

ການແກ້ສົມຜົນ Schrödinger ດ້ວຍວິທີຈຳນວນ ສຳລັບອະນຸພາກນອນໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດ

ບຸນແສງ ບຸນທອງ*

ພາກວິຊາ ຄູວິທະຍາສາດທຳມະຊາດ, ຄະນະສຶກສາສາດ ມະຫາວິທະຍາໄລສຸພານຸວົງ

* ຕິດຕໍ່ພົວພັນ: ບຸນແສງ ບຸນທອງ,
ພາກວິຊາ ຄູວິທະຍາສາດທຳມະຊາດ,
ຄະນະສຶກສາສາດ
ມະຫາວິທະຍາໄລ ສຸພານຸວົງ
ເບີໂທ: (+856) 20 298 228 60;
E-mail: bounsengbo@yahoo.fr

ຂໍ້ມູນບົດຄວາມ:

ການສົ່ງບົດຄວາມ: 09 ກັນຍາ 2021

ປັບປຸງສຳເລັດ: 27 ມັງກອນ 2022

ການຕອບຮັບ: 02 ມີນາ 2022

ບົດຄັດຫຍໍ້

ຈຳລອງແບບຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນຈຳກັດແມ່ນຫົວຂໍ້ໜຶ່ງທີ່ສຳຄັນໃນປຶ້ມກົນລະສາດກວານຕຳ. ໃຈຜົນອາດໄດ້ຈາກການແກ້ສົມຜົນ Schrödinger ສຳລັບອະນຸພາກທີ່ຖືກຈຳກັດໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດໃນ 1 ມິຕິເພື່ອອະທິບາຍພະລັງງານສຳພັນທີ່ນອນໃນຊຸມ. ບາງຄັ້ງບັນຫາຂອງຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນຈຳກັດກໍ່ຍັງບໍ່ທັນມີໃຈຜົນທີ່ແນ່ນອນເທື່ອທັງທີ່ມັນມີໃຈຜົນທີ່ຖືກຕ້ອງ.

ການຄົ້ນຄວ້າຄັ້ງນີ້ຂ້າພະເຈົ້າຈະໃຊ້ວິທີດ້ານຈຳນວນເພື່ອຊອກຫາໃຈຜົນທີ່ຖືກຕ້ອງຂອງບັນຫາອະນຸພາກທີ່ຈຳກັດໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດ. ເພື່ອໃຫ້ໄດ້ໃຈຜົນດັ່ງກ່າວ, ເຮົາຈະໃຊ້ Fortran code ເພື່ອຄິດໄລ່ພະລັງງານສະເພາະສຳລັບອະນຸພາກທີ່ຖືກຂັງໄວ້ໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກຈຳກັດໂດຍນຳໃຊ້ວິທີຂອງ Newton-Raphson. ຂ້າພະເຈົ້າໄດ້ສຶກສາພະລັງງານສະເພາະສຳລັບພະລັງງານໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມກວ້າງ 5 ຄ່າ ແລະ ຄວາມເລິກ 5 ຄ່າ. ຜົນການຄຳນວນໄດ້ສະແດງໃຫ້ເຫັນວ່າຊຸມມີຄວາມກວ້າງເພີ່ມຂຶ້ນ, ຈຳນວນພາວະສຳພັນກໍ່ເພີ່ມຂຶ້ນ ແລະ ກົງກັນຂ້າມກັນຊຸມຍິ່ງແຄບຈຳນວນຊັ້ນພະລັງງານກໍ່ໜ້ອຍ. ຜົນການສຶກສາຍັງສະແດງໃຫ້ເຫັນອີກວ່າຊຸມຍິ່ງເລິກພາວະສຳພັນກໍ່ຍິ່ງຫຼາຍ ແລະ ຊຸມຍິ່ງຕື້ນຈຳນວນຊັ້ນພະລັງງານສະເພາະກໍ່ຍິ່ງໜ້ອຍ.

ນອກຈາກນີ້ຍັງໄດ້ປຽບທຽບຄ່າພະລັງງານ ແລະ ການທະລຸຜ່ານກຳແພງໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກຈຳກັດ ແລະ ບໍ່ຈຳກັດ, ພະລັງງານຂອງຊັ້ນໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນບໍ່ຈຳກັດແມ່ນມີຄ່າສູງກ່ວາພະລັງງານຂອງຊັ້ນດຽວກັນໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດ. ຕຳລາຄື້ນໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດແມ່ນສາມາດທະລຸກຳແພງໄປໄດ້ໃນໄລຍະໃດໜຶ່ງ. ສຳລັບອະນຸພາກທີ່ຈຳກັດໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດ 2 ຫຼື 3 ມິຕິ, ເຮົາສາມາດຖອນໄດ້ຈາກຜົນການສຶກສາໃນ 1 ມິຕິ.

ຄຳສັບສຳຄັນ: ຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນຈຳກັດ, ວິທີການດ້ານຈຳນວນ, ເງື່ອນໄຂສຳພັນ, ພະລັງງານສຳພັນ, ສົມຜົນ Schrödinger

Solving Numerically Schrödinger Equation for Confined Particle in the Finite Potential Well

Bounseng BOUNTHONG*

Department of Natural Science Pedagogy, Faculty of Education, Souphanouvong University, Lao PDR

* Correspondence:

Bounseng BOUNTHONG,
Department of Natural Science
Pedagogy, Faculty of
Education,
Souphanouvong University
Mobile : +856 20 298 228 60
E-mail: bounsengbo@yahoo.fr

Abstract

The quantum model of finite potential well is a most subject in the book of quantum mechanics. The solutions maybe derive from one dimension Schrödinger's equation for describe a bound state energy of confined particle in the finite potential well. Sometime, the problem of confined particle in the finite potential well does not have an exact solution yet, but there are in fact exact solution.

In this work a numerical technique is adopted to find the exact solution for the quantum model of finite potential well. To achieve this numerical solution, I use Fortran code computer program by the Newton-Raphson method for calculating the Eigen state energy for a particle (electron) confined in the finite potential well. Five values of potential width and depth have studied, the results showed that large potential width and large potential depth led me to more bound states, while smaller potential width and depth led me to fewer bound states.

A comparison between infinite potential and finite potential has been presented. The results bound state energy and penetration. The results of comparison showed that the wave function of particle confined in the infinite potential cannot penetrate in the well, while the wave function of particle in the finite potential was penetrate in the well; the energy levels of an infinite well are much higher than that the corresponding energy levels for finite potential well. For confined particle in 2 or 3-dimension, we can reduce from result of 1-dimension.

