第七章　粒子在位置空间中的运动 Ⅱ

一维阶梯势, 势垒, 势阱 (Cohen 书第一章的内容)

对于方势阱, 方势垒, 阶梯势这类抽象出来的势能, 在空间不同区域内, 势能为常数. 对于方势阱, 方势垒, 阶梯势这类抽象出来的势能, 在空间的不同区间内, 势能为常数. 在这些区间求解 Schrödinger 方程并不困难, 但是还需要将这些区间内的波函数进行 "组装".

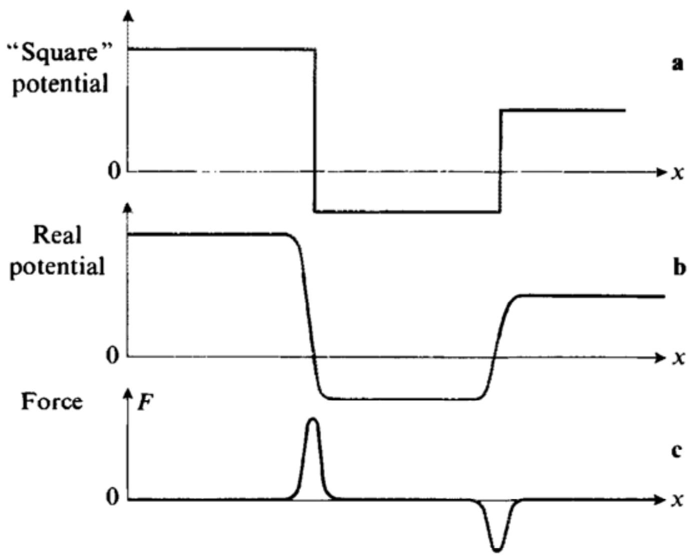

图 1

粒子在上述一类势场中运动, 设粒子的能量值为 E, 或者说哈密顿量的本征值为 E. 我们并不能事先知道 E 的值, 而是需要求解哈密顿量的本征方程.

$$H\left|\varphi\right\rangle = E\left|\varphi\right\rangle$$

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V(X)\right]\left|\varphi\right\rangle = E\left|\varphi\right\rangle$$

在位置表象中, 有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{1}$$

逐段地、分区间地求解方程 (1).

在势能保持为常数的某个区间内, 无非有三种情况: $E > V$, $E < V$ 和 $E = V$.

- <u>$E > V$</u>　令

  $$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$$

  可以得到方程 (1) 的解

  $$\varphi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

  这是平面波的叠加.

- <u>$E < V$</u>　令

  $$\rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)}$$

  可以得到

  $$\varphi(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}$$

  这时指数增函数和指数减函数的叠加.

- <u>$E = V$</u>　这时, $\varphi(x)$ 是 x 的线性函数.

阶梯势

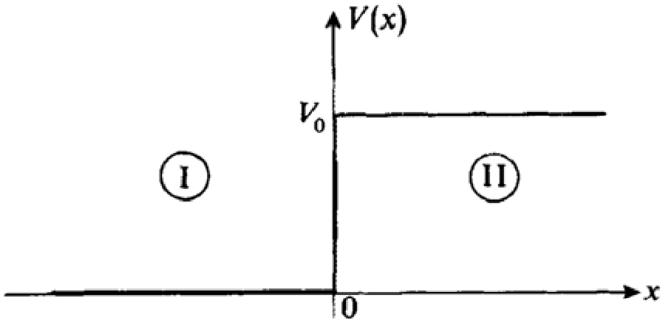

图 2

第一种情形, $E > V_0$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = k_1$$

$$\sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = k_2$$

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = A_1e^{ik_1x} + A_1'e^{-ik_1x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = A_2e^{ik_2x} + A_2'e^{-ik_2x}$$

考虑在 $x = 0$ 处波函数连续, 波函数的一阶导数连续, 有

$$\begin{cases} A_1 + A_1' = A_2 + A_2' \\ ik_1A_1 - ik_1A_1' = ik_2A_2 - ik_2A_2' \end{cases}$$

仅有两个方程, 无法确定四个未知数. 于是考虑稍微实际的情况: 粒子 (以平面波的形式) 从左侧入射, 而右侧没有向左行进的平面波. 故令 $A_2'=0$. 有如下比例关系

$$\frac{A_1'}{A_1}=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2},\quad \frac{A_2}{A_1}=\frac{2k_1}{k_1+k_2}$$

在 $x<0$ 的左侧区域, 波函数是入射和反射的叠加. 在 $x>0$ 的右侧区域, 仅有透射波函数. 反射几率 R 和透射几率 T 分别是

$$R=\left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2,\quad T=\frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2$$

具体表达式是

$$R=1-\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2},\quad T=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

显然, $R+T=1$.

