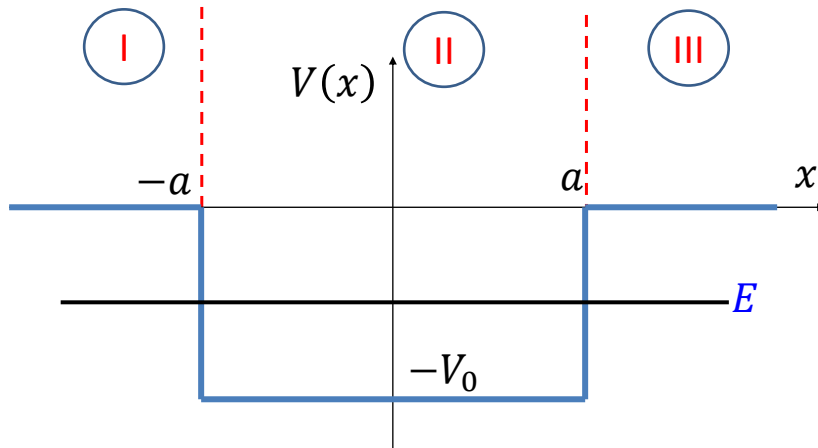
GIẾNG THẾ VUÔNG HỮU HẠN

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & -a \leq x \leq a, (V_0 > 0) \\ 0, & |x| > a \end{cases} \quad [2.145]$$



4

Xét trạng thái liên kết: $E < 0$ ($E > -V_0$)



Có 3 miền của x cần xét: I, II và III

5

Xét từng miền của x

I $x < -a \rightarrow V(x) = 0$

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

$$\text{với } \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad [2.146]$$

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

$$\Rightarrow \psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad (x < -a) \quad [2.147]$$

6

$$\textcircled{\text{II}} \quad -a < x < a \rightarrow V(x) = -V_0$$

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

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad [2.148]$$

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

[2.149]

7

$$\textcircled{\text{III}} \quad x > a \rightarrow V(x) = 0$$

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

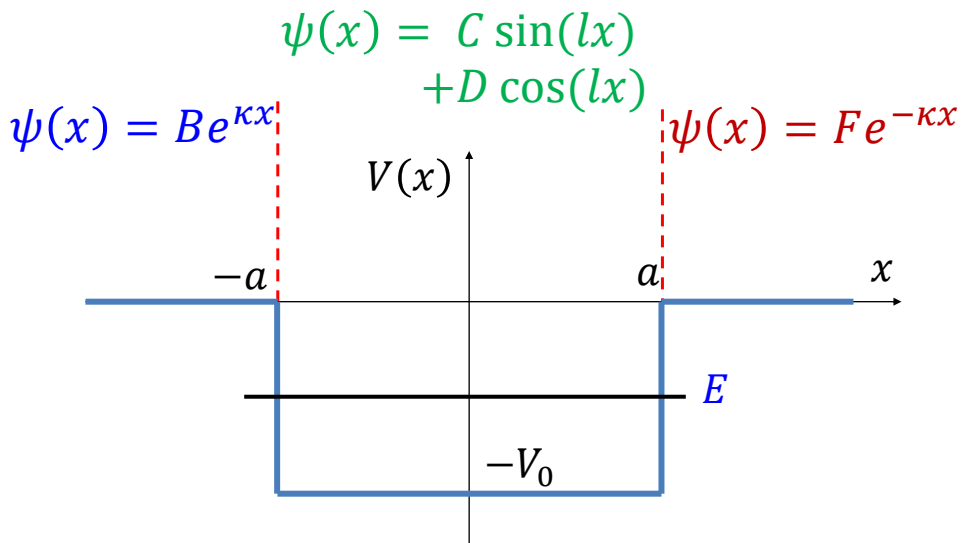
$$\text{với } \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

$$\text{Nghịm: } \psi(x) = F e^{-\kappa x} + G e^{\kappa x}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = F e^{-\kappa x}, (x > a) \quad [2.150]$$