Keyword: Finite Potential Well, Numerical Method, Boundary Condition, Eigenenergy, Schrödinger Equation

Article Info:

Submitted: Sep 09, 2021

Revised: Jan 27, 2022

Accepted: Mar 02, 2022

1. ພາກສະເໜີ

ກົນລະສາດກວານຕໍາເປັນເຄື່ອງມືທາງຄະນິດສາດທີ່ຈໍາເປັນໃນການອະທິບາຍລະບົບພິຊິກສາດໃນ 1 ມິຕິ (2 ຫຼື 3 ມິຕິ) ໂດຍສະເພາະແມ່ນໜວດວິຊາພິຊິກແຜນໃໝ່ (ພິຊິກສາດ ທີ່ມີຂະໜາດນ້ອຍໆ Microscopic) ບັນດາຄຸນລັກສະນະຂອງອະນຸພາກແມ່ນກໍານົດດ້ວຍຕໍາລາຄີ້ນ (Serway R.A., Modes C. J. and Moyer C. A., 2005), (Griffiths D. J. and Schroeter D. F., 2018) ບັນດາຕົວຢ່າງທີ່ໃຊ້ໄດ້ສະແດງໃຫ້ເຫັນເຖິງພາວະບໍ່ຕໍ່ເນື່ອງຂອງໃຈຜົນຂອງສົມຜົນ Schrödinger ໂດຍນໍາໃຊ້ເງື່ອນໄຂຂອງເຂດຈໍາກັດ. ແຕ່ວ່າຕໍາລາຂອງພະລັງງານໂປ

ຕັ້ງຊຽນທີ່ສະແດງເຖິງພາວະຂອງພະລັງງານສໍາພັນ (bound state) ຂອງອະນຸພາກແມ່ນມີບໍ່ຫຼາຍເຊັ່ນ ຂຸມພະລັງງານໂປຕັ້ງຊຽນເລິກບໍ່ສິ້ນສຸດແຕ່ບໍ່ສອດຄ່ອງປານໃດ. ພະລັງງານໂປຕັ້ງຊຽນທີ່ໃກ້ກັບຄວາມຈິງແມ່ນຂຸມພະລັງງານໂປຕັ້ງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກຈໍາກັດ (Finite Potential Well), ເຊິ່ງພະລັງງານເປັນຕາລາຕາມຄວາມເລິກຂອງຂຸມ ແລະ ສາມາດຊອກໄດ້ດ້ວຍວິທີຈໍານວນໂດຍການແກ້ສົມຜົນເຊິ່ງໃຈຜົນແມ່ນບໍ່ມີຮູບຮ່າງທີ່ແນ່ນອນ (transcendental equation) ເຊິ່ງສົມຜົນຮູບແບບນີ້ພົບເຫັນໃນຫຼາຍແຫຼ່ງຂໍ້ມູນເຊັ່ນ (de Alcantar B. and Griffiths D. J., 2006), (Al-Ani L. A and Abid R.

K., 2019), ການແກ້ດ້ວຍວິທີຂີດເສັ້ນສະແດງ (Wikibooks, 2020), (Razi Naqvi K. and Sigmund W., 2015), (Griffiths D. J. and Schroeter D. F., 2018) ຫຼື ອາດຈະແກ້ດ້ວຍວິທີການປະມານຄ່າອື່ນໆ (Sehra A. S., 2007), (Barsan V., 2012), (Bloch J. F. and Ignatovich V., 2001), (de Alcantar B. and Griffiths D. J., 2006). ຈຳລອງແບບຊຸມກວານຕຳແມ່ນມີຄວາມສຳຄັນສຳລັບຟີຊິກສາດແຜນໃໝ່ໂດຍສະເພາະແມ່ນໂຄງສ້າງຂອງວັດຖຸທາດເຄິ່ງຊັກນຳ ແລະ ນຳໃຊ້ແຜ່ຫຼາຍໃນໂຄງສ້າງນາໂນ (Harrison P. and Valavanis A., 2016).

ດັ່ງນັ້ນ, ຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນກວານຕຳທີ່ມີຄວາມເລິກຈຳກັດແມ່ນມີຄວາມສຳຄັນຫຼາຍ, ມັນເປັນພື້ນຖານໃນການເຂົ້າໃຈໂຄງສ້າງຂອງວັດຖຸທີ່ມີຂະໜາດນ້ອຍໆ (ໂມເລກູນຈົນຮອດນິວເຄຼຍ ຫຼື ແກ່ນອາຕອມ). ຈຸດປະສົງຂອງການສຶກສາຄັ້ງນີ້ແມ່ນນຳໃຊ້ວິທີດ້ານຈຳນວນເພື່ອຊອກຫາພະລັງງານສຳພັນ ແລະ ຕຳລາຄື້ນຂອງອະນຸພາກດ້ວຍການແກ້ສົມຜົນເຊິ່ງໃຈຜົນມີຮູບຮ່າງທີ່ບໍ່ແນ່ນອນ (transcendental equation) ໂດຍນຳໃຊ້ວິທີຂອງ Newton-Raphson ຫຼື ວິທີ Secant (William H. P. et al, 1997), (Hjorth-Jensen M., 2012) ໃນ 1 ມິຕິຈາກນັ້ນຈະສຶກສາໃນ 2 ແລະ 3 ມິຕິ.

2. ອຸປະກອນ ແລະ ວິທີການ

ການເລືອກພະລັງງານໂປຕັງຊຽນແມ່ນຈຳເປັນໃນການອະທິບາຍລະບົບ, ຖ້າໂປຕັງຊຽນຫາກງ່າຍດາຍມັນຈະສະດວກໃນການຊອກຫາໃຈຜົນວິເຄາະ ແລະ ສາມາດນຳໃຊ້ໃນການກວດສອບການຈ້ອມໃນການຄຳນວນ, ຖ້າໂປຕັງຊຽນຫາກບໍ່ສາມາດແກ້ດ້ວຍວິທີວິເຄາະບາງທີມັນອາດຈະເປັນການປະມານຄ່າທີ່ດີສຳລັບບັນຫາ ຫຼື ປະກົດການຈິງ (Al-Ani L. A and Abid R. K., 2019).

