

量子力学一维问题的 Mathematica 演示

摘 要

本篇论文以量子力学的几个典型问题作为切入点，通过 Mathematica 软件进行交互性演示，具体内容分别为：波函数与自由粒子波包、一维无限深势井、含时问题、方形势垒、一维 M 形势垒。通过 Mathematica 的 Plot 函数展示以上问题的特定情况下的图形；Manipulate 函数提供交互式操作，更佳直观形象。

关键词：Mathematica；量子力学；交互性演示；经典问题

装

订

线

目 录

1	引言	1
1.1	量子力学介绍	1
1.2	Mathematica 介绍	1
2	几个典型的问题	2
2.1	波函数与自由粒子波包	2
2.2	一维无限深势井	5
2.3	含时问题	7
2.4	方形势垒	8
2.5	一维 M 形势垒	11
3	演示界面	15
3.1	波函数与自由粒子波包	15
3.2	一维无限深势井	15
3.3	含时问题	15
3.4	方形势垒	16
3.5	一维 M 形势垒	18
4	总结与展望	19
	参考文献	20
	致谢	21
	附录	22

1. 引言

1.1 量子力学介绍

经典力学奠定了现代物理学的基础，但是对于微观亚原子条件下的问题，牛顿物理便不再适用。因此，量子力学应运而生。

量子力学是研究微观粒子运动规律的学科，它是主要研究原子、分子、凝聚态物质、以及原子核和基本粒子的机构、性质的基础理论。在量子力学的体系中，粒子的运动速度和位置不可能同时得到精确的测量，同时微观粒子的动量、电荷、能量等特征均不连续、量子力学无法描述粒子运动轨道的细节，只能给出相对几率。

量子力学是建立于量子假设与实验事实的基础之上。与牛顿力学、麦克斯韦电动力学、爱因斯坦相对论的简历方式迥然不同，它是由一群人建立、发展、完善起来的。1900 年普朗克为解决黑体辐射问题而提出量子假设，这标志着量子时代的开始。随后，爱因斯坦的光量子假说、玻尔的量子轨道模型奠定了旧量子论的理论基础，之后，在爱因斯坦、海森堡、玻尔、薛定谔、狄拉克等学者的努力下，量子理论得到了极大的发展。量子力学作为一门新生但富有活力的科学，它开辟了极为广阔的科学天地，固体物理学、量子统计力学、量子场论、量子电动力学、量子色动力学等相继出现。本文中我们将介绍量子力学中一维问题的图形化演示。

1.2 Mathematica 简介

Mathematica 是 Wolfram 公司开发的科学计算软件，其主要的功能有：符号运算、数值计算、绘制图形等。它囊括了大量可立即计算的函数，只要输入相关的参数，就可以立即得到计算结果。在教学领域，从高中到研究生阶段，数以百计的课程都在使用它，并有多本关于 Mathematica 的教学图书出版。Karim 等人甚至还基于 Mathematica 软件展开了远程教学。但是，在我国，依据 Google 学术检索的结果，Mathematica 与教学等词条相关的论文搜索结果甚至还不足三千条。相关教学论文不仅内容不深入，而且数量不够充分，与之相关的教材也比较匮乏，并且，这些研究主要分布于大学物理以及大学数学这两门课程，这说明我国的 Mathematica 辅助教学仍然处于初级阶段，还没有得到广大教师的足够重视和普遍使用。

在本文中，通过借助 Mathematica 快速解决许多原本要使用复杂的高等数学知识手工推导的问题，同时解析结果也可以通过作图功能得到形象化的可视化图像。本文引用几个经典的量子力学一维问题来简单介绍 Mathematica 在量子力学中的应用。

这里给出几种函数的基本表示形式，以方便后文的浏览。

1. `2;(*整数*)1/2;(*有理数*)0.5 + I;(*复数*)E;(*自然常数*)Pi;(*圆周率*)`
2. `Abs[-2];(*绝对值*)`
3. `Re[1 + I];(*复数的实部*)`
4. `Exp[3];(*指数函数*)`
5. `Sin[1]; Cos[2]; Cosh[3]; Sinh[4]; (*三角函数与双曲函数*)`
6. `x = 1;(*把 1 赋值给 x*)`

```

7. Solve[x + 2 == 3, x];(*解关于 x 的方程*)
8. D[x^2, x];(*求导/求偏导*)
9. Integrate[x^2, x];(*不定积分/定积分*)
10. Clear[x];(*清除 x 的值和定义*)
11. Plot[x^2, {x, -1, 2}];(*画图*)
12. Manipulate[x^2, {x}];(*交互*)
13. f[x] = x^3;(*定义指定对象 f[x] 的值, x 表示某一个具体对象*)
14. f[x_] := x^3(*定义函数 f[x], x 表示变量*)
    
```

2. 几个典型的问题

2.1 波函数与自由粒子波包

波函数是量子力学的基本概念，薛定谔方程是量子力学的核心表述。薛定谔方程表示如下：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r}) \Psi$$

或者，当引入算符：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

其中 \hat{H} 称为体系的哈密顿算符，则薛定谔方程写为：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

这便是描述微观粒子波动性的方程，其中 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 就是波函数， $V(\mathbf{r})$ 是粒子的势能。

另外一个非常重要的问题是：波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 代表的意义是什么？薛定谔认为波函数就是通常意义上的波，而玻尔认为波函数代表概率波，而波函数的绝对值平方 $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 为概率密度，表示 t 时刻粒子在空间 \mathbf{r} 处的单位体积中出现的概率。

由玻尔所描述的统计解释，可以引出波函数的归一化条件，即：

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1$$

现在建立最简单的量子体系的波函数，即自由粒子波函数。在平面波中，振动的传播形成波动，假设原点 $x = 0$ 处的简谐振动为 $y(0, t) = A \cos(\omega t)$ ，其中 A 和 ω 分别为振幅和频率。若该振动以速度 V 向 x 轴正向传播，可知 x 点的振动方程为：

$$y(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

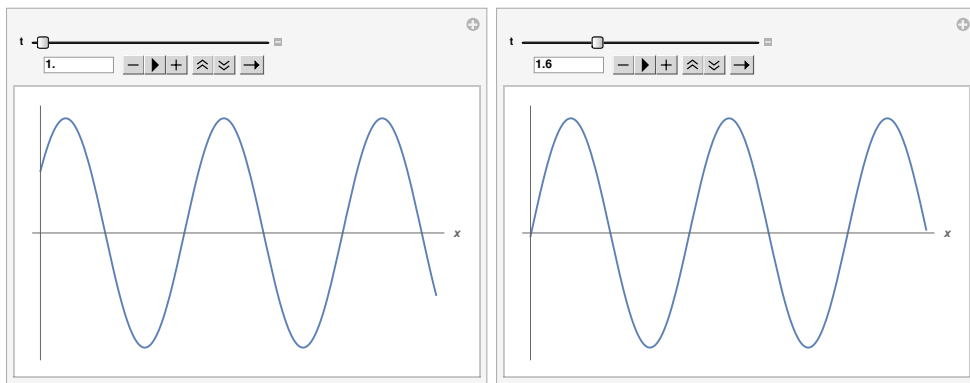
在上式的基础上，可以写出沿任意方向传播的平面波：

$$E(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

利用 Mathematica 可视化功能，可以观察一维波动函数伴随着 t 的变化：

推广到量子体系的自由粒子波函数，可以得到所要建立的波动方程的解：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}$$


 图 1: 一维波动函数伴随着 t 的变化

通过反向推导得到自由粒子波函数满足的波动方程:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi$$

现在考虑自由粒子薛定谔方程的一般解。不同于经典力学，量子力学中自由粒子不受束缚，可以出现在空间的任意位置。

首先考虑什么是束缚态，在经典力学中，如果一个能量为 E 的粒子处于势井 $V(x)$ 中，且 $V(x)$ 两边都比粒子的能量高，则粒子的运动会被限制在势井内。

以上这种情况被称为束缚态。在量子力学中，也存在类似的情况，不同的是，微观粒子在束缚态会呈现能量的不连续性，即分立的能量值。

而在自由粒子处于散射态，它具有连续变化的动量值和连续变化的能量值，称为连续谱。

一般性地考虑以为自由粒子的初值问题:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} & (a) \\ \Psi(x, 0) = f(x) & (b) \end{cases}$$

其中， $f(x)$ 是自由粒子的初始波函数，其中(a)式子的本征解为:

$$\Psi_p(x, t) = \psi_p(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

它具有确定的能量 E , 且

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$\psi_p(x)$ 是具有确定动量的定态波函数，

$$\psi_p = A e^{\frac{i}{\hbar} p x}$$

A 是归一化常数。

现考虑初始条件(b), 将本征解叠加起来构成一般解。由于本征值 p 是连续的，其一般解形式为积分:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) \Psi_p(x, t) dp$$

