一维有限深方势阱能量本征方程的数值解与近似解析解

杨梓骞,苗 青,樊转转,陈 鹏,吕 铭,金光日
(浙江理工大学 物理学系,浙江 杭州 310018)

摘要:一维有限深方势阱的束缚态本征值问题无法精确求解.数值计算能量满足的超越方程,可以给出能谱和能量本征波函数. 本文基于超越方程的泰勒级数展开,给出了一级近似下能谱及其波函数的解析解,发现束缚态个数由一个无量纲参数 R 确定,该参数正比于势阱宽度乘以势阱高度开方. 除了最高能级波函数,能谱及其波函数的近似解析解与数值结果吻合. 大 R 极限下,发现近似解析解退化为可精确求解的无限深势阱情况.

关键词:一维有限深方势阱;束缚态;超越方程;能谱;能量本征波函数
中图分类号:O 413.1 文献标识码:A 文章编号:1000-0712(2018)12-0049-04
【DOI】10.16854/j.cnki.1000-0712.180255

在特定边界条件下,求解能量本征值问题是量子力学的重要内容. 一维无限深方势阱中的能量本征值方程可以严格求解,能谱满足如下关系:

$$E_n^{(\infty)}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2,\quad (n=1,2,3,\cdots) \tag{1}$$

式中,上标∞ 标记无限深势阱情况,$\hbar=h/(2\pi)$ 为普朗克常量,m 为粒子的质量,a 为阱宽. 从式(1)可清楚看出,无限深势阱中运动的微观粒子能量是离散的,并随量子数 n 的平方增大.

有限深方势阱的能量本征方程无法精确求解,这是因为粒子能量遵从一个超越方程. 目前,诸多量子力学教材仅限于图解法求解超越方程[1,2],并未给出能谱及本征能量波函数. 1991 年,Barker 等人[3]利用一阶泰勒级数展开,给出了能量本征值的近似解析解,但并未精确预言有限深方势阱中束缚态个数. 2016 年,王再军[4]用一维谐振子能量本征波函数为基函数,求解了有限深势阱中粒子的能级及其本征波函数,但该方法复杂,略显"大材小用"(原作者评).

瞄准上述问题,本文首先数值求解能量满足的超越方程,给出一维有限深方势阱的能谱及其波函数.然后基于超越方程的泰勒级数展开,给出了一级近似下能谱及其波函数. 与 Barker 等人[3]不同,我们的解析结果自然给出势阱内束缚态个数,它依赖于一个无量纲参数 $R\propto a\sqrt{V_0}$,其中 a 为阱宽,V_0 为势阱高度. 除了最高能级波函数,近似解析的能谱及其波函数与数值结果吻合. 最后考虑大 R 极限,发现近似解析解退化为可精确求解的无限深势阱情况,这对课堂教学及学生理解物理具有很大帮助.

1 能量本征方程

下面我们具体考虑有限深势阱问题,能量本征方程为

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

其中势阱由分段函数描述:

$$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<a/2\\ V_0, & |x|\geqslant a/2\end{cases} \tag{2}$$

全文只讨论束缚态情况,即粒子的能量 E 满足 $0<E<V_0$.

在阱外,外势为 V_0,因此能量本征方程以简化为 $\psi''-\beta^2\psi=0$,式中引入参数:

$$\beta=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}>0 \tag{3}$$

在阱内,$V(x)=0$,能量本征方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=\psi''+k^2\psi=0$$

式中引入参量

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}>0 \tag{4}$$

具体考虑束缚态边界条件(即,$|x|\to\infty$ 时,$\psi\to0$),求解能量本征方程[1,2],得到波函数:

收稿日期:2017-05-16;修回日期:2017-06-05
基金项目:国家自然科学基金(91636108)资助
作者简介:杨梓骞(1998—),男,浙江台州人,浙江理工大学物理学系 2016 本科生.
通信作者:金光日,E-mail: grjin@zstu.edu.cn

大学物理
http://dxwl.bnu.edu.cn

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{-\beta x}, & x\geqslant a/2\\ \tilde{A}\cos(kx)+\tilde{B}\sin(kx), & |x|<a/2\\ Be^{\beta x}, & x\leqslant -a/2\end{cases} \quad (5)$$

由于势阱具有空间反射不变性,阱内波函数具有确定的宇称:1) 偶宇称,$\psi(x)=\tilde{A}\cos(kx)$,及 2) 奇宇称 $\psi(x)=\tilde{B}\sin(kx)$. 下面分别讨论奇、偶宇称情况的能谱和波函数.