第二种情形, $E<V_0$　　相比于第一种情形, 右侧的波函数有变化.

$$\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}=\rho_2$$

$$\varphi_{\text{II}}(x)=B_2e^{\rho_2x}+B_2'e^{-\rho_2x}$$

不允许在 $x\to\infty$ 时波函数发散, 于是 $B_2=0$. 进而得到

$$\frac{A_1'}{A_1}=\frac{k_1-i\rho_2}{k_1+i\rho_2}\quad \frac{B_2'}{A_1}=\frac{2k_1}{k_1+i\rho_2}$$

反射几率

$$R=\left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2=1$$

粒子完全反射, 反射量子态有相位的变化, 因为 A'/A 是复数. 粒子在 $x>0$ 的区域有非零的几率, 呈指数衰减, 表明粒子有一定的透射深度.

势垒

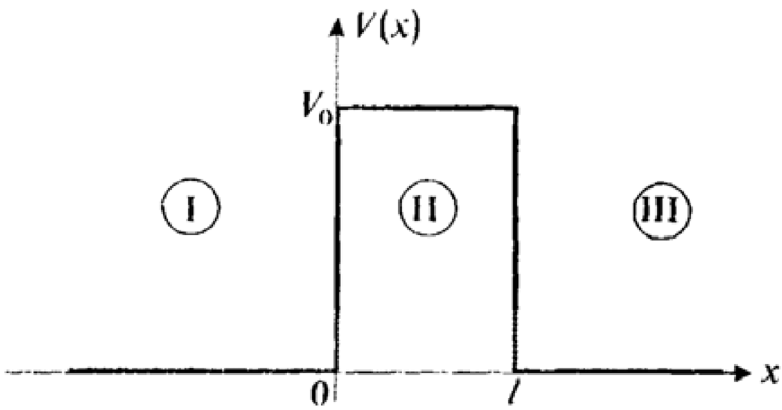

图 3

第一种情形, $E > V_0$　分区间写出波函数.

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{III}}(x) = A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x}$$

与阶梯势的情形类似, 可以令 $A_3' = 0$. 考虑 $x = 0$ 和 $x = l$ 处波函数及其导数的连续性, 给出

$$A_1 = \left[\cos k_2 l - i\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\ \sin k_2 l\right] e^{ik_1 l} A_3$$

$$A_1' = i\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1 k_2}\ e^{ik_1 l} \sin k_2 l\ \ A_3$$

由此得到反射几率和透射几率,

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2)^2 \sin^2 k_2 l}$$

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}$$

显然有

$$R + T = 1$$

透射系统的具体形式

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2\ \sin^2 \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} l}$$

透射系数随势垒的宽度 l 周期性地变化, 最大值可以达到 1, 此时

$$k_2 l = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} l = n\pi, \quad n \text{ 为整数}$$

这种情况被称为共振散射. 如下图所示.

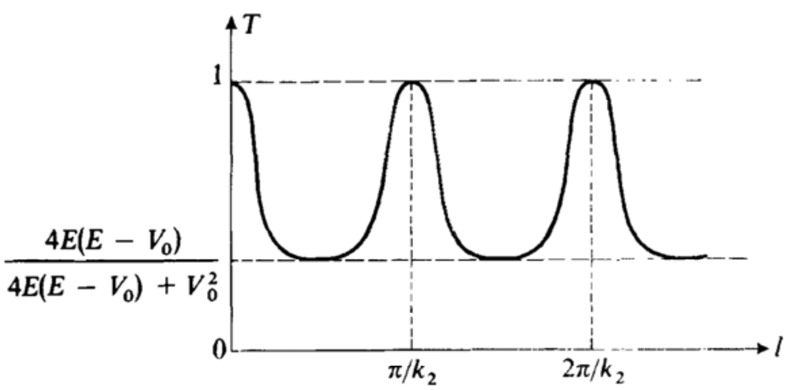

图 4

第二种情形, $E < V_0$ 在第 I 区和第 III 区的波函数的形式没有改变, 而第 II 区的波函数不再是振荡形式.

