方势垒

贡献者： addis

预备知识 无限深势阱，一维散射态的正交归一化

本文采用原子单位制．我们要解一维定态薛定谔方程（参考式 6）为

$$-\frac{1}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\psi \tag{1}$$

令方势垒长度为 $2l$，关于原点对称．势能函数为

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < -l) \\ V_0 & (-l \leqslant x < l) \\ 0 & (l \leqslant x) \end{cases} \tag{2}$$

一些教材把势垒放在区间 $[0, a]$，这时只需令 $a = 2l$，把解出的波函数做一个平移即可．以下讨论两种常见的解，一种类似于 $\sin(kx), \cos(kx)$ 另一种类似于 $\exp(\mathrm{i}kx), \exp(-\mathrm{i}kx)$．

1. 奇偶函数解

对称势能的好处是存在奇和偶的实函数解，且它们自动正交．

$E \geq V_0$ 的情况

令

$$k = \sqrt{2mE} \qquad b = \sqrt{2m(E - V_0)} \tag{3}$$

令对称解和反对称的波函数分别为

$$\psi_1^e(x) = \begin{cases} A_1\cos(bx) & (0 \leqslant x \leqslant l) \\ C_1\cos(kx) + D_1\sin(kx) & (l < x) \end{cases} \tag{4}$$

$$\left\{ \psi^e_{\mathbf{k}}(-x) \qquad (x<0) \right.$$

$$\psi^o_{\mathbf{k}}(x) = \begin{cases} B_2\sin(bx) & (0 \leqslant x \leqslant l)\\ C_2\cos(kx) + D_2\sin(kx) & (l < x)\\ -\psi^o_{\mathbf{k}}(-x) & (x<0) \end{cases} \tag{5}$$

其中 $l < x$ 的部分也可以分别记为

$$G_i \sin(kx + \phi_i) \qquad (i = 1, 2) \tag{6}$$

$$G_i = \sqrt{C_i^2 + D_i^2} \qquad \phi_i = \operatorname{Arctan}(C_i, D_i) \qquad (i = 1, 2) \tag{7}$$

在 $x = l$ 处匹配波函数和一阶导数，解得

$$\begin{cases} \dfrac{C_1}{A_1} = \cos(kl)\cos(bl) + \dfrac{b}{k}\sin(kl)\sin(bl)\\ \dfrac{D_1}{A_1} = -\dfrac{b}{k}\cos(kl)\sin(bl) + \sin(kl)\cos(bl) \end{cases} \tag{8}$$

$$\begin{cases} \dfrac{C_2}{B_2} = \cos(kl)\sin(bl) - \dfrac{b}{k}\sin(kl)\cos(bl)\\ \dfrac{D_2}{B_2} = \dfrac{b}{k}\cos(kl)\cos(bl) + \sin(kl)\sin(bl) \end{cases} \tag{9}$$

对波函数归一化使 $\int \psi'_k(x)\psi_k(x) = \delta(k'-k)$，令无穷远处振幅为 $1/\sqrt{\pi}$（定理 1），得

$$
\begin{aligned}
A_1 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\cos^2(bl) + (b^2/k^2)\sin^2(bl)}}\\
B_2 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\sin^2(bl) + (b^2/k^2)\cos^2(bl)}}
\end{aligned} \tag{10}
$$

$0 < E < V_0$ 的情况

令 $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}$

$$
\psi^e_{\mathbf{k}}(x) = \begin{cases} A_1 \cosh(\kappa x) & (0 \leqslant x \leqslant l)\\ C_1 \cos(kx) + D_1 \sin(kx) & (l < x) \end{cases} \tag{11}
$$

$$
\psi^o_{\mathbf{k}}(x) = \begin{cases} A_2 \sinh(\kappa x) & (0 \leqslant x \leqslant l)\\ C_2 \cos(kx) + D_2 \sin(kx) & (l < x) \end{cases} \tag{12}
$$

在 $x = l$ 处匹配波函数和一阶导数，分别得

$$
\begin{cases} A_1 \cosh(\kappa l) = C_1 \cos(kl) + D_1 \sin(kl)\\ \kappa A_1 \sinh(\kappa l) = -kC_1 \sin(kl) + kD_1 \cos(kl) \end{cases} \tag{13}
$$

$$
\begin{cases} A_2 \sinh(\kappa l) = C_2 \cos(kl) + D_2 \sin(kl)\\ \kappa A_2 \cosh(\kappa l) = -kC_2 \sin(kl) + kD_2 \cos(kl) \end{cases} \tag{14}
$$

解得

$$
\begin{cases} \dfrac{C_1}{A_1} = \cosh(\kappa l)\cos(kl) - \dfrac{\kappa}{k}\sinh(\kappa l)\sin(kl)\\ \dfrac{D_1}{A_1} = \cosh(\kappa l)\sin(kl) + \dfrac{\kappa}{k}\sinh(\kappa l)\cos(kl) \end{cases} \tag{15}
$$

$$
\begin{cases} \dfrac{C_2}{A_2} = \sinh(\kappa l)\cos(kl) - \dfrac{\kappa}{k}\cosh(\kappa l)\sin(kl)\\ \dfrac{D_2}{A_2} = \sinh(\kappa l)\sin(kl) + \dfrac{\kappa}{k}\cosh(\kappa l)\cos(kl) \end{cases} \tag{16}
$$

