

# 有限深方势阱



贡献者: addis; \_Eden\_

- 本词条存在未完成的内容.

## 预备知识 定态薛定谔方程 [↗](#)

<sup>1</sup>本文使用原子单位制 [↗](#). 一维定态薛定谔方程式 [4](#) [↗](#) 为

$$-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (1)$$

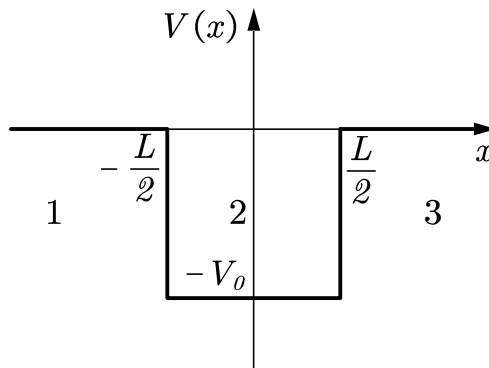


图 1: 有限深方势阱

令势能函数为

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (-L/2 \leq x \leq L/2) \\ 0 & (\text{其他}) \end{cases} \quad (2)$$

该势能叫做**有限深势阱 (finite square well)** .

有限深势阱既包含连续的本征态（散射态），一定包含有限个离散的束缚态（证明见下文）. 有限深势阱是研究一维散射问题的一个简单模型. 在这个问题中，束缚态的  $E < 0$ ，散射态的  $E > 0$ .

## 1. 束缚态

对于束缚态,  $E < 0$ , 而且  $E > V_{\min} = -V_0$ . 这可以用反证法来证明: 如果  $E < V_{\min}$ , 那么由定态薛定谔方程  $\frac{d^2\psi}{dx^2} = 2m[V(x) - E]\psi$  就会得出  $\psi$  和它的二次导数符号相同, 这种情况下波函数是不可归一化的. 因此我们有  $-V_0 < E < 0$ .

由于  $V(x)$  是对称的, 所以不失一般性, 我们假设波函数是奇函数或偶函数来简化问题 (式 9 [↗](#)) . 令

$$k = \sqrt{-2mE} \quad \kappa = \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (3)$$

第 1,3 区间的通解为 (在这个区间上  $V(x) > E$ )

$$\psi(x) = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx} \quad (4)$$

为了让无穷远处波函数可归一化, 所以

$$\psi_1(x) = A e^{kx} \quad \psi_3(x) = D e^{-kx} \quad (5)$$

第 2 区间的通解为 (在这个区间上  $V(x) < E$ )

$$\psi_2(x) = B \cos(\kappa x) + C \sin(\kappa x) \quad (6)$$

## 奇波函数

当波函数为奇函数时, 易得  $\psi(0) = 0$  即  $B = 0$ , 且  $A = -D$ . 再考虑  $x = L/2$  处波函数及一阶导数连续有

$$\begin{aligned} C \sin(\kappa L/2) &= D \exp(-kL/2) \\ \kappa C \cos(\kappa L/2) &= -kD \exp(-kL/2) \end{aligned} \quad (7)$$

其中可以把  $E$  看成未知量, 决定  $k, \kappa, C, D$  也是未知量. 两式相除得

$$-\cot(\kappa L/2) = k/\kappa \quad (8)$$

这是一个超越方程, 可能存在解. 解出后再次代入式 7 可以求得比值  $D/C$ . 归一化即可确定  $C, D$ . 现在我们尝试从图像上考察它可能的解.

利用 式 3 的关系, 将  $k$  用  $\kappa$  表示, 可以得到

$$-\cot(\kappa L/2) = \sqrt{2mV_0/\kappa^2 - 1} \quad (9)$$

设  $z = \kappa L/2$ , 我们可以在同一坐标系中绘制  $-\cot(x)$  和  $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$  的图像 ( $z_0 = L\sqrt{2mV_0}/2$ , 表征了势阱“大小”), 两个图像的每一个交汇点都对应着一个奇函数解. 图 2 显示了  $z_0 = 7$  的情况, 可以看到两个图像共有 2 个交点.