1.1 偶宇称解

偶宇称情况,阱内、外波函数及其一阶导数在 $x=\pm a/2$ 处连续,因此得到

$$A=B=\tilde{A}e^{\eta}\cos(\xi) \quad (6)$$

$$\eta=\xi\tan(\xi),\ \xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\left(\frac{a}{2}\right)^2\equiv R^2 \quad (7)$$

式中,为了便于计算,已引进无量纲参数:

$$\xi=ka/2,\quad \eta=\beta a/2 \quad (8)$$

以及无量纲半径 $R(\propto a\sqrt{V_0})$,由式(7)的第二个等式定义. 以电子为例,质量 $m=9.1\times10^{-31}$ kg,取势阱高度 $V_0=20$ eV,阱宽 $a=0.5$ nm,则 $R\approx57$.

注意到,式(7)的第一个结果一个关于本征能量 E 的超越方程,只能数值求解. 如图1所示,我们采用 Mathematica 计算软件得到一系列实根(ξ_n,η_n),$n=1,2,3,\cdots$为自然数. 由此确定本征能谱

$$E_n=\frac{\hbar^2k_n^{\ 2}}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\xi_n}{a}\right)^2 \quad (9)$$

进一步,利用波函数的归一化条件,得到

$$\tilde{A}=\left(\frac{\cos^2(ka/2)}{\beta}+\frac{a+\sin(ka)/k}{2}\right)^{-1/2} \quad (10)$$

其中,k 和 β 由数值计算结果(ξ_n,η_n)确定. 一旦 $\tilde{A}$ 的值确定,自然得到系数 A 和 B,以及偶宇称情况下阱内、外能量本征波函数.

1.2 奇宇称解

对于奇宇称情况,由波函数及其一阶导数连续性,可得

$$\eta=-\xi\cot(\xi),\quad \xi^2+\eta^2=R^2 \quad (11)$$

$$A=-B=\tilde{B}e^{\eta}\sin(\xi) \quad (12)$$

再由波函数的归一化条件,得到

$$\tilde{B}=\left(\frac{\sin^2(ka/2)}{\beta}+\frac{a-\sin(ka)/k}{2}\right)^{-1/2} \quad (13)$$

2 能谱和波函数的数值解

图1中,取无量纲半径 $R=10$,数值求解超越方程(7)和(11),得到7个实根(ξ_n,η_n),如图1所示. 可以发现偶宇称解(实心圆)和奇宇称解(叉)交替出现,解的个数有限,当 $R<\pi/2$ 时,只有一个偶宇称解,当 $\pi/2<R<\pi$,有两个解(奇、偶宇称各一个),而当 $3\pi<R<7\pi/2$ 时,有7个根. 暗示超越方程根的总数目 $N\approx2R/\pi$.

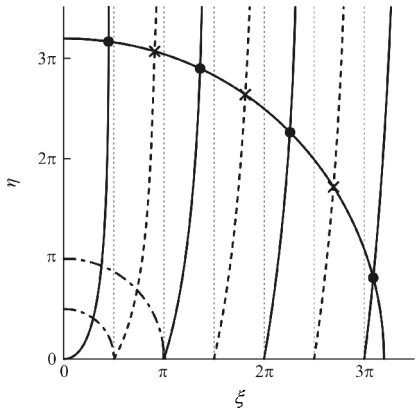

图1 超越方程(7)和(11)的数值求解. 实线:偶宇称情况,折线:奇宇称情况,二者与粗实线($\xi^2+\eta^2=R^2$)的交点确定一系列实根(ξ_n,η_n),$n=1,2,\cdots,N$,其中奇数 n 对应于偶宇称的根(实心圆),偶数 n 对应于奇宇称(×). 参数:$R=10$.