2.1 ກໍລະນີອະນຸພາກຈຳກັດໃນ 1 ມິຕິ

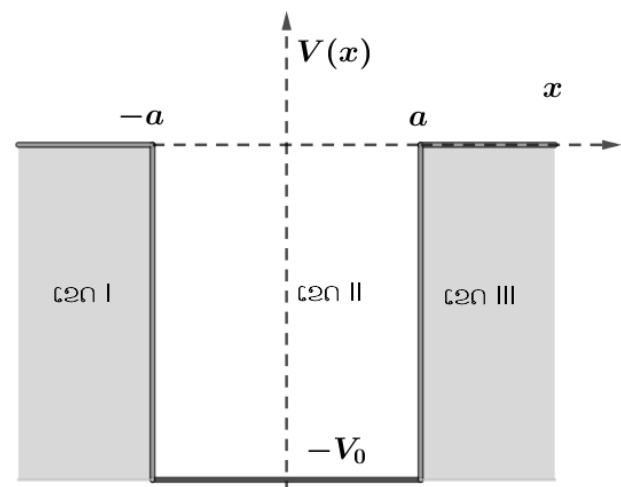
ພິຈາລະນາອະນຸພາກໜຶ່ງທີ່ມີມວນສານ m ແລະ ມີພະລັງງານກົນຈັກ E (ພະລັງງານລວມຂອງລະບົບ), ອະນຸພາກດັ່ງກ່າວນອນຢູ່ໃນແວດລ້ອມທີ່ກຳນົດດ້ວຍຕຳລາພະລັງງານໂປຕັງຊຽນເຄິ່ງຈຳກັດ $V(x)$ ເຊິ່ງຢູ່ດ້ານໃນຂອງຊຸມ (ລະຫວ່າງ $-a$ ຫາ a) ພະລັງງານໂປຕັງຊຽນແມ່ນເທົ່າ $-V_0$ ແຕ່ວ່າຢູ່ດ້ານນອກຂອງຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນແມ່ນ 0 ແລະ ຂຽນໄດ້ດັ່ງນີ້ (Griffiths D. J. and Schroeter D. F., 2018):

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

V_0 ແມ່ນຕົວຄົງຄ່າບວກຮູບທີ 1, ໂປຕັງຊຽນດັ່ງກ່າວເປັນໄດ້ທັງສອງກໍລະນີຄື ພາວະສຳພັນ (bound state) ກົງກັບພະລັງງານທີ່ເປັນຄ່າລົບ ແລະ ພາວະສະທ້ອນກະຈາຍ (scattering state) ພະລັງງານເປັນຄ່າບວກ. ໃນການສຶກສາຄັ້ງນີ້ຂ້າພະເຈົ້າຈະສຶກສາສະເພາະກໍລະນີພາວະສຳພັນເທົ່ານັ້ນ ($E < 0$). ສົມຜົນ Schrödinger (Wikibooks, 2020), (Al-Ani L. A and Abid R. K., 2019), (Griffiths D. J. and Schroeter D. F., 2018) ທີ່ບໍ່ຂຶ້ນກັບເວລາໃນ 1 ມິຕິແມ່ນ:

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

ເຊິ່ງ $\hbar$ ແມ່ນຕົວຄົງຄ່າຂອງ Planck¹, m ແມ່ນມວນສານຂອງອະນຸພາກ, ψ ແມ່ນຕຳລາຄື້ນຂອງອະນຸພາກ (ອາດຈະເປັນຈຳນວນສົນ). ຮູບທີ 1 ໄດ້ແບ່ງໜ້າພຽງອອກເປັນສາມເຂດ: ເຂດ I, ເຂດ II ແລະ ເຂດ III ເຊິ່ງແຕ່ລະເຂດມີພະລັງງານໂປຕັງຊຽນຕ່າງກັນ.



ຮູບພາບທີ 1: ຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກ $-V_0$ ແລະ ກວ້າງ $2a$ (ຫຼາຍຕຳລາໃຊ້ຄວາມເລິກຂອງຊຸມເປັນຄ່າບວກ)

ເຂດ I: ໃນເຂດດັ່ງກ່າວ $x < -a$ ພະລັງງານໂປຕັງຊຽນແມ່ນສູນ $V(x) = 0$, ສົມຜົນ Schrödinger ກາຍມາເປັນ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_I(x)}{dx^2} = E\psi_I(x) \quad \text{ຫຼື}$$

¹ $\hbar = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_I(x) = 0$$

ວາງໃຫ້ $k^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}$

ຫຼື $k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ (3)

k ແມ່ນຈຳນວນຈິງບວກ, ສົມຜົນກາຍມາເປັນ:

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} - k^2\psi_I(x) = 0$$

ສົມຜົນນີ້ແມ່ນສົມຜົນຈຸນລະຄະນິດຂັ້ນສອງເອກະພັນເຊິ່ງມີໃຈຜົນທົ່ວໄປແມ່ນ:

$$\psi_I(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

ສັງເກດເຫັນວ່າພຶດຕິສະນະຂອງ $\psi_I(x)$ ເພີ່ມຂຶ້ນຢ່າງໄວວາເມື່ອ $x \rightarrow -\infty$ ດັ່ງນັ້ນໃຈຜົນທີ່ມີຄວາມໝາຍແມ່ນ:

$$\psi_I(x) = Ae^{kx} \quad (4)$$

ເຂດ II: ໃນເຂດດັ່ງກ່າວ $-a < x < a$, ພະລັງງານໂປຕັ້ງຊຽນແມ່ນຄົງຄ່າ $V(x) = -V_0$, ສົມຜົນ Schrödinger ກາຍມາເປັນ:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + (E + V_0)\psi_{II}(x) = 0$$

ມີສອງກຸ່ມໃຈຜົນທີ່ເປັນໄປໄດ້, ຂຶ້ນກັບຄ່າຂອງ E ໃຫຍ່ກວ່າ ຫຼື ນ້ອຍກວ່າ 0. ກໍລະນີ $E > 0$ ອະນຸພາກຈະກາຍເປັນອະນຸພາກເສລີມັນຈະບ່ອນໃນຊຸມໂຕ້ຊຽນອີກໃນກໍລະນີນີ້ຈະບໍ່ໄດ້ສຶກສາ. ຂ້າພະເຈົ້າຈະສຶກສາກໍລະນີອະນຸພາກແມ່ນຢູ່ໃນພາວະສຳພັນ (bound state) ຫຼື ຈຳກັດໃນຊຸມໂປຕັ້ງຊຽນເທົ່ານັ້ນເຊິ່ງວ່າ $-V_0 < E < 0$, ວາງໃຫ້

$$\kappa^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \quad \text{ແລະ} \quad \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (5)$$

κ ຕ້ອງເປັນຈຳນວນບວກ ຫຼື ສູນ, ສົມຜົນ Schrödinger ກາຍມາເປັນ:

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \kappa^2\psi_{II}(x) = 0 \quad \text{ມີໃຈຜົນທົ່ວໄປແມ່ນ:}$$

$$\psi_{II}(x) = C \cos(\kappa x) + D \sin(\kappa x) \quad (6)$$

C, D ແມ່ນຕົວຄົງຄ່າທົ່ວໄປ

ເຂດ III: ໃນເຂດດັ່ງກ່າວ $x > a$, ພະລັງງານໂປຕັ້ງຊຽນແມ່ນສູນ, ຄ້າຍຄືກັນກັບກໍລະນີຂອງເຂດ I. ໃຈຜົນທົ່ວໄປຂອງສົມຜົນ Schrödinger ໃນເຂດດັ່ງກ່າວແມ່ນ:

$$\psi_{III}(x) = Fe^{kx} + Ge^{-kx} \quad (7)$$

ສັງເກດເຫັນວ່າພຶດຕິສະນະຂອງ $\psi_{III}(x)$ ແມ່ນເພີ່ມຂຶ້ນຢ່າງໄວວາເມື່ອ $x \rightarrow \infty$ ດັ່ງນັ້ນ, ໃຈຜົນທີ່ມີຄວາມໝາຍແມ່ນ: $\psi_{III}(x) = Ge^{-kx}$ (8)

ເພື່ອຊອກຫາໃຈຜົນສະເພາະ, ເຮົາຕ້ອງຊອກຫາບັນດາຕົວຄົງຄ່າ A, C, D ແລະ G ໂດຍນຳໃຊ້ເງື່ອນໄຂຕໍ່ເນື່ອງຂອງຕຳລາ ແລະ ຜົນຕຳລາຢູ່ສອງຂອບຂອງຊຸມ (ເງື່ອນໄຂສຳພັນ).