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{III}}(x) = A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x}$$

相对于将 k_2 替换为 $-i\rho_2$. 得到透射几率,

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \ \sinh^2 \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} l}$$

这就是隧道效应.

有限深势阱

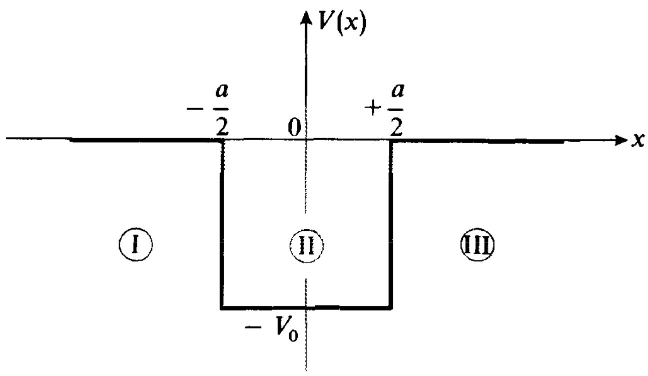

图 5

考虑 $-V_0 < E < 0$ 情形.

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_{\mathrm{I}} = B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}} = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx}$$

$$\varphi_{\mathrm{III}} = B_3 e^{\rho x} + B_3' e^{-\rho x}$$

考虑在 $x \to \pm\infty$ 时波函数的行为, 有

$$B_1' = 0, \quad B_3 = 0$$

于是有下面四个方程,

$$\varphi_{\mathrm{I}}\left(-\frac{a}{2}\right) = \varphi_{\mathrm{II}}\left(-\frac{a}{2}\right) \qquad \Longrightarrow \qquad B_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} - A_2 e^{-\frac{1}{2}ika} - A_2' e^{\frac{1}{2}ika} = 0$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{I}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-\frac{a}{2}} = \left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{II}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-\frac{a}{2}} \qquad \Longrightarrow \qquad B_1\rho e^{-\frac{\rho a}{2}} - iA_2ke^{-\frac{1}{2}ika} + iA_2'ke^{\frac{1}{2}ika} = 0$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}\left(\frac{a}{2}\right) = \varphi_{\mathrm{III}}\left(\frac{a}{2}\right) \qquad \Longrightarrow \qquad A_2e^{\frac{1}{2}ika} + A_2'e^{-\frac{1}{2}ika} - B_3'e^{-\frac{1}{2}\rho a} = 0$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{II}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=\frac{a}{2}} = \left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{III}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=\frac{a}{2}} \qquad \Longrightarrow \qquad iA_2ke^{\frac{1}{2}ika} - iA_2'ke^{-\frac{1}{2}ika} + B_3'\rho e^{-\frac{1}{2}\rho a} = 0$$

这是关于四个未知数 B_1, A_2, A_2', B_3' 的四个齐次方程, 为了有非零解, 必须有

$$\begin{vmatrix} e^{-\frac{1}{2}\rho a} & -e^{-\frac{1}{2}ika} & -e^{\frac{1}{2}ika} & 0 \\ \rho e^{-\frac{1}{2}\rho a} & -ike^{-\frac{1}{2}ika} & ike^{\frac{1}{2}ika} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}ika} & e^{-\frac{1}{2}ika} & -e^{-\frac{1}{2}\rho a} \\ 0 & ike^{\frac{1}{2}ika} & -ike^{-\frac{1}{2}ika} & \rho e^{-\frac{1}{2}\rho a} \end{vmatrix} = 0$$

具体结果是

$$2ie^{-\rho a}\left[2k\rho\cos ka + (\rho^2 - k^2)\sin ka\right] = 0 \tag{2}$$

从中确定能量 E (注意到 k 和 ρ 都与能量有关).