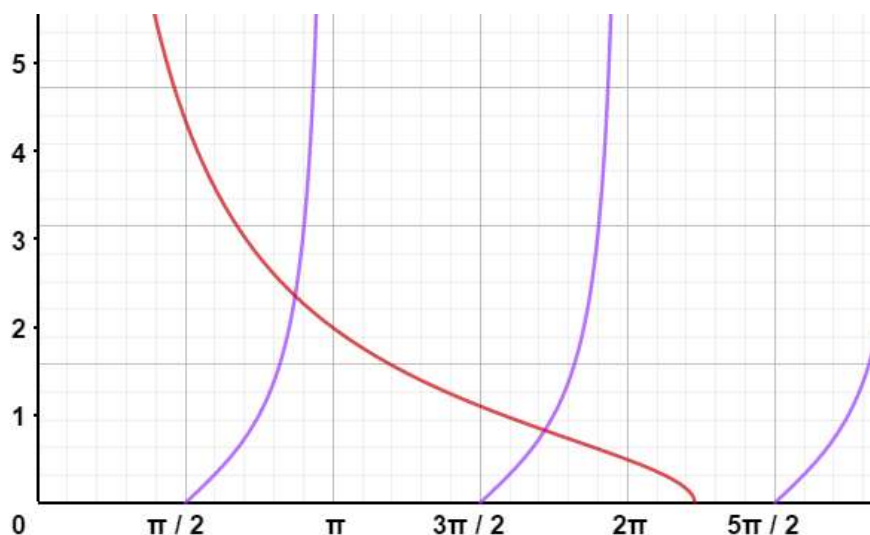


图 2: 方程  $-\cot z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$  的解,  $z_0 = 7$  的情况 (奇态)

对于宽深势阱 ( $z_0 = L\sqrt{2mV_0}/2$  很大), 两个图像一定有交. 特别是当  $z_0 \rightarrow \infty$  时, 交汇点的位置都可以近似为  $n\pi$  ( $n$  为正整数). 我们将在下面讨论偶波函数的时候具体分析这种情况. 对于浅窄势阱, 值得注意的是, 当  $z_0 < \pi/2$  时无解, 这可以从图像中看出. 但此时仍有偶函数解, 也就意味着至少存在一个束缚态. 这将在后面进行讨论.

## 偶波函数

当波函数为奇函数时, 易得  $\psi'(0) = 0$  即  $C = 0$ , 且  $A = D$ . 与奇函数的情况同理得

$$\begin{aligned} B \cos(\kappa L/2) &= D \exp(-kL/2) \\ \kappa B \sin(\kappa L/2) &= kD \exp(-kL/2) \end{aligned} \quad (10)$$

相除得

$$\tan(\kappa L/2) = k/\kappa \quad (11)$$

利用 式 3 的关系，将  $k$  用  $\kappa$  表示，可以得到

$$\tan(\kappa L/2) = \sqrt{2mV_0/\kappa^2 - 1} \quad (12)$$

设  $z = \kappa L/2$ ，我们可以在同一坐标系中绘制  $\tan(x)$  和  $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$  的图像（ $z_0 = L\sqrt{2mV_0}/2$ ，表征了势阱“大小”），两个图像的每一个交汇点都对应着一个偶函数解。图 3 显示了  $z_0 = 7$  的情况，可以看到两个图像共有 3 个交点。