ຢູ່ເມັດ $x = -a$	ຢູ່ເມັດ $x = a$
$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a)$	$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$
$\psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a)$	$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$

ເນື່ອງຈາກໂປຕັ້ງຊຽນແມ່ນເຄິ່ງຄື, ຕຳລາຄື້ນກຳນົດດ້ວຍເຄື່ອງໝາຍບວກ ຫຼື ລົບ ເຊິ່ງກົງກັບຕຳລາຄູ່ ຫຼື ຄືກ

ຕຳລາຄູ່: ຕາມນິຍາມຕຳລາຄູ່ຕ້ອງຕອບສະໜອງເງື່ອນໄຂ $\psi(-x) = \psi(x)$ ຕຳລາໂກຊິນເປັນຕຳລາຄູ່, ດັ່ງນັ້ນ $D = 0$, ສົມຜົນ (6) ສາມາດຂຽນຄືນໄດ້ດັ່ງນີ້:

$$\psi_{II}(x) = C \cos(\kappa x) \quad (9)$$

ນຳໃຊ້ເງື່ອນໄຂຕໍ່ເນື່ອງຂອງຕຳລາຢູ່ເມັດ $x = -a$ ແລະ $x = a$ ເຮົາມີ:

$$Ae^{-ka} = C \cos(-\kappa a); \quad Ge^{-ka} = C \cos(\kappa a) \quad (10)$$

ເນື່ອງຈາກຕຳລາໂກຊິນເປັນຕຳລາຄູ່, ເບື້ອງຂວາຂອງສອງສົມຜົນແມ່ນເທົ່າກັນ. ດັ່ງນັ້ນ, ເບື້ອງຊ້າຍຕ້ອງເທົ່າກັນ, ເຮົາໄດ້ຕົວຄົງຄ່າ A, G ຕ້ອງເທົ່າກັນ, ຕຳລາຄື້ນໃນເຂດ I ແລະ ເຂດ III ຂຽນຄືນໄດ້:

$$\psi_I(x) = Ae^{kx}, \quad \psi_{III}(x) = Ae^{-kx}$$

ນຳໃຊ້ເງື່ອນໄຂຕໍ່ເນື່ອງຂອງຜົນຕຳລາຢູ່ເມັດ $x = -a$ ແລະ $x = a$ ເຮົາມີ:

$$kAe^{-ka} = -\kappa C \sin(-\kappa a); \quad -kGe^{-ka} = -\kappa C \sin(\kappa a) \quad (11)$$

ໂດຍນຳໃຊ້ສະເໝີຜົນ $A = G$, ເຮົາສາມາດຫານສົມຜົນໃດໜຶ່ງໃນເງື່ອນຕໍ່ເນື່ອງຂອງຜົນຕຳລາໃຫ້ກັບສົມຜົນໃດໜຶ່ງໃນເງື່ອນໄຂຕໍ່ເນື່ອງຂອງຕຳລາ. ຖ້າເຮົາເລືອກສົມຜົນທຳອິດໃນແຕ່ລະເງື່ອນເຮົາຈະໄດ້:

$$\frac{kAe^{-ka}}{Ae^{-ka}} = \frac{-\kappa C \sin(-\kappa a)}{C \cos(-\kappa a)} \Rightarrow k = \kappa \tan(\kappa a) \quad (12)$$

ເຊິ່ງວ່າ k ແລະ κ ກຳນົດໃນສົມຜົນ (3) ແລະ (5) ອັດຕາສ່ວນຂອງພວກມັນແມ່ນ:

$$\frac{k}{\kappa} = \sqrt{\frac{-E}{E + V_0}} \quad (13)$$

ຈະເຫັນໄດ້ວ່າ ມີພຽງພະລັງງານ E ທີ່ຍັງບໍ່ທັນຮູ້. ດັ່ງນັ້ນ, ໃຈຜົນທີ່ເປັນຕໍາລາຄາແມ່ນ:

$$\sqrt{\frac{-E}{E+V_0}} - \tan\left(\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} a\right) = 0 \quad (14)$$

ຕໍາລາຄາຄືກ: ຕາມນິຍາມ, ຕໍາລາຄາຄືກຕ້ອງຕອບສະໜອງເງື່ອນໄຂ $\psi(-x) = -\psi(x)$ ຕໍາລາຊິນເປັນຕໍາລາຄາຄືກ, ດັ່ງນັ້ນ, $C = 0$, ສົມຜົນ (6) ສາມາດຂຽນຄືນໄດ້ດັ່ງນີ້:

$$\psi_{II}(x) = D \sin(\kappa x) \quad (15)$$

ນໍາໃຊ້ເງື່ອນໄຂຕໍ່ເນື່ອງຂອງຕໍາລາຢູ່ເມັດ $x = -a$ ແລະ $x = a$ ເຮົາມີ:

$$Ae^{-\kappa a} = D \sin(-\kappa a); \quad Ge^{-\kappa a} = D \sin(\kappa a) \quad (16)$$

ເນື່ອງຈາກຕໍາລາຊິນເປັນຕໍາລາຄາຄືກ, ເຮົາຈະເຫັນໄດ້ວ່າ: $Ae^{-\kappa a} = -Ge^{-\kappa a} \Rightarrow A = -G$ (17)

ນໍາໃຊ້ເງື່ອນໄຂຕໍ່ເນື່ອງຂອງຜົນຕໍາລາຢູ່ເມັດ $x = -a$ ແລະ $x = a$ ເຮົາມີ:

$$-kGe^{-\kappa a} = \kappa D \cos(-\kappa a); \quad -kGe^{-\kappa a} = \kappa D \cos(\kappa a) \quad (18)$$

ເຮົາສາມາດຫານສົມຜົນໃດໜຶ່ງໃນເງື່ອນຕໍ່ເນື່ອງຂອງຜົນຕໍາລາໃຫ້ກັບສົມຜົນໃດໜຶ່ງໃນເງື່ອນໄຂຕໍ່ເນື່ອງຂອງຕໍາລາ. ຖ້າເຮົາເລືອກສົມຜົນທໍາອິດໃນແຕ່ລະເງື່ອນເຮົາຈະໄດ້:

$$\frac{-kGe^{-\kappa a}}{-Ge^{-\kappa a}} = \frac{\kappa D \cos(-\kappa a)}{D \sin(-\kappa a)} \Rightarrow k = -\kappa \cot(\kappa a) \quad (19)$$