Cohen 书中提供了另一种做法. 首先令 $B_1' = 0$, 根据 $x = -\frac{a}{2}$ 处的边界条件, 有

$$A_2 = e^{\frac{1}{2}a(-\rho+ik)}\ \frac{\rho + ik}{2ik}\ B_1 \tag{3}$$

$$A_2' = -e^{-\frac{1}{2}a(\rho+ik)}\ \frac{\rho - ik}{2ik}\ B_1 \tag{4}$$

接着, 考虑 $x = \frac{a}{2}$ 处的边界条件, 给出

$$B_3 = \frac{e^{-\rho a}}{2k\rho}\left[2k\rho\cos ka + (\rho^2 - k^2)\sin ka\right] B_1 \tag{5}$$

$$B_3' = \frac{\rho^2 + k^2}{2k\rho}\ \sin ka\ B_1 \tag{6}$$

这时, 再令 $B_3 = 0$, 给出与 (2) 式等价的关系.

现在要求解方程

$$2k\rho\cos ka + (\rho^2 - k^2)\sin ka = 0$$

注意到 $k, \rho > 0$. 将该方程改写为

$$\frac{2k\rho}{k^2 - \rho^2} = \frac{\sin ka}{\cos ka} \tag{7}$$

令

$$\frac{\rho}{k} = \tan\chi, \quad \tan\chi > 0$$

从 (7) 式得到

$$\tan 2\chi = \tan ka$$

有如下两种情况:

1. $2\chi = 2n\pi + ka$, n 为整数. $\chi = n\pi + \frac{ka}{2}$, 于是

$$\tan\chi = \frac{\rho}{k} = \tan\frac{ka}{2}$$

   但是需要添加一个条件 $\tan\frac{ka}{2} > 0$.

2. $2\chi = (2n+1)\pi + ka$, n 为整数. $\chi = n\pi + \frac{\pi}{2} + \frac{ka}{2}$, 于是

$$\tan\chi = \frac{\rho}{k} = -\cot\frac{ka}{2}$$

这时应该有条件 $\tan\frac{ka}{2} < 0$.

再注意到

$$k^2 + \rho^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv k_0^2$$

对于第一种情况, 有

$$\left.\begin{array}{l} 1 + \frac{\rho^2}{k^2} = \frac{k_0^2}{k^2} = 1 + \tan^2\frac{ka}{2} \implies \frac{k}{k_0} = \left|\cos\frac{ka}{2}\right| \\ \tan\frac{ka}{2} > 0 \end{array}\right\} \tag{8}$$

类似地, 对于第二章情况, 有

$$\left.\begin{array}{l} 1 + \frac{\rho^2}{k^2} = \frac{k_0^2}{k^2} = 1 + \cot^2\frac{ka}{2} \implies \frac{k}{k_0} = \left|\sin\frac{ka}{2}\right| \\ \tan\frac{ka}{2} < 0 \end{array}\right\} \tag{9}$$

只能有数值解.

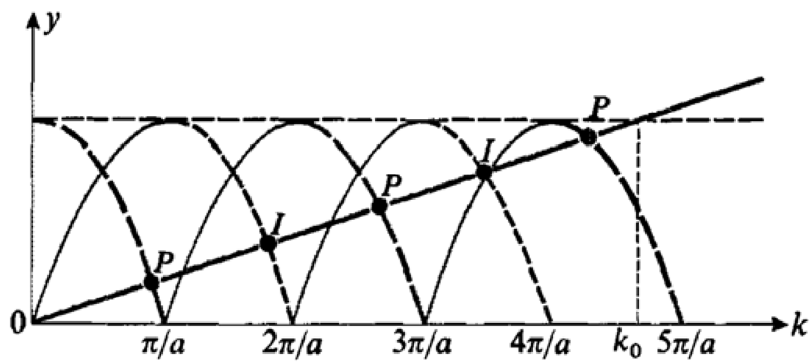

图 6: P 表示偶函数, I 表示奇函数.

将第一种情况下的解 (8) 代入 (3) 和 (4), 得到 $A_2 = A_2'$; 代入 (6), 得到 $B_3' = B_1$. 这表明, 第一种情况中的本征函数是偶函数. 类似地, 可以看出第二种情况中给出的本征函数是奇函数. 而且, 基态是偶函数.

一个普遍的结论是, 如果势能具有空间对称性, 那么哈密顿量的本征函数就有明确的宇称, 表现为空间位置的奇函数或偶函数.

δ 势场中的粒子

参看 Cohen 书 Completement $\mathrm{K_I}$, Exercise 2, 3, 4, 5.

参看 Cohen 书第 Ⅲ 章补充内容 M, 有关束缚态能级分立的讨论.