8

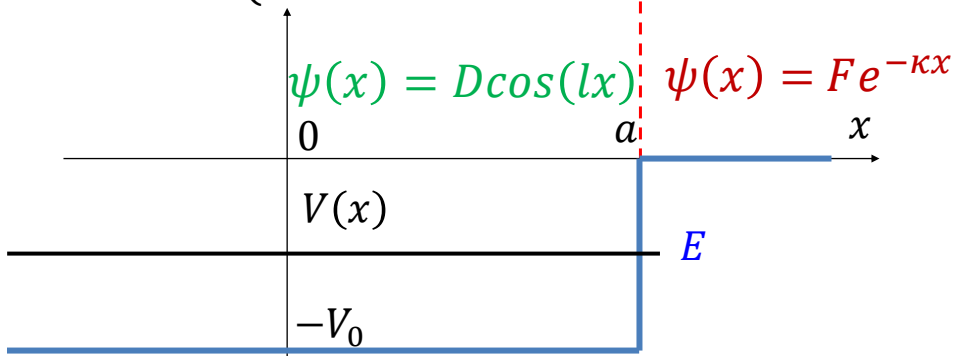
$$x < -a \quad -a < x < a \quad x > a$$



9

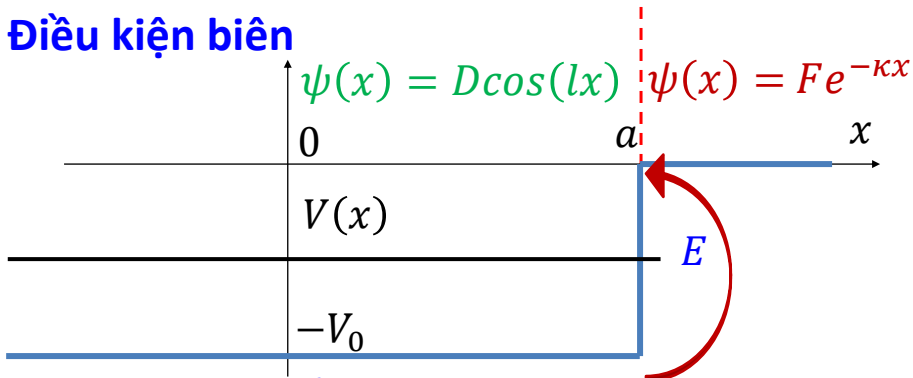
Thế năng là hàm chẵn nên hoàn toàn có thể chọn ψ có dạng chẵn hoặc lẻ (xem bài tập 2.1c). Ta chọn dạng chẵn như sau:

$$\psi(x) = \begin{cases} F e^{-\kappa x}, & x > a \\ D \cos(lx), & 0 < x < a \\ \psi(-x), & x < 0 \end{cases} \quad [2.151]$$



10

Điều kiện biên



Tính liên tục của ψ tại biên $x = a$ cho

$$F e^{-\kappa a} = D \cos(la) \quad [2.152]$$

Tính liên tục của $d\psi/dx$ tại $x = a$ cho

$$-\kappa F e^{-\kappa a} = -l D \sin(la) \quad [2.153]$$

11

$$F e^{-\kappa a} = D \cos(la) \quad [2.152]$$

$$-\kappa F e^{-\kappa a} = -l D \sin(la) \quad [2.153]$$

Chia [2.153] cho [2.152] cho:

$$\kappa = l \tan(la) \quad [2.154]$$

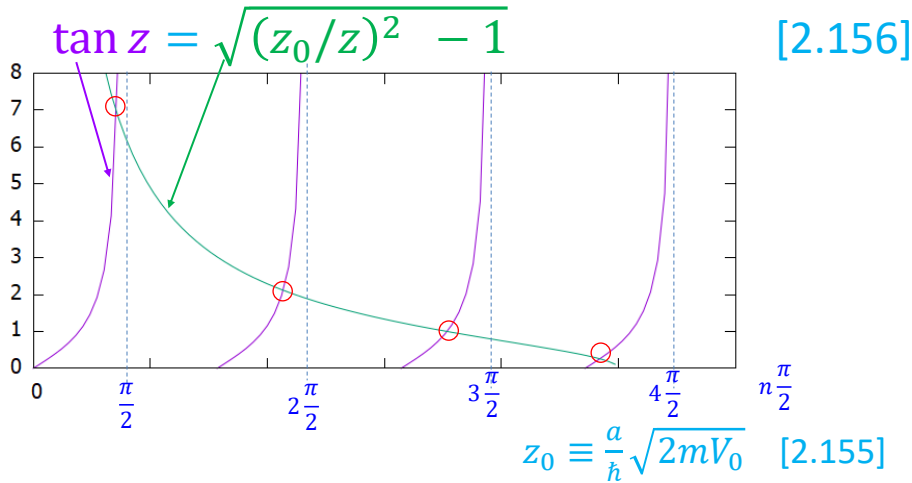
$$\text{đặt } z \equiv la, \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \quad [2.155]$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad l = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$$

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

$$\Rightarrow \tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1} \quad [2.156]$$

15

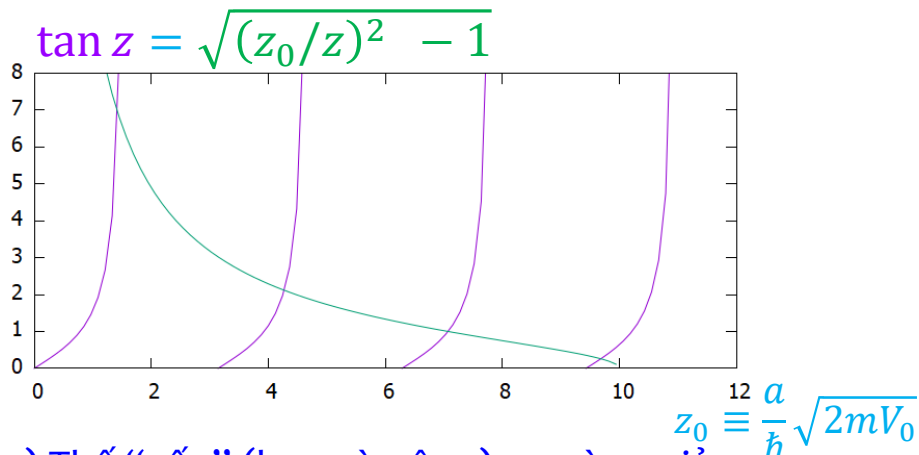


1) Thế rộng (a lớn) và sâu (V_0 lớn) $\rightarrow z_0$ rất lớn

$$z \cong \frac{n\pi}{2} \cong la = \frac{a\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow E_n + V_0 \cong \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \quad [2.157]$$

16

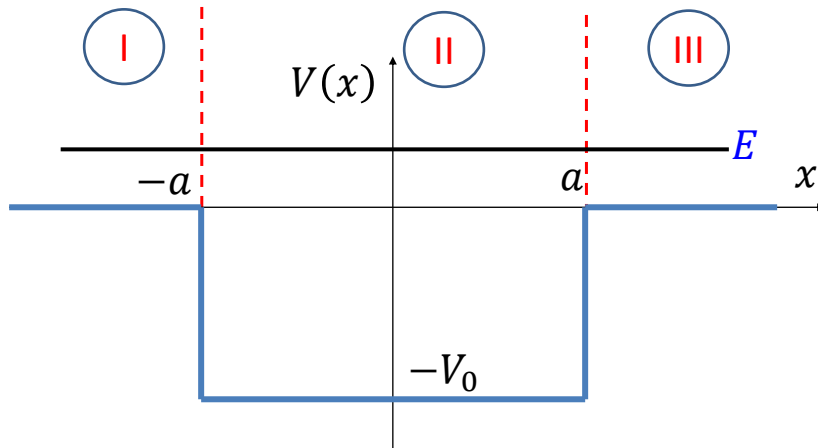


2) Thế “yếu” (hẹp và nông): z_0 càng giảm

\rightarrow số nghiệm z thỏa [2.156] càng giảm, cho đến khi $z < \pi/2$ thì chỉ còn 1 nghiệm duy nhất (đường tím và xanh lá luôn cắt nhau tại ít nhất 1 điểm) \rightarrow luôn có ít nhất 1 trạng thái liên kết dù thế rất “yếu”