ເນື່ອງຈາກຕໍາລາໂກຕັ້ງເປັນຕໍາລາຄາຄືກ ແລະ ອັດຕາສ່ວນ:

$$\frac{k}{\kappa} = \sqrt{\frac{-E}{E+V_0}}$$

ເຊັ່ນດຽວກັນກັບຂ້າງເທິງນີ້ມີພຽງພະລັງງານ E ເທົ່ານັ້ນທີ່ຍັງບໍ່ທັນຮູ້. ດັ່ງນັ້ນ, ໃຈຜົນທີ່ເປັນຕໍາລາຄາຄືກແມ່ນ:

$$\phi_I(i) = Ae^{ki}; \quad \phi_{II}(i) = C \cos(\kappa i); \quad \phi_{III}(i) = Ae^{-ki}; \quad \phi = X, Y, Z; i = x, y, z \quad (23)$$

ສໍາລັບຕໍາລາຄາຄືກແມ່ນ:

$$\phi_I(i) = -Ge^{ki}; \quad \phi_{II}(i) = D \sin(\kappa i); \quad \phi_{III}(i) = Ge^{-ki}; \quad \phi = X, Y, Z; i = x, y, z \quad (24)$$

3. ຜົນໄດ້ຮັບ

ຂ້າພະເຈົ້າໄດ້ນໍາໃຊ້ເຂົ້າໃນການຄຳນວນຊັ້ນພະລັງງານຂອງອີເລກຕອນທີ່ຖືກຈຳກັດໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກ $-V_0$. ການຊອກຫາພະລັງງານສະເພາະຂອງອະນຸພາກແມ່ນການແກ້ສົມຜົນໂດຍນໍາໃຊ້ວິທີດ້ານຈຳນວນ

$$\sqrt{\frac{-E}{E+V_0}} + \cot\left(\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} a\right) = 0 \quad (20)$$

ໃຈຜົນຂອງສົມຜົນ (14) ແລະ (20) ແມ່ນມີຮູບຮ່າງທີ່ບໍ່ແນ່ນອນ. ເຮົາສາມາດຊອກຫາໃຈຜົນຂອງມັນດ້ວຍວິທີດ້ານຈຳນວນ.

2.2 ກໍລະນີອະນຸພາກຈຳກັດໃນຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນຫຼາຍມິຕິ (2 ຫຼື 3 ມິຕິ)

ໃນກໍລະນີຫຼາຍມິຕິເຮົາໃຊ້ວິທີແຍກຕົວປ່ຽນ. ພິຈາລະນາຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນສາມມິຕິ (ເຊັ່ນດຽວກັນໃນສອງມິຕິ) $V(r)$ ເຊິ່ງກຳນົດດ້ວຍສົມຜົນດັ່ງນີ້:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & |x| \leq a, |y| \leq b, |z| \leq c \\ 0, & |x| > a, |y| > b, |z| > c \end{cases}$$

ສົມຜົນ Schrödinger ທີ່ບໍ່ຂຶ້ນກັບເວລາແມ່ນ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

ດ້ວຍວິທີແຍກຕົວປ່ຽນ, ຕໍາລາຄືນຂອງສົມຜົນດັ່ງກ່າວຂຽນໄດ້:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (21)$$

ແຕ່ລະຕໍາລາ $X(x), Y(y), Z(z)$ ມີຕົວປ່ຽນເອກະລາດຄື x, y, z ຕາມລຳດັບ. ເຮົາໄດ້ສາມັນຫາໃນໜຶ່ງມິຕິ, ການແກ້ແຕ່ລະບັນຫາແມ່ນຄ້າຍຄືກັນກັບຂໍ້ຜ່ານມາ, ສໍາລັບພະລັງງານຕາມແຕ່ລະແກນແມ່ນ $E_{n_x}, E_{n_y}, E_{n_z}$ ພະລັງງານແຕ່ລະຄ່າແມ່ນໄດ້ຈາກການແກ້ສົມຜົນທີ (14) ແລະ (20) ດ້ວຍວິທີຈຳນວນໂດຍແທນ E ດ້ວຍ $E_{n_x}, E_{n_y}, E_{n_z}$ ແລະ a ດ້ວຍ a, b, c ບັນດາເງື່ອນໄຂສໍາພັນແມ່ນຍັງຄືເກົ່າ. ໃນການຄຳນວນຂອງຂ້າພະເຈົ້າແມ່ນນໍາໃຊ້ $a = b = c$. ດັ່ງນັ້ນ, ພະລັງງານລວມແມ່ນ:

$$E_n = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} \quad (22)$$

ສາມາດຂຽນຕໍາລາຄືນໄດ້ດັ່ງນີ້, ສໍາລັບຕໍາລາຄຸ່:

ຈາກນັ້ນແກ້ສົມຜົນ (14) ແລະ (20) ສໍາລັບໃຈຜົນຄູ່ ແລະ ຄິດດ້ວຍການສະເໜີພະລັງງານເບື້ອງຕົ້ນສອງຄ່າ, ໂປຣແກຼມຈະຊອກຫາໃຈຜົນ $f(E)=0$ ໃນການຄຳນວນຄັ້ງນີ້ ຄວາມຊັດເຈນແມ່ນ 10^{-12} .

ຜົນການຄຳນວນຄ່າຂອງພະລັງງານສະເພາະສໍາລັບອີເລັກຕຣອນທີ່ນອນໃນຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກ $V_0 = -75 eV^2$ ແລະ ຄວາມກວ້າງຂອງຊຸມແມ່ນ $4 A^3$ ປຽບທຽບຜົນຈາກວິທີແຕ້ມເສັ້ນສະແດງຮູບທີ 2 ແລະ ຜົນການຄຳນວນໃນຄັ້ງນີ້ ໄດ້ສະແດງໃນຕາຕະລາງ 1

ຂ້າພະເຈົ້າຍັງໄດ້ສຶກສາກ່ຽວກັບຜົນທີ່ເກີດຈາກຄວາມເລິກຂອງຊຸມ ແລະ ຄວາມກວ້າງຂອງຊຸມເຊິ່ງຜົນການຄຳນວນໄດ້ສະແດງໃນຕາຕະລາງທີ 2 ແລະ 3