上式所表示的状态是将本征解 $\Psi(x, t)$ 按照动量 p 的变化积分起来形成的自由粒子态，在量子力学中称为自由粒子波包，其强度由 $|\Psi(x, t)|^2$ 表示。

经过简化，上式可以写为:

$$\Psi(x, t) = A \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

根据波数 $k = p/\hbar$, 再结合(b)中 $t = 0$ 的初始条件, 再利用归一化的动量本征函数可以得到:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{-i(kx - \frac{\hbar t}{2m} k^2)} dk$$

上式便是关于自由粒子波包的一般性结果。

下面以一道例题进一步介绍自由粒子波包的时间演化。

例: 假设自由粒子的初试波函数为高斯函数:

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

其中, a 是正常数。

- 1> 求自由粒子波包 $\Psi(x, t)$ 和波包强度 $|\Psi(x, t)|^2$;
- 2> 求长时间后的波包强度;
- 3> 讨论波包强度的时间演化。

解 1> 利用 Mathematica, 输入代码

```
1. (* 自由粒子波包 *)
2. A = 1/Sqrt[2*Pi*\[HBar]];
3. f[x_] := (1/Pi)^(1/4)*E^(-0.5*1*x^2); (* 以取 f(x)高斯函数为例; *)
4. c[k_] = A*Integrate[f[x]*E^(-I*k*x), {x, -Infinity, +Infinity}]
```

运行后可以得到 $c[k] = (0.751126 E^{-0.5 k^2})/\text{Sqrt}[\text{\[HBar]}]$, 经过处理得到解析解:

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{k^2}{2}}$$

代入 $\Psi(x, t)$ 中可得到:

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{k^2}{2}} e^{-i(kx - \frac{\hbar t}{2m} k^2)} dk$$

简化后得到:

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{1 + i \frac{\hbar t}{m}}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2(1 + i \frac{\hbar t}{m})}}$$

进而得到波包强度:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2}} e^{-\frac{x^2}{1 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2}}$$

使用无量纲参量 $X = x$, $\tau = \hbar t/m$, 上式可以改写为:

$$|\Phi(X, \tau)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2}} e^{-\frac{X^2}{1 + \tau^2}}$$

得 $|\Phi(X, \tau)|^2 = |\Psi(x, t)|^2$.

以 X 自变量作为 $|\Phi(X, \tau)|^2$ 的函数, 在不同时刻 τ 的图形如下所示, 也可以借助 Mathematica 的 Manipulate 函数来观察波包, 可以得出结论: 随着时间的推移, 波包逐渐展宽。

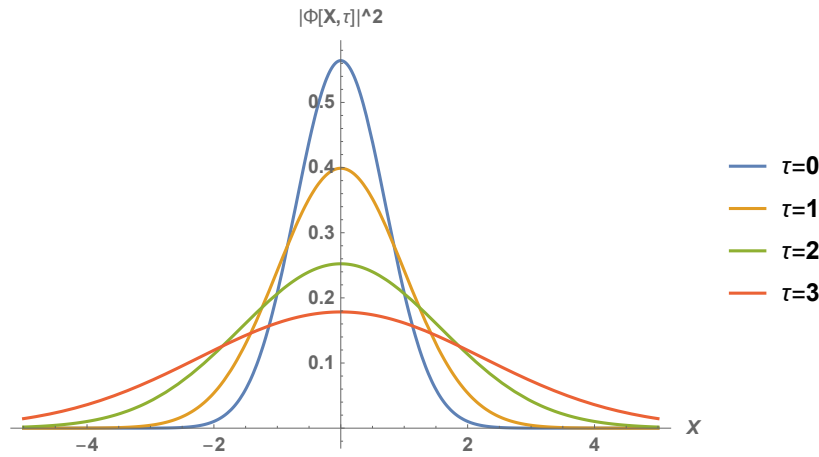


图 2: 波包随时间的变化情况

2> 长时间后, 即 t 变得足够大, $1 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2 \approx \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2$, 精确解为:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2}} e^{-\frac{x^2}{1 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2}}$$

转化为:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{m}{\hbar t} e^{-\left(\frac{xm}{\hbar t}\right)^2}$$

3> 讨论波包宽度随时间的演化, 当 $t = 0$ 时, 其波包宽度为:

$$\frac{|\Psi(A, 0)|^2}{|\Psi(0, 0)|^2} = e^{-A^2}$$

定义 $A = 1$, 则在任意 t 时刻有:

$$2A(t) = 2 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2}$$

当 t 足够大, 有:

$$2A(t) \approx 2 \frac{\hbar t}{m}$$

它与时间 t 成正比，即波包随着时间变得越来越宽。

2.2 一维无限深势井

考虑一个置于 x 轴重的细金属杆，其两端处于 $x = 0$, $x = a$ ，杆内由电子沿 x 轴自由运动，但不能从两个端面溢出。电子所处的势场为：

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x \leq 0, x \geq a) \end{cases}$$

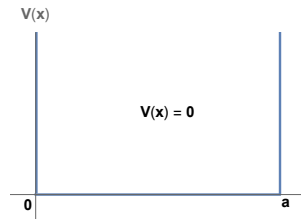


图 3：一维无限深势井

这便是一维无限深势井，如右图所示。

首先，由于是无限深势井，因此粒子无法出现在势井之外，即波函数为 0。粒子在势井内部只有动能，没有势能。粒子在势井内的哈密顿算符为：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

粒子的定态薛定谔方程为：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi$$

上式中， m 为粒子质量， $\psi(x)$ 是 \hat{H} 的本征函数； E 是相应的本征值，且满足 $E > 0$ 。

上式可以改写成：

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \text{ 其中 } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

其中， k 表示自由粒子的德布罗意波数。

求解上式，它的通解为：

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

其中， A 和 B 是任意常数。考察波函数的边界条件，由于波函数在边界处，即 $x = 0$ 和 $x = a$ 处，均需要保持连续，由此其边界条件为：

$$\psi(a) = \psi(0) = 0$$

解得 $B = 0$ ，则必然有 $A \neq 0$ ，故可得 $ka = n\pi$, ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$)。但是当 $n = 0$ 导致平庸解 $\psi(x) = 0$ ，而由奇偶性可知负得 n 值（即负得 k 值）并不能给出新的本征函数。综上，有：

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

进而得到本征能量：

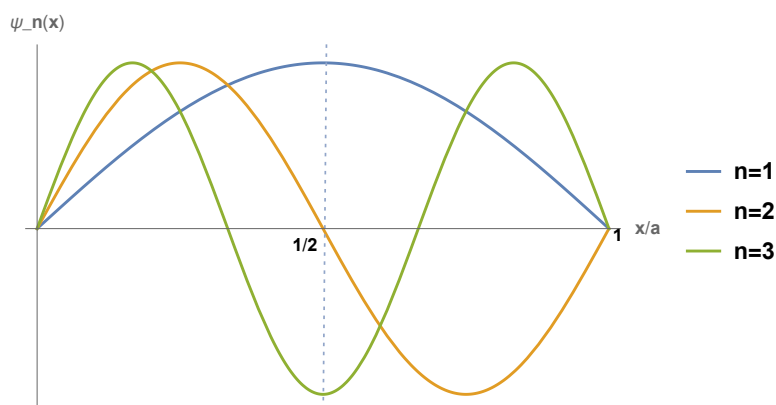
$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

而本征函数为：

$$\psi_n = A \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

对本征函数进行归一化，即令 $\int_0^a \psi_n^2 dx = 1$ 可以解出 $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ 。

在这里，我们给出前三个本征函数的图像：



依据上述结果，考察本征函数的性质：

1. 本征函数相对于势井的中心，本征函数 $x = a/2$ 处是奇偶交替的。 ψ_1 是偶函数， ψ_2 是奇函数， ψ_3 是偶函数…。这样的本征函数被称为具有确定的宇称。偶函数对应偶宇称，奇函数对应奇宇称。
2. 由波函数和边界连续条件构成的边值问题正是数理方法中两端固定弦振动的空间本征值问题。事实上，由 $k_n = n\pi/a$ 可得势井中的驻波条件：

$$a = \frac{n\pi}{k_n} = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{k_n} n = \frac{\lambda_n}{2} n$$

其物理含义是：由一个正整数 n 表征的本征函数 $\psi_n(x)$ 表示势井中微观粒子的一个德布罗意驻波， n 代表量子数，且具有确定的波长 $\lambda_n = 2a/n$ 。