给定 R,可得到超越方程的根(ξ_n,η_n),$n=1,2,\cdots,N$,下一步计算能谱和波函数. 首先,由式(7)中 R 的定义,及式(9)可得

$$\frac{\hbar^2}{2m}=\frac{V_0}{R^2}\left(\frac{a}{2}\right)^2,\quad E_n=\left(\frac{\xi_n}{R}\right)^2V_0 \quad (14)$$

可见能谱以势阱高度 V_0 为单位. 为了计算简单,全文中取 $a=V_0=1$.

如图2所示,E_n 近似和 n^2 成正比,这一点可从能谱的 log-log 图更清楚地看出. 但是,对于每个量子数 n,E_n 总是低于无限深势阱的能级高度 $E_n^{(\infty)}$. 此外,有限深方势阱的能级总数是有限的,这是因为束缚态能级 $E_n<E_n^{(\infty)}<V_0$.

图3给出有限深方势阱的能量本征波函数. 对于每一个给定的量子数 n,我们将数值解$(k_n,\beta_n)=(2\xi_n/a,2\eta_n/a)$代入式(10)和式(13)中,从而确定波函数的系数,以及能量本征波函数 $\psi_n(x)$. 从数值结果(实心圆)发现:1) $\psi_n(x)$ 具有确定的宇称,$\psi_n(-x)=(-1)^{n-1}\psi_n(x)$,与无限深势阱的能量本征波函数 $\psi_n^{(\infty)}(x)$ 类似;2) 量子数 n 越大,$\psi_n(x)$ 在阱内振荡越快;3) 与无限深势阱情况显著不同,在阱外 $\psi_n(x)\neq0$,即粒子有一定的概率出现在经典禁区(即$|x|>a/2$).

http://dxwl.bnu.edu.cn

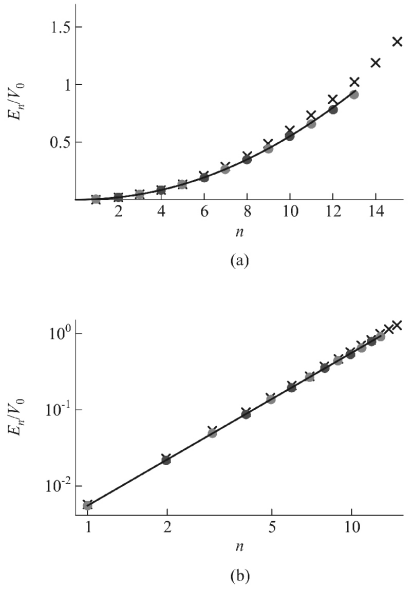

图 2　有限深势阱的能级 E_n 随量子数 n 的变化（实心圆），以及与无限深势阱能谱（叉）比较，实线为近似解析解，式（20）．（b）为能谱的 log-log 图．参数：$a=V_0=1$，$R=20$．

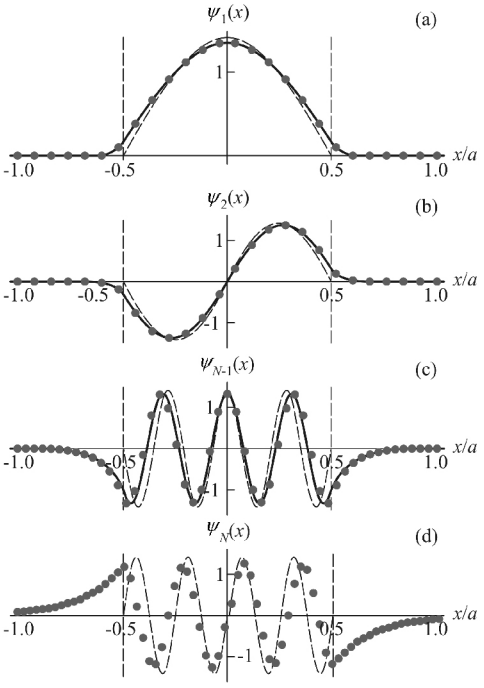

图 3　有限深势阱的能量本征波函数随坐标 x 的变化（实心圆），从上至下，量子数取为（a）$n=1$；（b）$n=2$；（c）$n=N-1$；（d）$n=N$．实线：近似解析波函数，折线：无限深势阱的波函数（见式（23））．参数：$a=V_0=1$，$R=11.5$．除了最高能级（$n=N=8$），近似解析波函数与数值解吻合．