4. ວິພາກຜົນ

ຜົນການຄຳນວນຈາກຕາຕະລາງ 2 ແລະ 3 ສະແດງໃຫ້ເຫັນວ່າຄວາມເລິກຂອງຊຸມມີຄ່າໃຫຍ່ຈຳນວນຊັ້ນຂອງພະລັງງານແມ່ນມີຫຼາຍຂຶ້ນ, ເຊັ່ນດຽວກັນຖ້າຊຸມມີຄວາມກວ້າງຫຼາຍຈຳນວນຊັ້ນພະລັງງານກໍ່ຫຼາຍຂຶ້ນເຊັ່ນກັນ. ພະລັງງານຂອງຊັ້ນທີ່ n ສໍາລັບໂປຕັງຊຽນຈຳກັດແມ່ນມີຄ່ານ້ອຍກວ່າພະລັງງານໃນໂປຕັງຊຽນບໍ່ຈຳກັດ, ໝາຍຄວາມວ່າຢູ່ດ້ານໃນຂອງຊຸມພະລັງງານໂປຕັງຊຽນຈຳກັດເລກກວານຕໍາຂອງຊັ້ນແມ່ນມີຈຳນວນຈຳກັດເຊິ່ງສອດຄ່ອງກັບຜົນໄດ້ຮັບຈາກ (Al-Ani L. A and Abid R. K., 2019), (Wikibooks, 2020).

ຮູບທີ 3 ສະແດງໃຫ້ເຫັນວ່າ ຖ້າເອົາພະລັງງານທີ່ເປັນຄ່າລົບມາລົບອອກຄວາມເລິກຂອງຊຸມເຮົາຈະໄດ້ຄ່າທີ່ທຽບກັບພະລັງງານໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນບໍ່ຈຳກັດ, ຕໍາລາຄືນຂອງອະນຸພາກທີ່ຈຳກັດໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນບໍ່ຈຳກັດແມ່ນບໍ່ສາມາດທະລຸກຳແພງອອກໄດ້. ແຕ່ເຮົາຈະເຫັນໄດ້ວ່າຕໍາລາຄືນຂອງອະນຸພາກທີ່ຈຳກັດໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດແມ່ນສາມາດຜ່ານກຳແພງໄປໄດ້ໄລຍະໃດໜຶ່ງ. ໝາຍວ່າຄ່າກະຕວງທີ່ຈະພົບອະນຸພາກຢູ່ນອກກຳແພງໂປຕັງຊຽນແມ່ນຕ່າງສູນ, ນີ້ເປັນການສະແດງໃຫ້ເຫັນການຕີຄວາມໝາຍຟີຊິກລະຫວ່າງຟີຊິກພື້ນຖານ ແລະ ກົນລະສາດກວານຕໍາ. ຮູບທີ 4 ແມ່ນການສະແດງບາງຕໍາລາຄືນ ແລະ ການແຈກຢາຍຄ່າກະຕວງຂອງອະນຸພາກໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດສອງມິຕິ.

5. ສະຫຼຸບ

ການນຳໃຊ້ວິທີດ້ານຈຳນວນເພື່ອແກ້ສົມຜົນ Schrödinger ສໍາລັບໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກຈຳກັດແມ່ນໃຫ້ຜົນດີຫຼາຍ. ເມື່ອອະນຸພາກນອນຢູ່ໃນຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດ, ເຮົາຈະພົບຊັ້ນພະລັງງານທີ່ຕອບສະໜອງເງື່ອນໄຂສໍາພັນ (boundary condition) ພຽງແຕ່ບາງຄ່າເທົ່ານັ້ນ (ຄ່າບໍ່ຕໍ່ເນື່ອງ). ເຮົາສາມາດພົບພາວະສໍາພັນຫຼາຍຄ່າເມື່ອຄວາມກວ້າງຂອງຊຸມມີຄ່າໃຫຍ່ ແລະ ປື້ນກັບ, ຖ້າຫາກວ່າຊຸມໂປຕັງຊຽນມີຄວາມກວ້າງນ້ອຍຈຳນວນພາວະສໍາພັນເຮົາກໍ່ຈະພົບໜ້ອຍຄ່າ. ເຮົາອາດຈະພົບພາວະສໍາພັນຫຼາຍພາວະຖ້າຫາກວ່າຊຸມມີຄວາມເລິກທີ່ເປັນຄ່າໃຫຍ່ ແລະ ປື້ນກັບ. ພະລັງງານຊັ້ນທີ່ n ມີຄ່ານ້ອຍກວ່າພະລັງງານໃນໂປຕັງຊຽນທີ່ມີຄວາມເລິກບໍ່ສິ້ນສຸດ. ໝາຍວ່າຢູ່ດ້ານໃນຂອງຊຸມໂປຕັງຊຽນຈຳກັດ, ເລກກວານຕໍາຂອງພາວະແມ່ນມີຈຳນວນຈຳກັດ.

6. ຂໍ້ຂັດແຍ່ງ

ຂ້າພະເຈົ້າໃນນາມຜູ້ຄົ້ນຄວ້າວິທະຍາສາດ ຂໍປະຕິຍານຕົນວ່າ ຂໍ້ມູນທັງໝົດທີ່ມີໃນບົດຄວາມວິຊາການດັ່ງກ່າວນີ້ ແມ່ນບໍ່ມີຂໍ້ຂັດແຍ່ງທາງຜົນປະໂຫຍດກັບພາກສ່ວນໃດ ແລະ ບໍ່ໄດ້ເອື້ອປະໂຫຍດໃຫ້ກັບພາກສ່ວນໃດພາກສ່ວນໜຶ່ງ, ກໍລະນີມີການລະເມີດ ໃນຮູບການໃດໜຶ່ງ ຂ້າພະເຈົ້າມີຄວາມຍິນດີ ທີ່ຈະຮັບຜິດຊອບແຕ່ພຽງຜູ້ດຽວ.

7. ເອກະສານອ້າງອີງ

- Al-Ani L. A and Abid R. K. (2019). Solving Schrödinger Equation for Finite Potential Well Using the Iterative Method. *Al-Nahrain Journal of Science* 22 (4), 52-58. doi:10.22401/ANJS.22.4.07
- Barsan V. (2012). A New Analytic Approximation for the Energy Eigenvalue of a Finite Square Well. *Romanian Reports in Physics* (64), 685-694.
- Bloch J. F. and Ignatovich V. (2001). A new approach to bound states in potential wells. *American Journal of Physics* (69), 1177. doi:10.1119/1.1387043
- de ALcantar B. and Griffiths D. J. (2006). Exact and approximate energy spectrum for the finite square well and related potentials. *American Journal of Physics* (74), 43. doi:10.1119/1.2140771

² $1 eV = 1.602 \times 10^{-19} J$

³ $1 A^{\circ} = 10^{-10} m$

Griffiths D. J. and Schroeter D. F. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics (3)*. Cambridge: Cambridge University Press.

Harrison P. and Valavanis A. (2016). *Quantum Wells, Wires and Dots. Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures (4)*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd.

Hjorth-Jensen M. (2012). *Computational Physics, Lecture Notes Fall 2012*. Oslo: University of Oslo.