3. 势井端点 $x = 0$ 和 $x = a$ 是势场的奇点： $V(0) \rightarrow \infty, V(a) \rightarrow \infty$ 。由定态薛定谔方程可看出 $\psi''(0) \rightarrow \infty, \psi''(a) \rightarrow \infty$ 。此时 ψ' 在 $x = 0$ 和 $x = a$ 是不连续的，同时可以计算出 ψ' 的跃变值。不过一般情况下，波函数在势场之外都是光滑的。
4. 无限深势井模型属于一维束缚态问题，按照一般性结论，本征函数满足正交性关系。再结合本征函数的归一表达式可以得到本征函数的正交归一性表达式。
5. 依据一维束缚态问题的一般性结论，本征函数构成完备集 $\{\psi_n(x)\}$ 。
6. 依据一维束缚态问题的一般性结论，本征函数具有封闭性。
7. 可以得到粒子在势井中的概率密度：

$$|\psi_n|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

讨论本正能量的性质：

1. 与经典物理完全不同，本征能量是量子化的，随着量子数 n 的增加而分离变化。这是由于波函数标准条件导致的结果。
2. 粒子在基态 ($n = 1$) 能量最低，为：

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

注意与经典状态的区别。量子力学中，最低能量不为零，而经典力学中最低能量为零。

3. 相邻两个能级的间隔为：

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n + 1) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

可见能级不是等间隔的，随着量子数 n 的增大，间隔将越来越宽。

2.3 含时问题

考虑一维无限深势井粒子的含时薛定谔方程的一般解，即求下列初值问题：

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x, t) & (a) \\ \Psi(x, 0) = f(x) & (b) \end{cases}$$

其 (a) 的一般解为：

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

该式显示了波函数 $\Psi(x, t)$ 随时间和空间的变化关系。

其中，本征函数 ψ_n 和本征值 E_n 在 1.2.2 节中已计算出结论：

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

展开系数 c_n 为：

$$c_n = \int_0^a f(x) \psi_n(x) dx$$

当 $t = 0$ 时，可以得到：

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

进而可得 $\Psi(0, 0) = 0$ 和 $\Psi(a, 0) = 0$ 。这意味着体系的初始波函数 $f(x)$ 必须满足 $f(a) = 0$ 和 $f(0) = 0$ 。

例：设粒子处于宽度 $a = 1$ 的无限深势井，其初始波函数为为：

$$f(x) = \begin{cases} \sqrt{12} x & (0 \leq x < \frac{1}{2}) \\ \sqrt{12} (1 - x) & (\frac{1}{2} \leq x < 1) \end{cases}$$

求任意 t 时刻的波函数。

解：初始波函数 $f(x)$ 是归一化的，且满足 $f(0) = 0$ 和 $f(1) = 0$ 的边界条件。得到展开系数：

$$c_n = 2\sqrt{6} \left[\int_0^{\frac{1}{2}} x \sin(n\pi x) dx + \int_{\frac{1}{2}}^1 (1 - x) \sin(n\pi x) dx \right] = \frac{4\sqrt{6}}{(n\pi)^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

代入 $\Psi(x, t)$ 可以得到求任意 t 时刻的波函数：

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8\sqrt{3}}{(n\pi)^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin(n\pi x) e^{-i \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2m} t}$$

当 $t = 0$ 时，可以得到：

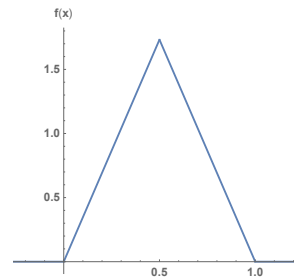


图 5: 无限深势井模型的一个初始波函数

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8\sqrt{3}}{(n\pi)^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin(n\pi x)$$

通过 Mathematica 作图功能可以看出，当求和项数增加时，曲线与初始波函数更加吻合。

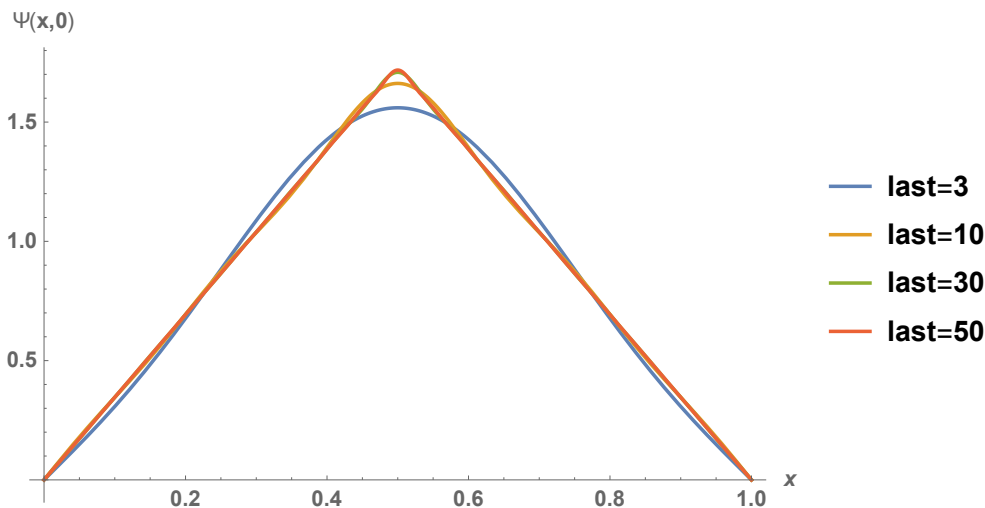


图 6: 不同项数下曲线的图像

2.4 方形势垒

考虑一维方形势垒，其势场为：

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

假设能量为 E 的粒子从无限远处来，沿着 x 轴正方向入射势垒。按照经典力学的理论，如果 $E < V_0$ ，则粒子不能进入势垒，会被反弹回去；另一方面，如果 $E > V_0$ ，则粒子将会越过势垒而不会被反弹。但是按照波动性理论，无论是 $E < V_0$ 或者 $E > V_0$ ，对于入射波，都存在反射波和透射波，因此在这两种情况下，入射粒子都存在一定的概率穿透势垒，也有一定的几率被反弹回去。

首先讨论 $E < V_0$ 的情况，在三个区域内，粒子的薛定谔方程为：

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 &= 0 & (x < 0) \\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - K^2\psi_2 &= 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + k^2\psi_3 &= 0 & (x > a) \end{aligned}$$

其中，

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad K^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

可以得到薛定谔方程的解分别为：

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_2(x) &= C_1 \cosh(Kx) + C_2 \sinh(Kx) \\ \psi_3(x) &= De^{ikx} \end{aligned}$$

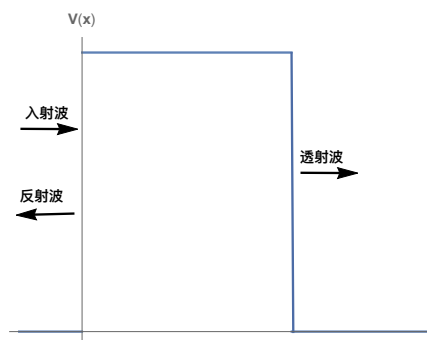


图 7: 方形势垒势场

其中, Ae^{ikx} 是入射波, Be^{-ikx} 是反射波, De^{ikx} 是透射波, C_1 和 C_2 是任意常数。

分别利用 ψ 和 ψ' 在 $x = 0$ 处的连续性条件, 可知:

$$A + B = C_1$$

$$i\eta(A - B) = C_2$$

其中, $\eta = k/K$. 进而分别利用 ψ 和 ψ' 在 $x = a$ 处的连续性条件, 可知:

$$C_1 \cosh(Ka) + C_2 \sinh(Ka) = De^{ika}$$

$$C_1 \sinh(Ka) + C_2 \cosh(Ka) = i\eta De^{ika}$$

二式联立, 得到:

$$\left(1 + \frac{B}{A}\right) \cosh(Ka) + i\eta \left(1 - \frac{B}{A}\right) \sinh(Ka) = \frac{D}{A} e^{ika}$$

$$\left(1 + \frac{B}{A}\right) \sinh(Ka) + i\eta \left(1 - \frac{B}{A}\right) \cosh(Ka) = i\eta \frac{D}{A} e^{ika}$$

由此解得:

$$\frac{B}{A} = -\frac{(1 + \lambda^2) \sinh(Ka)}{(1 - \lambda^2) \sinh(Ka) - 2i\eta \cosh(Ka)}$$

$$\frac{D}{A} e^{ika} = -\frac{2i\lambda}{(1 - \lambda^2) \sinh(Ka) - 2i\eta \cosh(Ka)}$$

现在, 入射波和透射波的概率流密度有着相同的形式: $\hbar k * |A|^2 / m$, $\hbar k * |D|^2 / m$, 因此反射系数和透射系数:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(Ka)}{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(Ka) + 4k^2 K^2}$$

$$T = \frac{|D|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2 K^2}{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(Ka) + 4k^2 K^2}$$

容易看出 $R + T = 1$.