对波函数归一化，同样令无穷远处振幅为 $1/\sqrt{\pi}$ 得

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\cosh^2(\kappa l) + (\kappa/k)^2 \sinh^2(kl)}} \tag{17}$$

$$A_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\sinh^2(\kappa l) + (\kappa/k)^2 \cosh^2(kl)}} \tag{18}$$

2. 行波解

令左、中、右三个区间 exp 项的系数分别为 A, B、C, D、E, F. 左边右入射和出射，右边只有出射没有反射

$$\psi_{k,1}(x) = \begin{cases} A\exp(\mathrm{i}kx) + B\exp(-\mathrm{i}kx) & (x < -L)\\ C\exp(\mathrm{i}bx) + D\exp(-\mathrm{i}bx) & (-L \le x \le L)\\ F\exp(-\mathrm{i}kx) & (x < -L) \end{cases} \tag{19}$$

$$\psi_{k,2}(x) = \psi_{k,1}(-x) \tag{20}$$

要归一化只需满足 $A = 1/\sqrt{2\pi}$（式 19）.

$E > V_0$ 的情况

当 $E > V_0$ 时，系数解为

$$\begin{cases} A = 1/\sqrt{2\pi}\\ B = \mathcal{N}\cdot(k^2 - b^2)\sin(2bl)\exp(-\mathrm{i}kl)\\ C = \mathcal{N}\cdot \mathrm{i}k(k+b)\exp(-\mathrm{i}bl)\\ D = \mathcal{N}\cdot \mathrm{i}k(b-k)\exp(\mathrm{i}bl)\\ E = \mathcal{N}\cdot 2\mathrm{i}kb\exp(-\mathrm{i}kl) \end{cases} \tag{21}$$

其中

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{(k^2+b^2)\sin(2bl) - 2\mathrm{i}kb\cos(2bl)}{(k^2-b^2)^2\sin^2(2bl) + 4k^2b^2}\exp(-\mathrm{i}kl) \tag{22}$$

可以验证 $\psi_{k,1}, \psi_{k,2}$ 正交的条件（式 26） $\mathrm{Re}[B^* E] = 0$.

透射率，反射率分别为

$$T = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{4k^2b^2}{(k^2-b^2)^2\sin^2(2bl)+4k^2b^2} \tag{23}$$

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(k^2-b^2)\sin^2(2bl)}{(k^2-b^2)^2\sin^2(2bl)+4k^2b^2} \tag{24}$$

$0 < E < V_0$ 的情况

当 $0 < E < V_0$ 时，系数解为

$$\begin{cases} A = 1/\sqrt{2\pi} \\ B = \mathcal{N}\cdot(\kappa^2+k^2)\sinh(2\kappa l)\exp(-\mathrm{i}kl) \\ C = \mathcal{N}\cdot k(\mathrm{i}\kappa - k)\exp(-\kappa l) \\ D = \mathcal{N}\cdot k(\mathrm{i}\kappa + k)\exp(\kappa l) \\ E = \mathcal{N}\cdot 2\mathrm{i}k\kappa\exp(-\mathrm{i}kl) \end{cases} \tag{25}$$

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{(k^2-\kappa^2)\sinh(2\kappa l)-2\mathrm{i}k\kappa\cosh(2\kappa l)}{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2(2\kappa l)+4k^2\kappa^2}\exp(-\mathrm{i}kl) \tag{26}$$

$$T = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2(2\kappa l)+4k^2\kappa^2} \tag{27}$$

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(\kappa^2+k^2)\sinh^2(2\kappa l)}{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2(2\kappa l)+4k^2\kappa^2} \tag{28}$$

未完成：未完成：透射率反射率画图

投影系数

任意平方可积的波函数可以用正交归一化的行波展开为

$$\psi(x)=\int_0^{+\infty} C_1(k)\psi_{k,1}(x)+C_2(k)\psi_{k,2}(x)\,\mathrm{d}k \tag{29}$$

若 $\psi(x)$ 只在 $x<-L$ 不为零，则有

$$\begin{aligned}C_1(k)&=\langle\psi_{k,1}|\psi\rangle=\tilde\psi(k)+\sqrt{2\pi}B^*\tilde\psi(-k)\\C_2(k)&=\langle\psi_{k,2}|\psi\rangle=\sqrt{2\pi}E^*\tilde\psi(-k)\end{aligned} \tag{30}$$

其中 $\tilde\psi(k)$ 是 $\psi(x)$ 的傅里叶变换

$$\tilde\psi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x \tag{31}$$

具体例子见 “方势垒散射数值计算 ”，我们将把一个高斯波包展开为散射态的积分．