3　能谱及波函数的近似解析解

为了挖掘更多物理内容，下面讨论有限深势阱的近似解析能谱及其波函数．与 Barker 等人[3] 的结果不同，我们的解析结果自然给出束缚态个数 N．

3.1　能谱的近似解

从图 1 可见 $\xi_n \sim n\pi/2$，暗示 $\xi=n\pi/2-\tilde{\xi}$，其中 $\tilde{\xi}$ 为一个相对于 R 的小量．首先考虑偶宇称，即 n 取奇数，将式（7）的第一个等式的右边级数展开，只保留到 $\sim O(\tilde{\xi}^0)$，得

$$\eta=\left(\frac{n\pi}{2}-\tilde{\xi}\right)\cot(\tilde{\xi})\approx\frac{n\pi}{2}\frac{1}{\xi}-1 \tag{15}$$

再代入式（7）的第二个表达式中，得

$$R^2=\xi^2+\eta^2\approx\left(\frac{n\pi}{2}\right)^2+\left(\frac{n\pi}{2}\right)^2\frac{1}{\tilde{\xi}^2}-n\pi\frac{1}{\xi}+1 \tag{16}$$

该近似结果，同样只保留到 $\sim O(\tilde{\xi}^0)$．因此得到一个关于 $\tilde{\xi}$ 的一元二次方程，两根取其一，得

$$\tilde{\xi}_n\approx\frac{\pi\left(2n-\sqrt{4R^2n^2-n^4\pi^2}\right)}{4+n^2\pi^2-4R^2}\approx\frac{n\pi/2}{1+R} \tag{17}$$

式（17）的第一个结果存在实根的条件为 $4R^2n^2-n^4\pi^2>0$，即 $n<2R/\pi$．由此自然得到有限深势阱中束缚态个数：

$$N=\mathrm{Ceiling}\left(\frac{2R}{\pi}\right) \tag{18}$$

式中 Ceiling（x）表示大于或等于 x 的最小整数．注意到无论 R 的取值是多少，必定存在一个偶宇称解（即基态），因此 $N\geqslant 1$．

注意到，在式（17）的第一个解中消掉分母 $n^2\pi^2$、分子 $n^4\pi^2$，又可以得到第二个解（即，简化的 $\tilde{\xi}$）．由此进一步得到

$$\xi_n=\frac{n\pi}{2}-\tilde{\xi}\approx\frac{n\pi}{2}\frac{R}{1+R} \tag{19}$$

以及能谱的近似结果：

$$E_n\approx\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\frac{R}{1+R}\right)^2=E_n^\infty\left(\frac{R}{1+R}\right)^2 \tag{20}$$

与 Barker 等人[3] 的结果一致．

上述近似结果对奇宇称情况也成立．图 2 中实线给出的结果正是 E_n 的近似结果，与数值解吻合，且自然截断到 E_N．在大 R 极限下，即

$$R\equiv\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\left(\frac{a}{2}\right)\to\infty \tag{21}$$

近似解析解 $E_n\to E_n^\infty$，$N\to\infty$，所以能谱自然回归到

http://dxwl.bnu.edu.cn

无限深方势阱情况.

3.2 波函数的近似解

波函数的近似解析解由式(19)可知. 将 ξ_n 的近似解代入式(7),得到 $\eta_n=\sqrt{R^2-\xi_n^2}$,以及参数 $(k_n,\beta_n)=(2\xi_n/a,2\eta_n/a)$.再由式(6)和式(10),得到波函数的系数 A、B 和 $\tilde{A}$,以及偶宇称波函数的近似解. 类似地,可求出奇宇称情况的近似解析波函数. 如图3中实线所示,除了 $\psi_N(x)$,近似解析波函数与数值解(实心圆)吻合.