17

Xét trạng thái tán xạ: $E > 0$



Cũng có 3 miền của x cần xét: I, II và III

19

Có các nghiệm:

I

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + B^{-ikx}, \quad x < -a \quad [2.158]$$

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [2.159]$$

II

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad -a < x < a \quad [2.160]$$

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \quad [2.161]$$

III

$$\psi(x) = Fe^{ikx}, \quad x > a \quad [2.162]$$

23

Điều kiện biên cho:

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(la) + D \cos(la) \quad [2.163]$$

$$ik[Ae^{-ika} - Be^{ika}] = l[C \cos(la) + D \sin(la)] \quad [2.164]$$

$$C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika} \quad [2.165]$$

$$l[C \cos(la) - D \sin(la)] = ikFe^{ika} \quad [2.166]$$

24

Các hệ số:

$$B = i \sin \frac{(2la)}{2kl} (l^2 - k^2) F \quad [2.167]$$

$$F = \frac{e^{-2ika} A}{\cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la)} \quad [2.168]$$

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)} \right) \quad [2.169]$$

Truyền qua hoàn toàn: $T=1$ (“trong suốt”) thì

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi \quad [2.170]$$

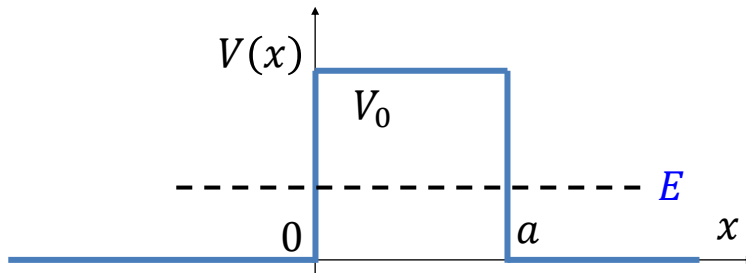
$$\rightarrow E_n + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} \quad [2.171]$$

Tương tự trường hợp hạt tự do: Cần xây dựng “bó sóng” để có thể chuẩn hóa ...

25

GIẾNG THỂ VUÔNG HỮU HẠN

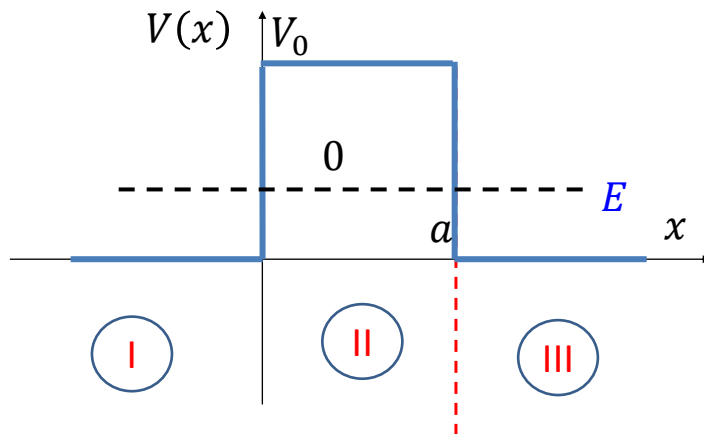
$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a, \quad (V_0 > 0) \\ 0, & x > a \text{ or } x < 0 \end{cases}$$



$$V(\pm\infty) \rightarrow 0 \Rightarrow \begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{trạng thái liên kết} \\ E > 0 \Rightarrow \text{trạng thái tán xạ} \end{cases}$$