进一步讨论透射系数, 将 T 用最初参数 E 和 V_0 表示, 可得:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})} \sinh^2(\beta \sqrt{1 - \frac{E}{V_0}})}$$

其中, β 表示势垒强度, 其表达式为:

$$\beta = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

现在利用 Mathematica 画出透射系数 T 随着比值 E/V_0 变化的曲线:

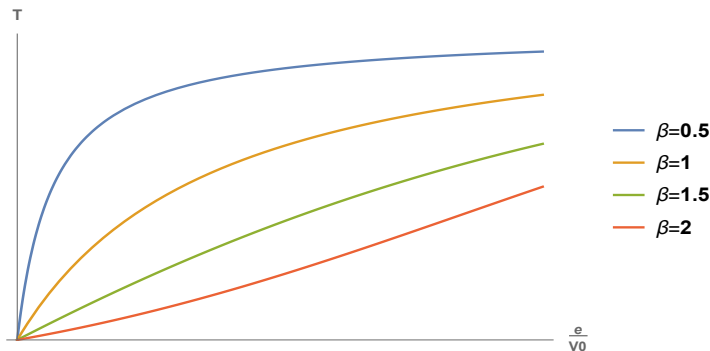


图 8: 透射系数 T 伴随势垒强度的变

可以看出，透射系数 T 随着比值 E/V_0 的增大而升高，随着势垒强度 β 的增大而下降。当 $\beta \rightarrow 0$ 时， $T \rightarrow 1$ ，这是完全透射的情况。

下面来考察概率密度的行为，由 ψ_1, ψ_2, ψ_3 得到：

$$|\psi_1(x)|^2 = |A|^2 + |B|^2 + AB^*e^{2ikx} + A^*Be^{-2ikx}$$

$$|\psi_2(x)|^2 = |C_1|^2 \cosh^2(Kx) + \frac{1}{2}(C_1C_2^* + C_1^*C_2)\sinh(2Kx) + |C_2|^2 \sinh^2(Kx)$$

$$|\psi_3(x)|^2 = |D|^2$$

按照上式可以作出概率密度曲线，如下图所示：

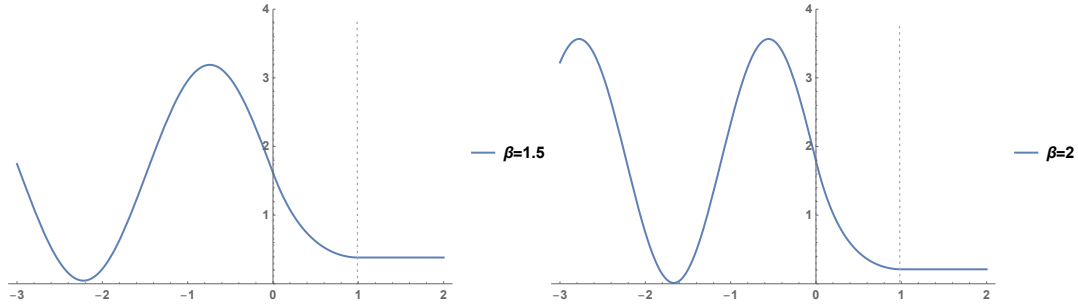


图 9: 概率密度曲线

从图中可以得到： $|\psi_1(x)|^2$ 波形来自于入射波 Ae^{ikx} 和反射波 Be^{-ikx} 的叠加，并且，在势垒 $|\psi_2(x)|^2$ 中呈单调下降，并在势垒后端（即 $x/a = 1$ 处）与透射波 $|\psi_3(x)|^2$ 光滑连接。以上结果表明：当势垒强度 β 增大时，透射波强度 $|D|^2$ 下降，这和之前分析是吻合的。

接下来讨论 $E > V_0$ 的情况，此时 K 为虚数：

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

利用 $\sinh(ix) = i\sin x$ 得到

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4 \frac{E}{V_0} (\frac{E}{V_0} - 1)} \sin^2(\beta \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1})}$$

利用 Mathematica 画出透射系数 T 随着比值 E/V_0 变化的曲线：

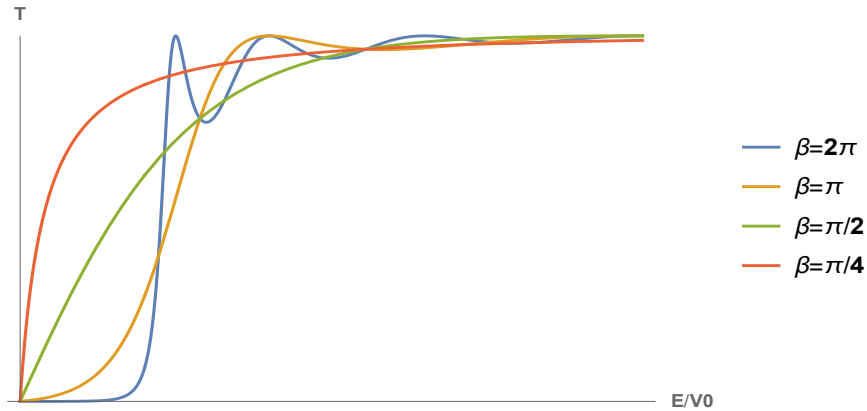


图 10: 透射系数 T 伴随势垒强度的变化

可以看出, 当势垒强度 β 较低时, T 单调增加; 当势垒强度 β 较高时, T 震荡式增加。当 $E/V_0 \rightarrow \infty$ 时, $T \rightarrow \infty$, 这是完全透射情况。当上式中正弦函数为零时, 即:

$$\beta \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1} = n\pi, (n = 1, 2, \dots)$$

时, $T = 1$, 此时可以得到完全透射时的能量:

$$E - V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

恰好对应于一维无限深势井模型的本正能量。

最后讨论 $E = V_0$ 的情况, 此时在透射系数 T 的表达式中出现了无穷小的情况, 应用洛必达法则可以得到:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{\beta^2}{4}} = \frac{1}{1 + \frac{mV_0}{2\hbar^2} a^2}$$

可见当 $E = V_0$ 时, 透射系数 T 的大小主要取决于势垒宽度 a 。显然, 当 $a \rightarrow 0$ 时, $T \rightarrow 1$; 而当 $a \rightarrow \infty$ 时, $T \rightarrow 0$ 。这些都符合预期。事实上, 在 $E < V_0$ 和 $E > V_0$ 的图形中, 在 $E/V_0 = 1$ 处, 每个 β 值及其对应的 T 值都满足上式。

2.5 一维 M 形势垒透射系数的计算与分析

如考虑一维 M 形势垒, 其势场为:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 - fx & (0 \leq x < a/2) \\ fx - V_0 & (a/2 \leq x \leq a) \\ 0 & (x > a) \end{cases}$$

上式中 $f = 2V_0/a$ 。当电子从势垒左边入射时, M 形势垒的宽度为 a , 高度为 V_0 。其模型如右图所示。

列出四个区域内粒子的薛定谔方程, 它们分别为:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 &= 0 & (x < 0) \\ \frac{d^2\psi_2}{d\xi^2} - \xi\psi_2 &= 0 & (0 \leq x \leq a/2) \\ \frac{d^2\psi_3}{d\zeta^2} - \zeta\psi_3 &= 0 & (a/2 \leq x \leq a) \\ \frac{d^2\psi_4}{dx^2} + k^2\psi_4 &= 0 & (x > a) \end{aligned}$$

其中,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\kappa = \left(\frac{2mf}{\hbar} \right)^{\frac{1}{3}}$$

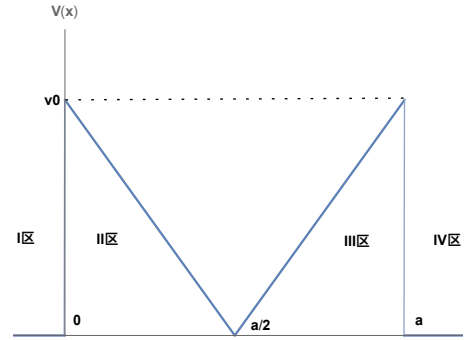


图 11: 一维 M 形势垒势场

$$\xi = \frac{\kappa}{f}(V_0 - E - fx)$$

$$\zeta = \frac{\kappa}{f}(fx - V_0 - E)$$

上式中, m 为电子的有效质量, E 为电子的本征能量, ψ 为属于本征能量 E 的本征波函数。为了简便, 忽略势垒对电子有效质量的影响, 默认电子的有效质量为其静止质量, $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$ 。

在 $x < 0$ 区域, 电子的波函数的通解可以表示为:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

其中, A_1 和 B_1 为波函数的待定系数, $A_1 e^{ikx}$ 表示 $x < 0$ 区域上向 x 正方向运动的电子的波函数, 即电子的入射波函数; $B_1 e^{-ikx}$ 表示 $x < 0$ 区域上向 x 负方向运动的电子的波函数, 即电子的反射波函数。