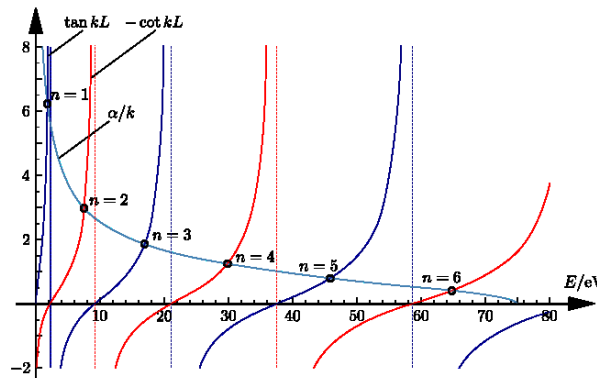
Razi Naqvi K. and Sigmund W. (2015). The finite square well: whatever is worth teaching at all is worth teaching well. *arXiv*, 1-13. doi:arXiv:1505.03376 [physics.ed-ph]

Sehra A. S. (2007). Finite Element Analysis of the Schrodinger Equation. *arXiv*, 1. doi:arXiv:0704.3240v1 [hep-lat] 17 Apr 2007

Serway R.A., Modes C. J. and Moyer C. A. (2005). *Modern Physics (3)*. Australia: Brooks/Cole.

Wikibooks. (2020, 4 27). *Wikibooks*. ເອົາມາ Materials in Electronics/Confined Particles/1D Finite Wells: https://en.wikibooks.org/wiki/Materials_in_Electronics/Confined_Particles/1D_Finite_Wells

William H. P. et al. (1997). *Numerical Recipes in Fortran 77, The Art of Scientific Computing (2)*. Cambridge: Cambridge University Press .



ຮູບພາບທີ 2: ໃຈຜົນຈາກວິທີແຕ້ມເສັ້ນສະແດງສໍາລັບພະລັງງານສໍາພັນ ທີ່ກາພາວະຂອງອີເລັກຕຣອນທີ່ມີຄວາມກ້ວາງຂອງຊຸມ $4 \text{ \AA}$ ແລະ ຊຸມເລິກ 75 eV ຈາກ (Wikibooks, 2020)

ຕາຕະລາງທີ 1. ຜົນການຄຳນວນພະລັງງານສະເພາະໄດ້ຈາກວິທີແຕ້ມເສັ້ນສະແດງຖັນ (a) ແລະ ວິທີດ້ານຈຳນວນຖັນ (b), ສໍາລັບຊຸມໂປຕັງຊຽນເລິກ -75 eV ແລະ ຊຸມກວ້າງ $4 \text{ \AA}$

n	ໃຈຜົນ	ພະລັງງານສະເພາະ $E(\text{eV})$ (a)	ພະລັງງານສະເພາະ $E(\text{eV})$ (b)
1	ຄູ່	-73.1	-73.100415
2	ຄືກ	-67.4	-67.422227
3	ຄູ່	-58.1	-58.034219
4	ຄືກ	-45.1	-45.081879
5	ຄູ່	-28.9	-28.877291
6	ຄືກ	-10.4	-10.311338

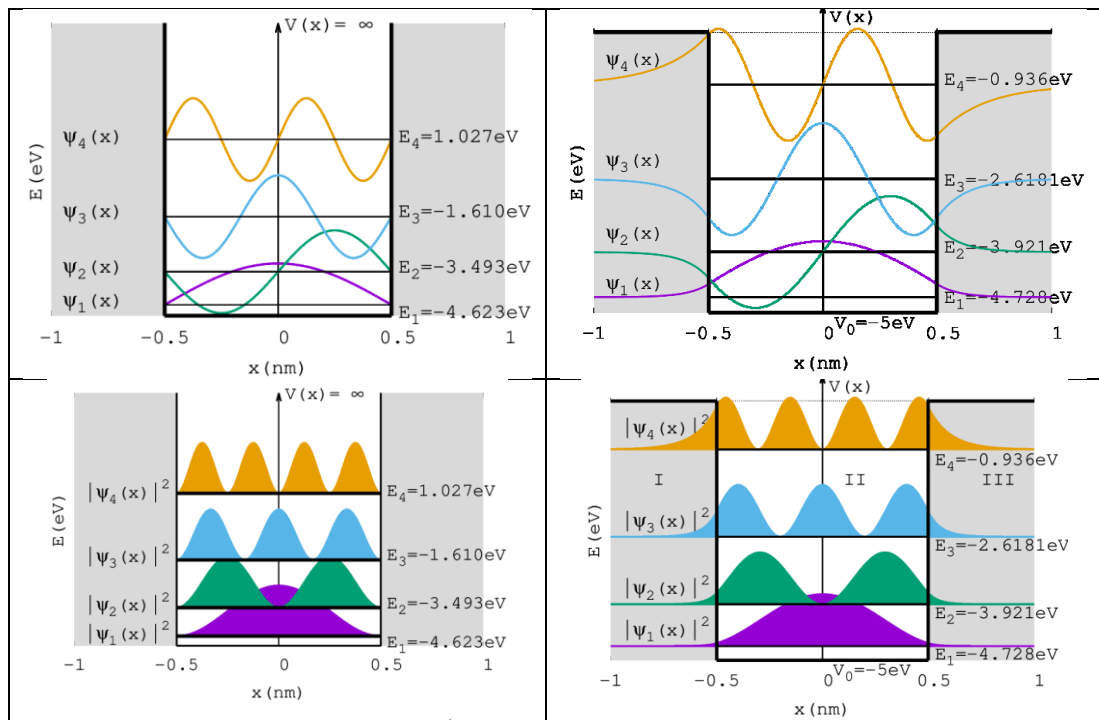
ຕາຕະລາງທີ 2. ຄ່າພະລັງງານສໍາລັບຄວາມກວ້າງຂອງຊຸມຄົງຄ່າ ແລະ ຄວາມເລິກຂອງຊຸມປ່ຽນແປງ

ຊຸມກວ້າງ ($\text{\AA}$)	ຊຸມເລິກ (eV)	ຈຳນວນພາວະ	ຄ່າພະລັງງານ (eV)
4	-10	2	-8.641323 -4.794731