Trạng thái tán xạ: $0 < E < V_0$

26



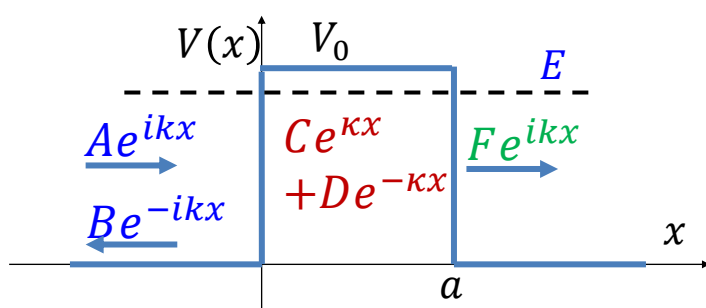
Có 3 miền của x cần xét: I, II và III

Bài tập: Hãy **giải PT Schroedinger** cho từng miền!

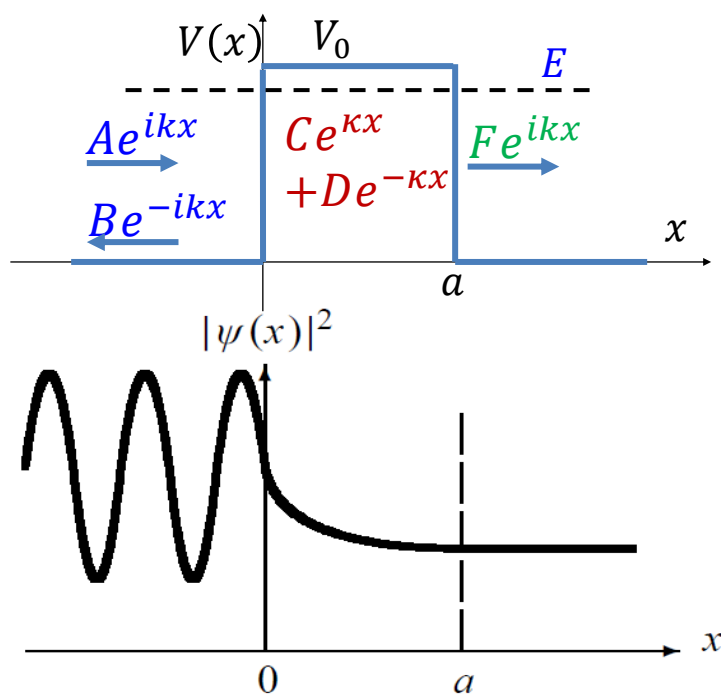
27

Nghiệm:

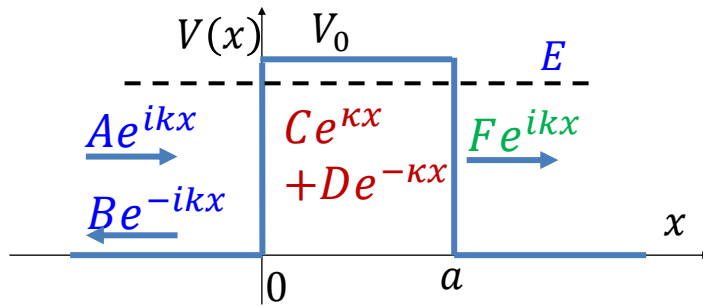
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ \textcolor{red}{C}e^{\textcolor{red}{\kappa}x} + \textcolor{red}{D}e^{-\textcolor{red}{\kappa}x}, & 0 \leq x \leq a \\ \textcolor{green}{F}e^{ikx} + \textcolor{green}{G}e^{-ikx}, & x > a \end{cases}$$



28



29



Hệ số truyền qua $T = |F|^2 / |A|^2$

Nếu hệ số truyền qua T lớn 0 thì có hàm sóng đi ra khỏi thế \rightarrow Hạt chui qua được rào thế \rightarrow hiệu ứng đường hầm (tunneling effect) !

30

[**Bài tập**] Chứng minh được

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{k \kappa} \right)^2 \sinh^2(\kappa a) \right]^{-1} > 0$$

$\sinh(x) = [e^x - e^{-x}]/2$

Tồn tại “tunneling effect” !

Hiệu ứng đường hầm đặc trưng thuần túy của QM. Trong cơ cổ điển không thể có hiệu ứng này.

31