同理, 在 $x > a$ 区域, 电子的波函数的通解可以表示为:

$$\psi_4(x) = A_4 e^{ikx} + B_4 e^{-ikx}$$

其中, $A_4 e^{ikx}$ 表示 $x > a$ 区域向 x 正方向运动的电子的波函数, 即透射后电子的波函数; $B_4 e^{-ikx}$ 表示 $x > a$ 区域上向 x 负方向运动的电子的波函数, 但是由于电子从左侧入射, 到达该区域后不会再有反射, 因此该区域只有 x 正方向运动, 即 $B_4 = 0$ 。

在 $0 \leq x \leq a/2$ 区域, 依据 Airy 方程可以得到其解:

$$\psi_2(\xi) = A_2 \text{Ai}(\xi) + B_2 \text{Bi}(\xi)$$

其中, A_2 和 B_2 为 $0 \leq x \leq a/2$ 区域的待定系数。

在 $a/2 \leq x \leq a$ 区域, 可以得到其解:

$$\psi_3(\zeta) = A_3 \text{Ai}(\zeta) + B_3 \text{Bi}(\zeta)$$

其中, A_3 和 B_3 为 $a/2 \leq x \leq a$ 区域的待定系数。

四个势垒区域的通解得到后, 依据波函数的连续性条件得到待定系数之间的关系, 并求出透射率。波函数有三个边界, 分别在 $x = 0, x = a/2, x = a$ 处。

在 $x = 0$ 处, 依据波函数及其一阶导数的连续性, 有:

$$A_1 + B_1 = A_2 \text{Ai}(\xi_1) + B_2 \text{Bi}(\xi_1)$$

$$ikA_1 - ikB_1 = -\kappa A_2 \text{Ai}'(\xi_1) - \kappa B_2 \text{Bi}'(\xi_1)$$

其中, $\xi_1 = \kappa(V_0 - E)/f$, 对应于 $x = 0$ 处变量 ξ 的取值。 $\text{Ai}'(\xi_1)$ 和 $\text{Bi}'(\xi_1)$ 分别表示第一类和第二类艾里函数的一阶导数在 ξ_1 处的取值。

在 $x = a/2$ 处, 依据波函数及其一阶导数的连续性, 有:

$$A_2 \text{Ai}(\xi_2) + B_2 \text{Bi}(\xi_2) = A_3 \text{Ai}(\zeta_2) + B_3 \text{Bi}(\zeta_2)$$

$$-\kappa A_2 \text{Ai}'(\xi_2) - \kappa B_2 \text{Bi}'(\xi_2) = \kappa A_3 \text{Ai}'(\zeta_2) + \kappa B_3 \text{Bi}'(\zeta_2)$$

其中, $\xi_2 = \zeta_2 = -\kappa E/f$, 对应于 $x = a/2$ 处变量 ξ, ζ 的取值。

在 $x = a$ 处, 依据波函数及其一阶导数的连续性, 有:

$$A_4 e^{ika} = A_3 \text{Ai}(\zeta_1) + B_3 \text{Bi}(\zeta_1)$$

$$ikA_4 e^{ika} = \kappa A_3 \text{Ai}'(\zeta_1) + \kappa B_3 \text{Bi}'(\zeta_1)$$

其中, $\zeta_1 = \kappa(V_0 - E)/f$, 对应于 $x = a$ 的 ζ 的取值, 根据对比有 $\zeta_1 = \xi_1$ 。

令 $u = \text{Ai}(\xi_1)$, $\sigma = \text{Bi}(\xi_1)$, $u' = \text{Ai}'(\xi_1)$, $\sigma' = \text{Bi}'(\xi_1)$, $c = \text{Ai}(\xi_2)$, $d = \text{Bi}(\xi_2)$, $c' = \text{Ai}'(\xi_2)$, $d' = \text{Bi}'(\xi_2)$ 。则上式可以化简为:

$$A_1 + B_1 = uA_2 + \sigma B_2$$

$$ikA_1 - ikB_1 = -\kappa u'A_2 - \kappa \sigma'B_2$$

$$cA_2 + dB_2 = cA_3 + dB_3$$

$$-c'A_2 - d'B_2 = c'A_3 + d'B_3$$

$$A_4 e^{ika} = uA_3 + \sigma B_3$$

$$ikA_4 e^{ika} = \kappa u'A_3 + \kappa \sigma' B_3$$

利用艾里函数性质，对于任意变量 ξ ，艾里函数满足朗斯基行列式，即 $u\sigma' - u'\sigma = 1/\pi$, $cd' - c'd = 1/\pi$.

解得：

$$A_3 = -\frac{\kappa u' - iku}{\kappa \sigma' - ik\sigma} B_3$$

$$B_3 = -\frac{\pi(\kappa u' - iku)}{\kappa} e^{iak} A_4$$

$$A_3 = \frac{\pi(\kappa \sigma' - ik\sigma)}{\kappa} e^{iak} A_4$$

$$B_2 = -2\pi c c' A_3 - \pi(c'd + cd') B_3$$

$$A_2 = \pi(c'd + cd') A_3 + 2\pi d d' B_3$$

$$2ikA_1 = -(\kappa u' - iku) A_2 - (\kappa \sigma' - ik\sigma) B_2$$

$$\frac{A_4}{A_1} = \frac{1}{\pi^2 c c' (\kappa \sigma' - ik\sigma)^2 + d' d (\kappa u' - iku)^2 - (cd' + c'd)(\kappa u' - iku)(\kappa \sigma' - ik\sigma)} i \kappa k e^{-iak}$$

可以得到 M 形势垒电子的透射系数为：

$$T = \left| \frac{A_4}{A_1} \right|^2$$

现在进行数值计算。

首先考虑透射系数随能量的变化情况，其中势垒高度 $V_0 = 1.0 \text{ eV}$ ，势垒宽度 $a = 0.8 \text{ nm}$ 。通过 Mathematica 作图得到：

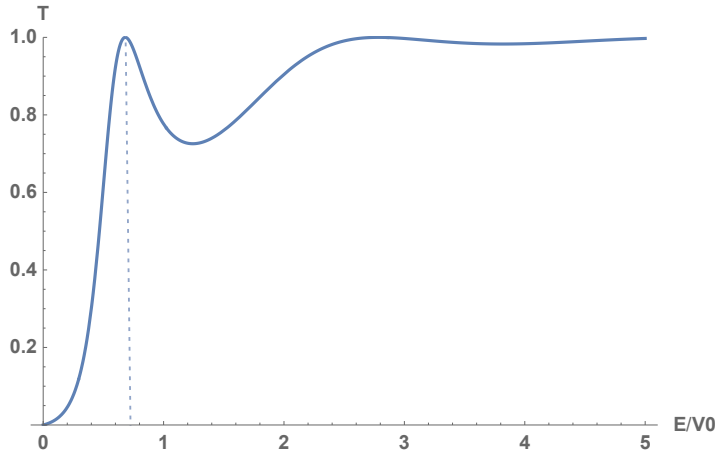


图 12: 透射系数随能量变化情况

上图显示，当 $E = 0.68 \text{ eV}$ 时，透射系数为 1，此时电子发生了谐振隧穿，M 形势垒相对于电子的运动而言是透明的；当 $E < 0.68 \text{ eV}$ 时，透射系数随着电子能量的增加而增加；当 $E > 0.68 \text{ eV}$ 时，透射系数随着电子能量的增加会有减小的过程。

与方形势垒相比，由于 M 形势垒壁方形势垒中间多一个 V 形势井，导致入射电子能量小于势垒高度时就能发生谐振隧穿，这意味着 M 形势垒更方便电子谐振隧穿。

接着考虑透射系数随着宽度的变化情况，假设入射电子能量为 $E = 1.0 \text{ eV}$ ，这里给出 V_0 与 E 的多个比值，比较当 V_0/E 不同时透射系数随着势垒宽度 a 的关系。