大 R 极限下,前面的分析已知有限深势阱内粒子能谱:

$$E_n\to E_n^{(\infty)}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \tag{22}$$

表明 $k_n\to n\pi/a$,即 $\sin(k_na)=0$. 另一方面,考虑阱宽 a 固定,阱高 $V_0\to\infty$,则 $\beta_n\to\infty$(见式(3)). 因此,式(10)和(13)给出 $\tilde{A}=\tilde{B}=\sqrt{2/a}$,阱内波函数自然回归到可精确求解的无限深势阱情形:

$$\psi_n^{(\infty)}=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\cos\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right), & n=1,3,\cdots\\ \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right), & n=2,4,\cdots\end{cases} \tag{23}$$

此外,还可以证明大 R 极限下,阱外 $\psi_n(x)\to 0$.

4 总结及讨论

本文给出有限深对称方势阱能量本征方程的数值和近似解析解. 将能量 E 满足的超越方程泰勒级数展开,发现一级近似下可以确定束缚态个数 N,它由无量纲参数 $R(\propto a\sqrt{V_0})$ 唯一确定. 此外,大 R 极限下,粒子的能谱和波函数自然退化到无限深方势阱情况. 近似解析和数值解有助于学生直观地理解: 1) 有限深方势阱的能谱近似与量子数 n 平方成正比、且能级个数有限; 2) 与无限深势阱情况不同,粒子有一定的概率出现在阱外经典禁区.

注意到一级近似下,能谱与波函数和解析解与数值结果吻合. 但需要特别指出,对于某些特殊的 R 值,最高能级的近似解析波函数 $\psi_N(x)$ 无法计算,例如 $R=11.5$,如图3(d)所示. 这些 R 值处,束缚态个数 N 准确、依然由式(18)给出,但式(19)给出的近似参量 $\xi_N>R$,与实际情况相悖. 为了克服这一问题,需要给出高阶近似的能量本征波函数,这将为后续研究一维势阱中粒子的动力学问题[5]、相空间的波函数表示[6]提供便利.

参考文献:

[1] 曾谨言. 量子力学教程[M]. 3版. 北京: 科学出版社,2014: 33-35.

[2] David J Griffiths. Introduction to Quantum Mechanics[M]. Beijing: China Machine Press,2006: 78-80.

[3] Barker B I,Rayborn G H,Ioup J W,et al. Approximating the finite square well with an infinite well: Energies and Eigenfunctions[J]. Am J Phys,1991,59: 1039-1041.

[4] 王再军. 用基函数展开法求解一维有限深方势阱模型[J]. 大学物理,2016,35(08): 39-43.

[5] Venugopalan A, Agarwal G S. Superrevivals in the quantum dynamics of a particle confined in a finite square-well potential[J]. Phys Rev A 1999,59: 1415-1421

[6] 张涵,刘志伟,任政学,等. 基于实稳定方法求解单粒子共振态的 Wigner 函数[J]. 大学物理,2018,37(01): 17-24.

Numerical and approximate analytical solutions of the eigen-value equation for the one-dimensional finite square well

YANG Zi-qian, MIAO qing, FAN Zhuan-zhuan, CHEN Peng, LV ming, JIN Guang-ri

(Department of Physics, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou, Zhejiang 310018, China)

Abstract: The bound states of one-dimensional finite square well cannot be solved exactly. Numerically, the energy spectrum and its wave function can be obtained from a transcendental equation. In this paper, we solve the transcendental equation with the Taylor series expansion, which to the first order gives analytical solutions of the energy spectrum and its wave function. We find that the number of bound states is determined by a dimensionless parameter R, which is proportional to the width of the well multiplied by the square of the potential height. Except the highest level wave function, the approximate analytical results show in well agreement with the numerical results. In the limit of large R, the approximate analytical results recover the exactly solvable problem of an infinite square well.

Key words: one-dimensional finite symmetric square well; the bound state; transcendental equation; energy spectrum; energy eigenwave function

大学物理

http://dxwl.bnu.edu.cn