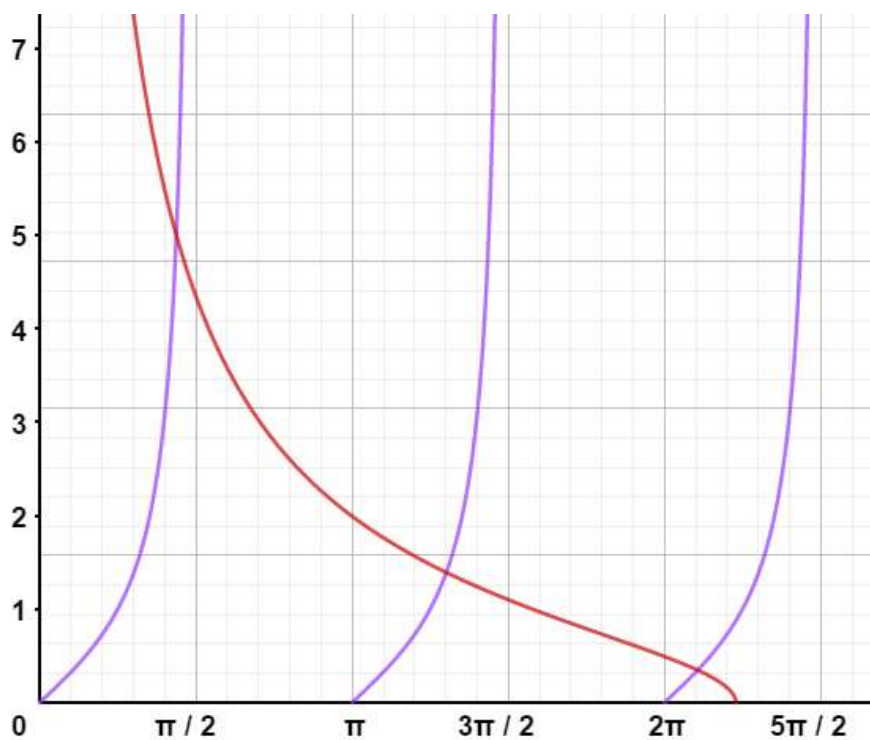


图 3：方程  $\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$  的解， $z_0 = 7$  的情况（偶态）

现在来考虑两种情况：

**1. 宽深势阱。** 即  $z_0 = L\sqrt{2mV_0}/2$  非常大。那么由图像可观察出，交汇点在略小于  $z_n = n\pi/2$ （ $n$  为奇数）的位置。所以有

$$E_n + V_0 \approx \frac{\pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (n = 1, 3, 5 \dots) \quad (13)$$

当  $V_0 \rightarrow \infty$  时，有限深势阱转化为无限深势阱，上式右侧刚好是一维无限深势阱 [🔗](#) 的能级（只包括了其中的一半，因为  $n$  是奇数。另一半来自于奇函数）。当  $V_0$  有限时，仅有有限多个束缚态。

**2. 浅窄势阱.** 当  $z_0$  降低时，束缚态越来越少，直到最后当  $z_0 < \pi/2$  时，仅存在一个束缚态。但无论势阱多么“浅小”，总是至少存在一个束缚态，这可以由图像看出。

## 2. 散射态

散射态的计算只需要把“方势垒 [🔗](#)”中  $E > V_0$  的情况下取  $V_0 < 0$  即可，这里不再赘述。

1. <sup>^</sup> 参考 Wikipedia [相关页面](#) 以及 [\[17\]](#)。

**致读者：** 小时百科一直以来坚持所有内容免费，这导致我们处于严重的亏损状态。长此以往很可能会最终导致我们不得不选择大量广告以及内容付费等。因此，我们请求广大读者[热心打赏](#) [🔗](#)，使网站得以健康发展。如果看到这条信息的每位读者能慷慨打赏 10 元，我们一个星期内就能脱离亏损，并保证在接下来的一整年里向所有读者继续免费提供优质内容。但遗憾的是只有不到 1% 的读者愿意捐款，他们的付出帮助了 99% 的读者免费获取知识，我们在此表示感谢。



友情链接：[超理论坛](#) | ©小时科技 保留一切权利