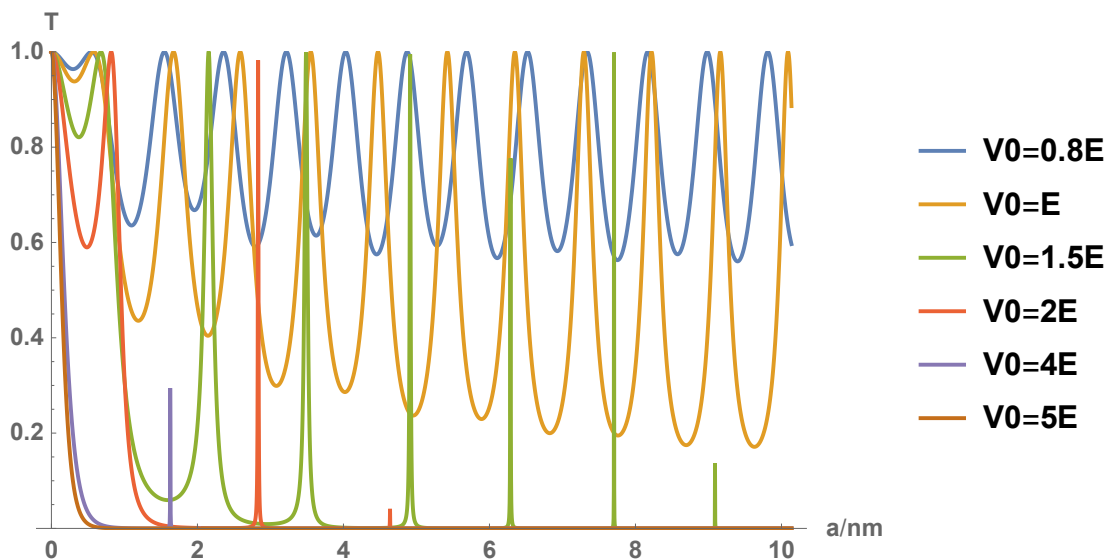


图 13: 透射系数随宽度变化情况

上图表示，在 M 形势垒中，当 $V_0 = 0.8E$ 时，透射系数随着势垒宽度的增加呈现周期性的谐振隧穿；当 $V_0 = E$ 时，随着势垒宽度增加其透射系数依旧呈现周期性的谐振隧穿；当 $V_0 = 1.5E$ 和 $V_0 = 2E$ 时，其透射系数发生谐振隧穿的次数相比 $V_0 = E$ 时已经少了很多，且透射系数峰值处小于 1，对应没有谐振隧穿的产生；在 $V_0 = 4E$ 时，虽然还有透射峰出现，但是已经不会出现谐振隧穿；当 $V_0 = 5E$ 时，甚至透射峰已经消失了，透射系数随着势垒宽度的增加迅速单调衰减到零。综上结果，势垒高度与电子能量数值相差无几时，M 形势垒中容易出现谐振隧穿，但是随着势垒高度的增加，发生谐振隧穿的次数会越来越少，知道没有谐振隧穿发生。

最后考虑透射系数随势垒高度高度的变化情况，假设入射电子的能量 $E = 1.0 \text{ eV}$ ，势垒宽度 $a = 0.8 \text{ nm}$ 。通过 Mathematica 作图得到：

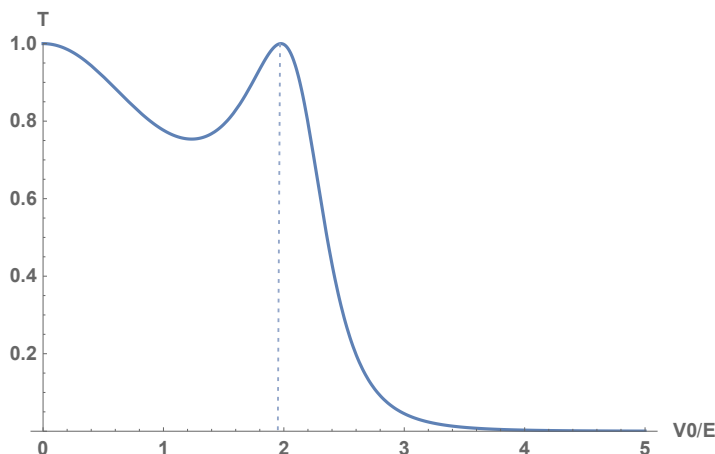


图 13: 透射系数随高度变化情况

上图显示，当 $V_0 = 1.97 \text{ eV}$ 时，电子会发生谐振隧穿；当 $V_0 < 1.97 \text{ eV}$ 时。随着势垒高度的增加透射系数先减少后增加；当 $V_0 > 1.97 \text{ eV}$ 时，透射系数随势垒高度的增加而单调下降，直到透射系数趋近于零。对比方形势垒可以得知，在