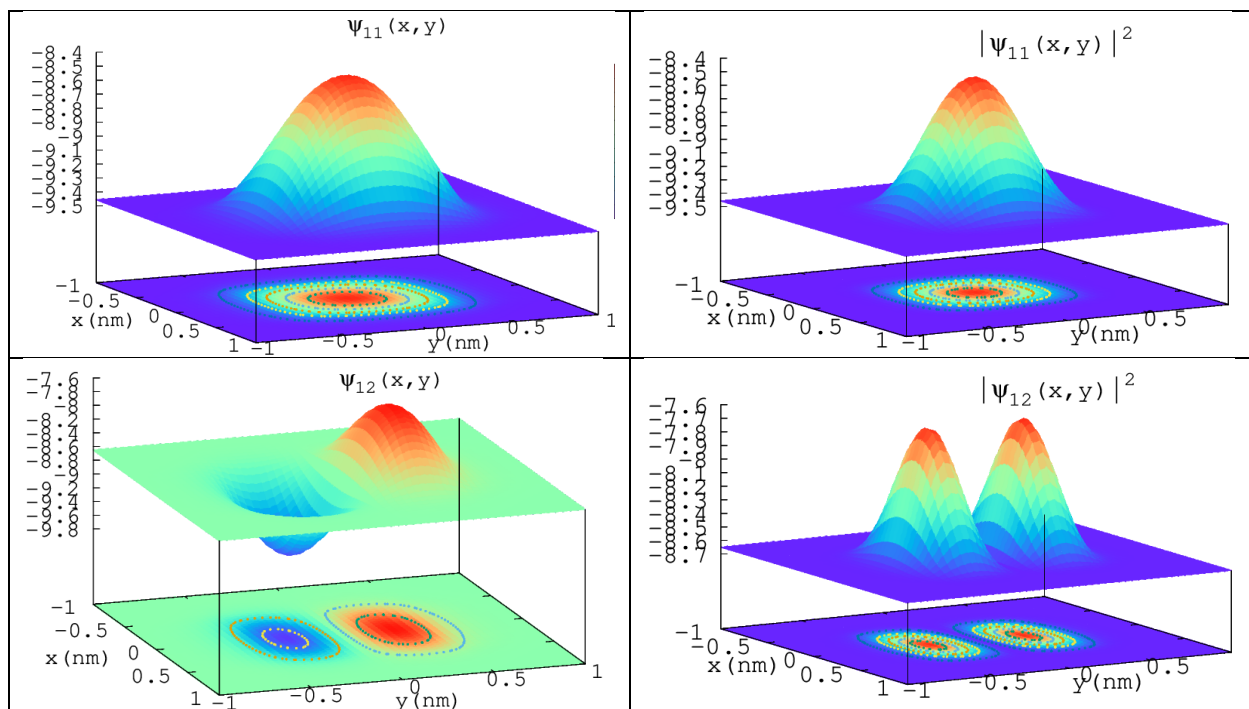
	-15	3	-13.509004 -9.182064 -2.74576
	-20	3	-18.421858 -13.792262 -6.568696
	-25	4	-23.358413 -18.514221 -10.794079 -1.515254
	-50	5	-48.185229 -42.775389 -33.891551 -21.824084 -7.434891

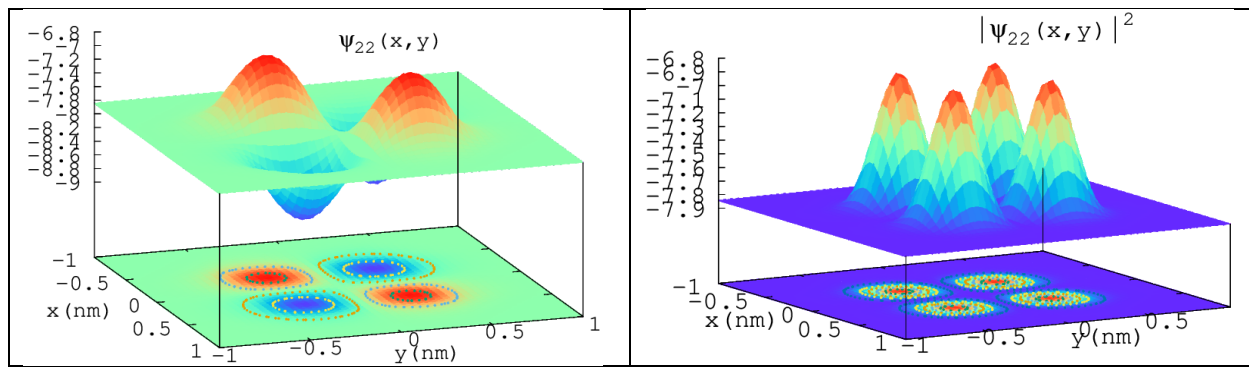
ຕາຕະລາງທີ 3. ຄ່າພະລັງງານສະເພາະສໍາລັບຄວາມເລິກຂອງຊຸມຄົງຄ່າ ແລະ ຄວາມກວ້າງຂອງຊຸມປ່ຽນແປງ.

ຊຸມເລິກ (eV)	ຊຸມກວ້າງ (A°)	ຈຳນວນພາວະ	ຄ່າພະລັງງານ (eV)
-25	2	2	-20.225161 -7.412834
	4	4	-23.358413 -18.514221 -10.794079 -1.515254
	6	5	-24.181942 -21.740974 -17.722731 -12.23204 -5.543473
	8	7	-24.511801 -23.05074 -20.628349 -17.267608 -13.012121 -7.954317 -2.378038
	10	9	-24.67604 -23.70541 -22.092077 -19.843464 -16.972106 -13.499351 -9.464889 -4.959843 -0.401733



ຮູບພາບທີ 3: ປຽບທຽບຊັ້ນພະລັງງານ, ຕຳລາຄື້ນ ແລະ ການແຈກຢາຍຄ່າກະຕວງຂອງອະນຸພາກຖືກຈຳກັດໃນຂຸມໂປຕັງຊຽນ ບໍ່ຈຳກັດ (ເບື້ອງຊ້າຍ) ແລະ ຈຳກັດ (ເບື້ອງຂວາ) ຈະເຫັນໄດ້ວ່າຕຳລາຄື້ນຂອງອະນຸພາກໃນຂຸມໂປຕັງຊຽນ ຈຳກັດສາມາດທະລຸກຳແພງໄປໄດ້ ແລະ ຄ່າກະຕວງທີ່ຈະພົບອະນຸພາກນອກກຳແພງແມ່ນຕ່າງສູນ ເຊິ່ງ ກົງກັນຂ້າມກັບກໍລະນີຂຸມໂປຕັງຊຽນບໍ່ຈຳກັດອະນຸພາກບໍ່ສາມາດທະລຸກຳແພງໄປໄດ້





ຮູບພາບທີ 4: ບາງຕຳລາຄື້ນ (ໄດ້ຈາກສົມຜົນ (23) ແລະ (24)) ແລະ ການແຈກຢາຍຄ່າກະຕວງຂອງອະນຸພາກຖືກຈຳກັດໃນ ຊຸມໄປຕັ້ງຊຽນຈຳກັດສອງມິຕິ, ຕຳລາຄື້ນສາມາດທະລຸກຳແພງໄປຕັ້ງຊຽນໄປໄດ້ໄລຍະໃດໜຶ່ງ ແລະ ໂອກາດທີ່ຈະ ພົບອະນຸພາກແຕ່ລະຈຸດແມ່ນບໍ່ຄືກັນ.