低势垒区，电子更容易透射方形势垒；在高势垒区，电子更容易透射 M 形势垒。

3. 演示界面

本小节主要展示以上讨论过的问题的 Mathematica 演示界面。

3.1 波函数与自由粒子波包

在该节例题中，随着时间的推移，波包逐渐展宽的交互式图像如下图所示：

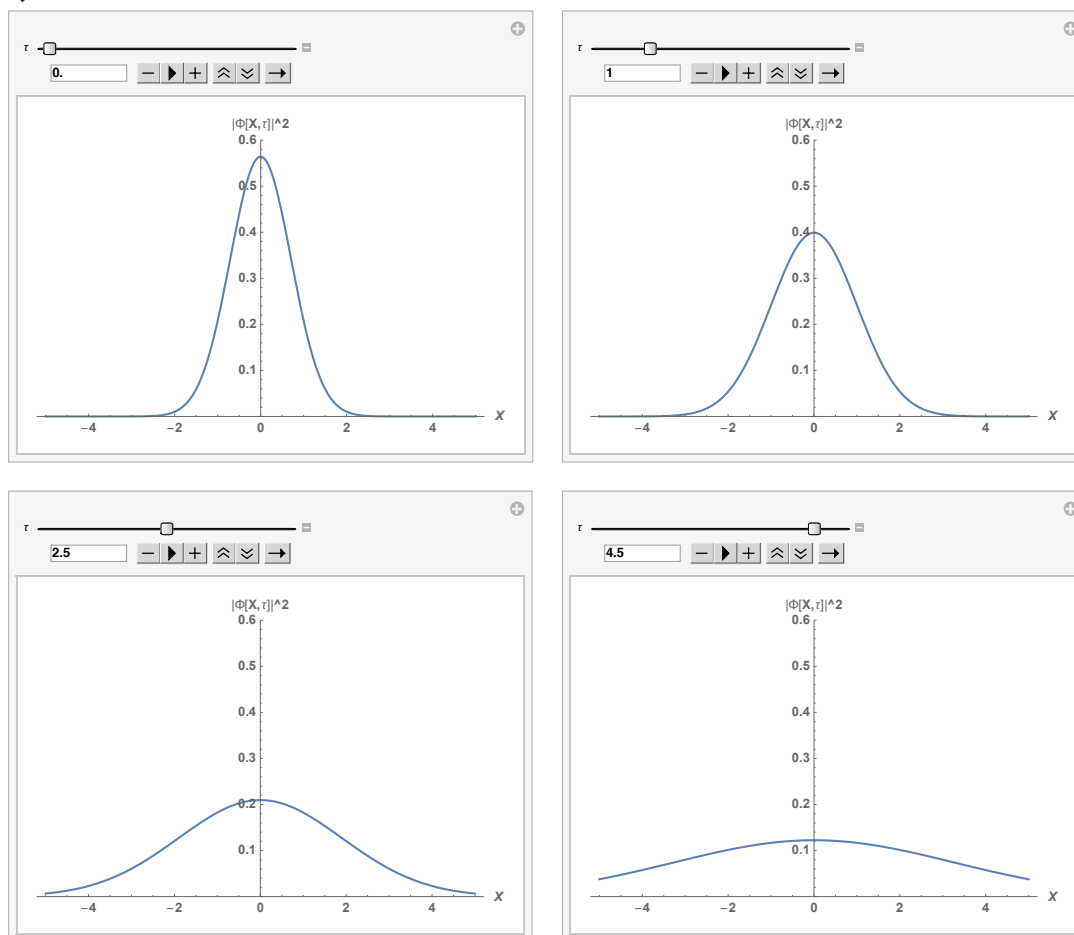


图 14: 波包宽度随时间变化情况

3.2 一维无限深势井

展示本征函数中 a 固定时 n 在不同取值下的图像：

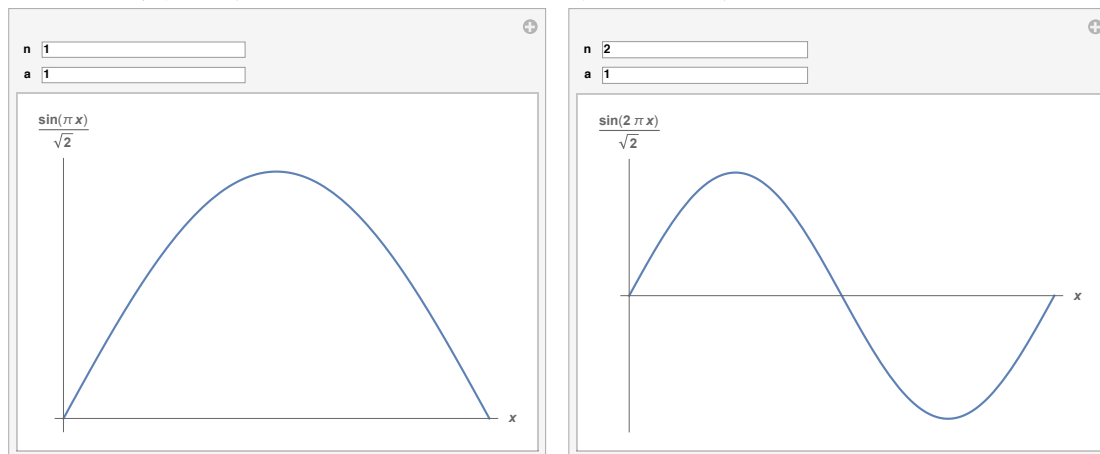


图 15: 本征函数在 n 不同取值下的图像

3.3 含时问题

在该节例题中，当求和项数增加时，波函数曲线的变化情况：

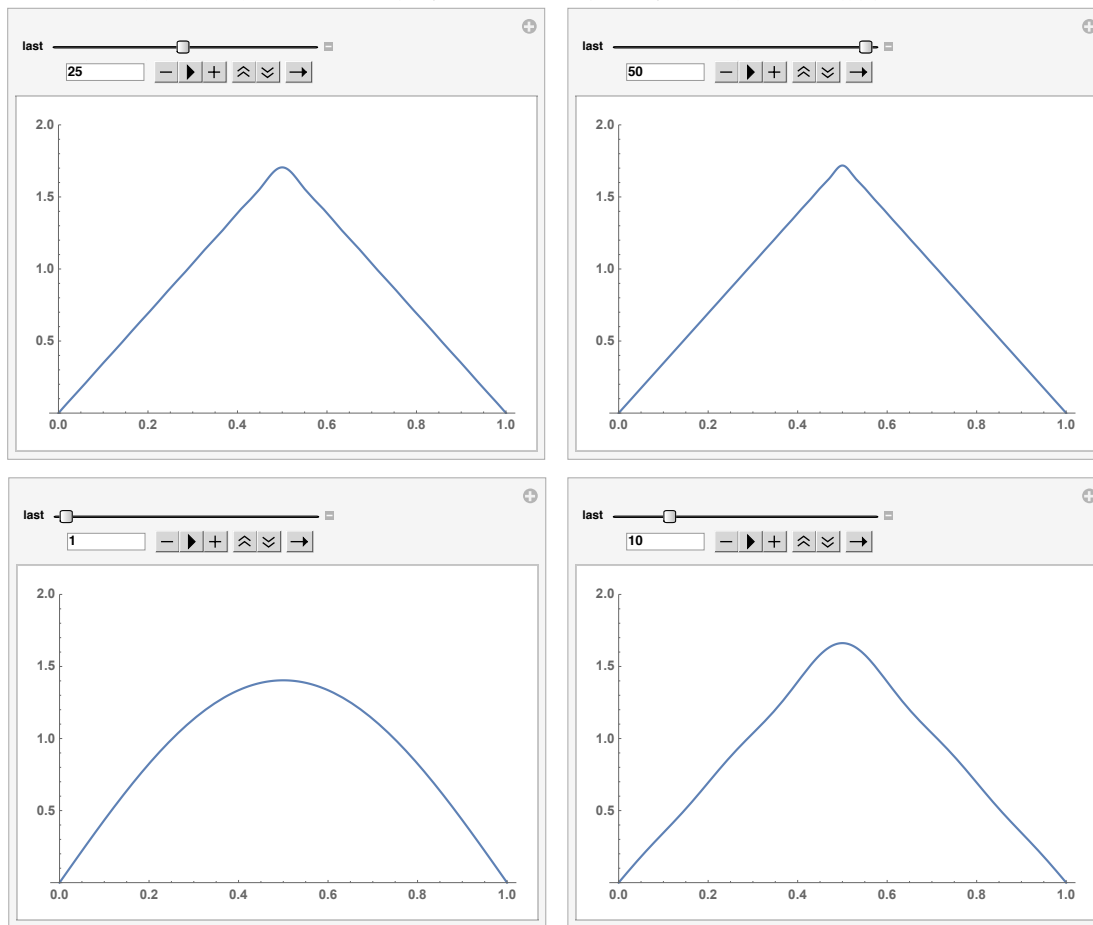
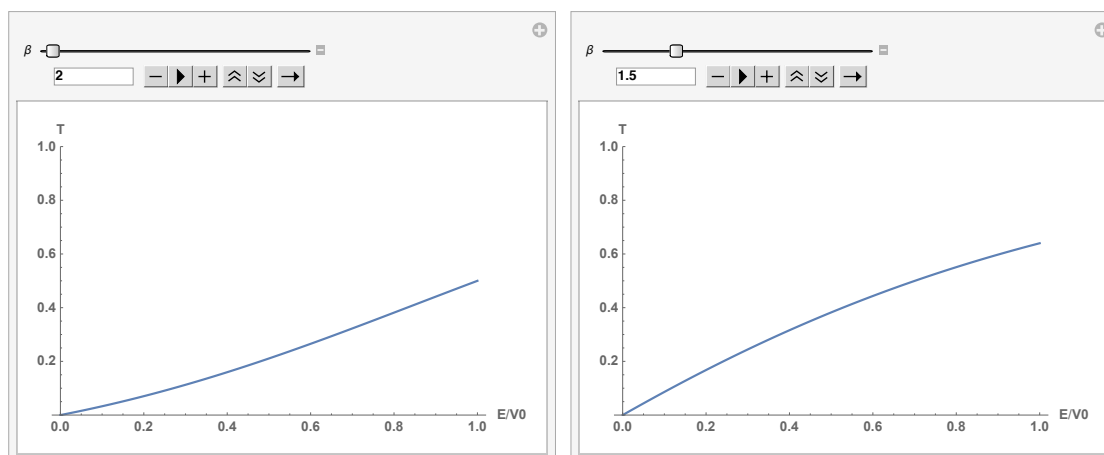


图 16: 不同项数下波函数图像

可见，当求和项数增加时，曲线与初始波函数更加吻合。

3.4 方形势垒

在方形势垒中，当 $E < V_0$ 透射系数 T 随着比值 E/V_0 变化的曲线：



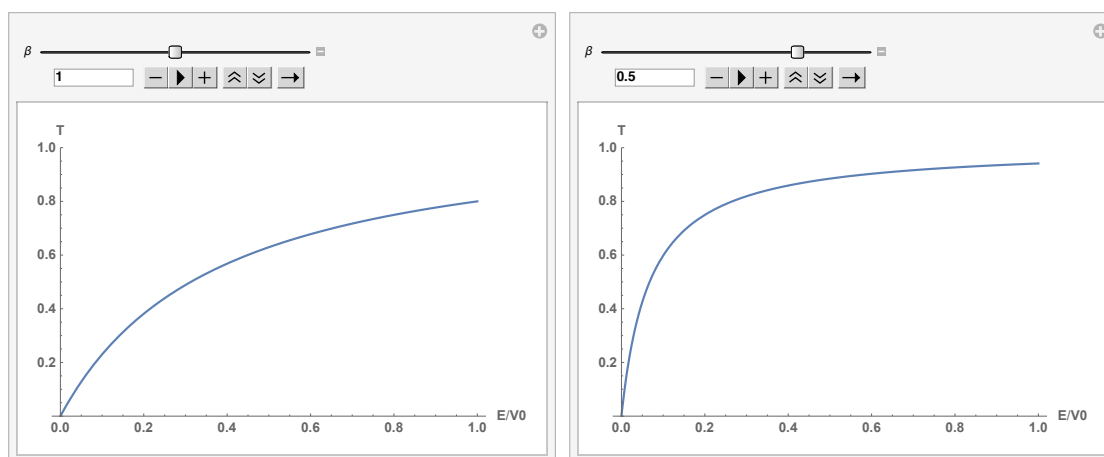


图 17: 透射系数 T 伴随势垒强度的变化情况

在方形势垒中, 当 $E > V_0$ 透射系数 T 随着比值 E/V_0 变化的曲线:

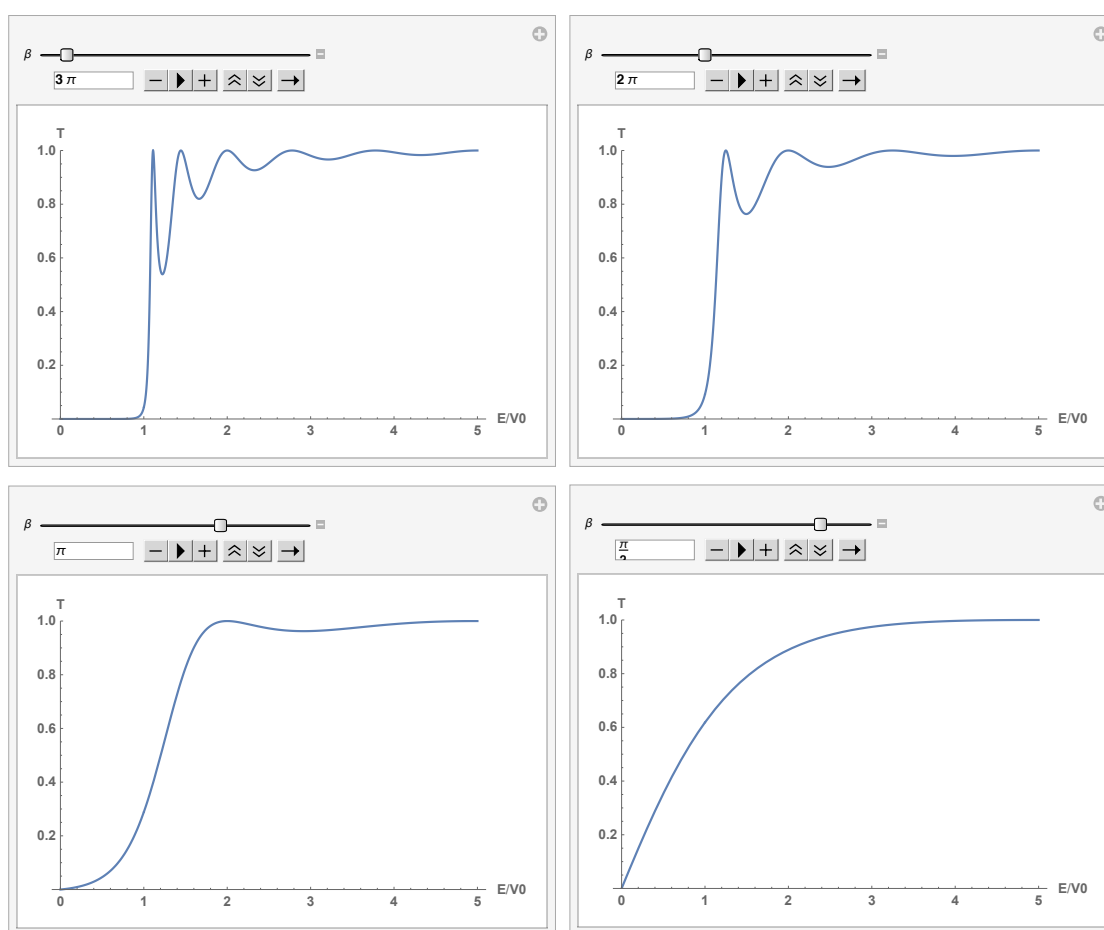


图 18: 透射系数 T 伴随势垒强度的变化情况

3.5 一维 M 形势垒透射系数

对于交互式操作，这里只给出 V_0/E 不同时透射系数随着势垒宽度 a 的关系，假设入射电子能量为 $E = 1.0 \text{ eV}$ 。

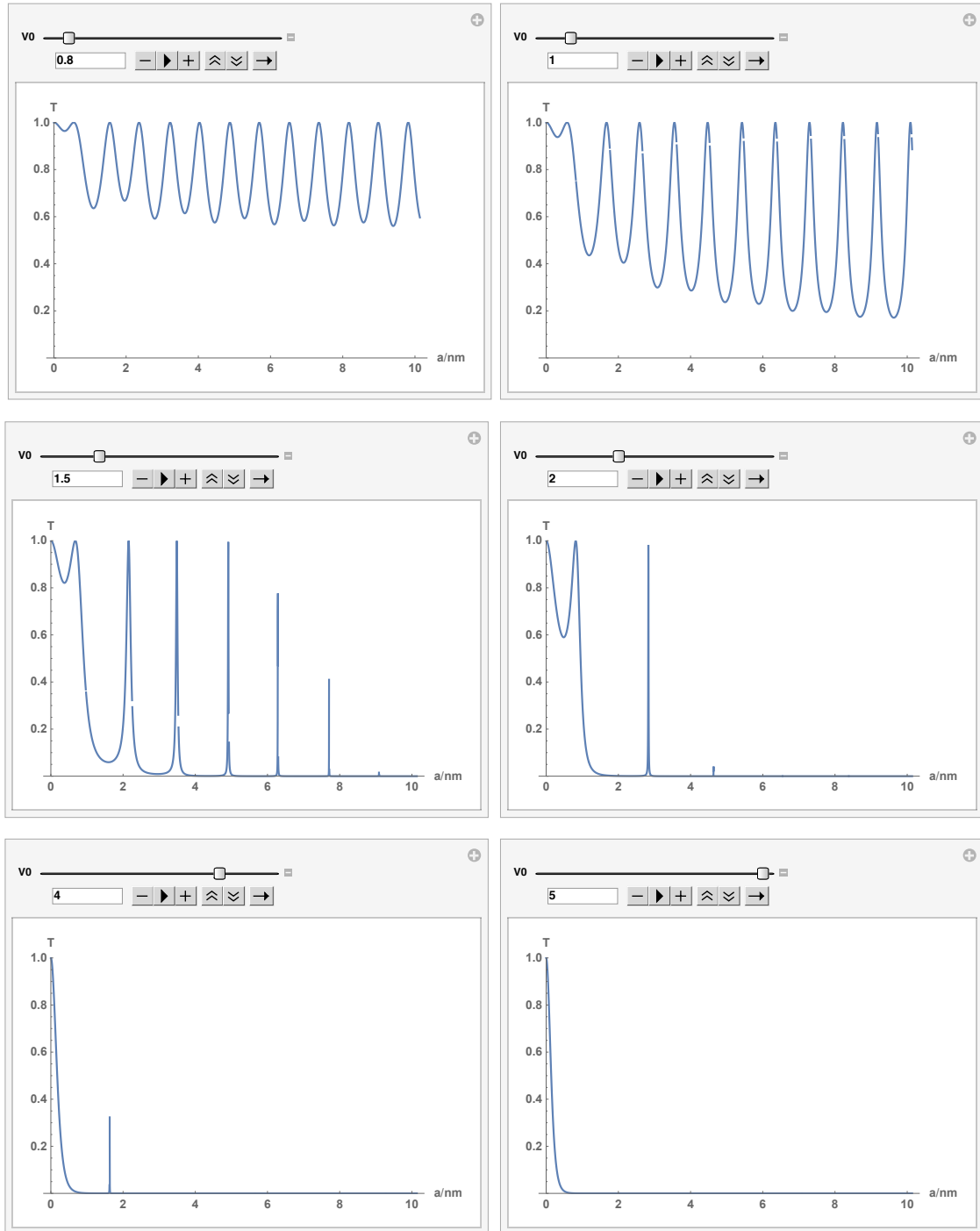


图 19: 透射系数 T 伴随势垒宽度的变化情况

4. 总结与展望

量子力学作为物理学专业的必修课，课程内容的抽象性使许多初学者难以入门，作为教学辅助，Mathematica 可以将抽象的数学物理方程及其运算结果以可视化的方式展示出来，极大帮助初学者学习。

在本文中，列出了几种最经典的量子力学问题，但量子力学所研究的内容远不止这些，很多问题，例如：量子谐振子、三维空间下的量子力学模型、测不准原理、微扰论等由于篇幅、时间、能力等原因没有列在其中。

同时，Mathematica 作为世界上应用范围最广的数学软件之一，其功能之强大远超本文的展示，如果有同学接手这一课题，可以在本文的基础上作进一步的优化。

参考文献

- [1] 罗琬华, 对电动力学课堂改革的研究 [J]. 西南师范大学学报: 自然科学版, 2006 (6): 187-191.
- [2] M.F.A.Karim, A.A.Kamil, Mathematica as a Tool for Studying Mathematics in Distance Learning Environment[J]. Malaysian Journal of Distance Education. 2011, 13 (2): 95-107.
- [3] 刘雄伟, 李建平, 胡小荣, 利用 Mathematica 软件改善高等数学教学效果的时间[J]. 中国教育技术装备, 2007 (4): 17-19.
- [4] 郝勇静, 孟晓彩, 谢娟, 基于 CDIO 教育理念的功课物理化学课程教学改革与实践[J], 邯郸职业技术学院学报, 2013, 26 (4): 74-76.
- [5] 顾樵, 量子力学 I[M], 北京: 科学出版社, 2014.
- [6] 曾谨言, 量子力学[M], 北京: 科学出版社, 2007.
- [7] 周世勋. 量子力学教程[M]. 北京: 高等教育出版社, 2009.
- [8] Wolfram S. MATHEMATICA[M]. 赫孝良, 周义仓, 译. 西安: 西安交通大学出版社, 2002.
- [9] 张韵华, 王新茂. Mathematica 7 实用教程[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2014, 8.
- [10] 顾樵, 数学物理方法[M], 北京: 科学出版社, 2012.
- [11] G.Baumann, Mathematica for Theoretical Physics: Electrodynamics, Quantum Mechanics, General Relativity, and Fractals[M], 北京: 科学出版社, 2011.
- [12] 董键, Mathematica 与大学物理计算[M], 北京: 清华大学出版社, 2010. 9.
- [13] 张永德. 量子力学. 2 版. 北京: 高等教育出版社, 2008.