

# 一维有限深方势阱中的束缚态\*

陈晓云

(金陵科技学院理学院 江苏 南京 211169)

(收稿日期:2020-10-20)

**摘要:**主要对量子力学一维有限深方势阱中运动粒子的束缚态存在条件进行讨论,通过求解定态薛定谔方程,得到粒子运动满足的超越方程,借助于 Mathematica 软件求解该超越方程得到粒子的能级结构,对粒子束缚态存在条件进行分析.结果表明,对于在一维有限深对称方势阱中运动的粒子,总会有束缚态的存在,和势阱的宽度、深度及粒子的质量无关.而在半壁有限深势阱中运动的粒子,出现束缚态是有条件的,并且分别给出了在两种势阱中粒子存在多个束缚态需要满足的条件.

**关键词:**一维有限深方势阱 束缚态 定态薛定谔方程

## 1 引言

一维有限深方势阱中粒子的运动性质,一直是量子力学中的基础问题<sup>[1~3]</sup>.在所有量子力学教材中,如文献[1,2],都明确指出,一维有限深对称方势阱中运动的粒子至少存在一个束缚态,且不需要满足任何条件,但是在文献[3]中,作者认为一维有限深对称方势阱中运动的粒子存在束缚态需要满足一定的条件,该结论与量子力学教材的结论存在矛盾.本文指出了文献[3]存在的问题,同时给出了一维对称、一维半壁有限深势阱中运动的粒子存在多个束缚态满足的条件.

## 2 一维有限深方势阱中束缚态能级的求解

### 2.1 对称方势阱

一维有限深方势阱示意图如图1所示.

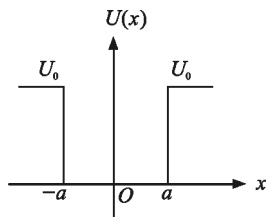


图1 一维有限深对称方势阱

考虑一个质量为  $m$  的粒子在一维有限深对称方势阱中的运动,对称方势阱可表示为

$$U(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a \\ U_0 & |x| > a \end{cases} \quad (1)$$

其中,  $2a$  为势阱的宽度,  $U_0$  为势阱深度.

在势阱内 ( $|x| \leq a$ ) 和势阱外 ( $|x| > a$ ), 薛定谔方程为

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi & (|x| \leq a) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi = E\psi & (|x| > a) \end{cases} \quad (2)$$

其中,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  ( $h$  为普朗克常量),  $\psi$  为粒子的运动波函数,  $E$  为粒子的能量, 本文只考虑束缚态情况, 所以,  $0 < E < U_0$ . 设

$$\begin{cases} k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \end{cases} \quad (3)$$

式(2)可化简为

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0 & (|x| \leq a) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} - k_2^2\psi = 0 & (|x| > a) \end{cases} \quad (4)$$

其中  $k_1, k_2$  均为大于零的实数. 方程(4)的通解为

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{k_2 x} + A_2 e^{-k_2 x} & (x < -a) \\ \psi_2(x) = B_1 \cos k_1 x + B_2 \sin k_1 x & (|x| \leq a) \\ \psi_3(x) = C_1 e^{k_2 x} + C_2 e^{-k_2 x} & (x > a) \end{cases} \quad (5)$$

$A_1, A_2, B_1, B_2, C_1, C_2$  为待定常数.

\* 国家自然科学基金理论物理项目“非淬火夸克模型下介子谱的研究”, 项目编号:11847145

考虑束缚态条件  $|x| \rightarrow \infty$  时,  $\psi(x) \rightarrow 0$ , 和波函数在  $x = \pm a$  处的连续性条件

$$\begin{cases} \psi_1(-a) = \psi_2(-a) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \end{cases} \quad (6)$$

$$\begin{cases} \psi'_1(-a) = \psi'_2(-a) \\ \psi'_2(a) = \psi'_3(a) \end{cases} \quad (7)$$

可得

$$\begin{cases} A_2 = 0 \\ C_1 = 0 \\ A_1 e^{-k_2 a} - B_1 \cos k_1 a + B_2 \sin k_1 a = 0 \\ B_1 \cos k_1 a + B_2 \sin k_1 a - C_2 e^{-k_2 a} = 0 \\ A_1 k_2 e^{-k_2 a} - B_2 k_1 \cos k_1 a - B_1 k_1 \sin k_1 a = 0 \\ B_2 k_1 \cos k_1 a - B_1 k_1 \sin k_1 a + C_2 k_2 e^{-k_2 a} = 0 \end{cases} \quad (8)$$

式(8)有非零解的充分必要条件是

$$\begin{vmatrix} e^{-k_2 a} & -\cos k_1 a & \sin k_1 a & 0 \\ k_2 e^{-k_2 a} & -k_1 \sin k_1 a & -k_1 \cos k_1 a & 0 \\ 0 & \cos k_1 a & \sin k_1 a & -e^{-k_2 a} \\ 0 & -k_1 \sin k_1 a & k_1 \cos k_1 a & k_2 e^{-k_2 a} \end{vmatrix} = 0 \quad (9)$$

化简得

$$(k_2^2 - k_1^2) \sin 2k_1 a + 2k_1 k_2 \cos 2k_1 a = 0 \quad (10)$$

方程(10)是能量  $E$  满足的超越方程, 可以用图解法进行求解. 为了无量纲化方程, 令  $E = U_0 \alpha, g = 2a$

$\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$ , 将方程(10)两边同时乘以  $4a^2$ , 得

$$(1 - 2\alpha) \sin(g\sqrt{\alpha}) + 2\sqrt{\alpha(1-\alpha)} \cos(g\sqrt{\alpha}) = 0 \quad (11)$$

式中  $g$  为常量, 且  $\alpha, g$  的量纲均为1. 对于束缚态, 因为  $0 < E < U_0$ , 所以  $\alpha$  的范围必为:  $0 < \alpha < 1$ .

### 2.2 半壁有限深方势阱

将1.1节中的  $U(x)$  换成下述式(12)的形式, 就可以考虑一质量为  $m$  的粒子在一维半壁有限深方势阱中的运动

$$U(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 \leq x \leq a) \\ U_0 & (x > a) \end{cases} \quad (12)$$

重复上述推导, 可以得到能量  $E$  满足的超越方程为

$$\sqrt{1-\alpha} \sin \frac{g\sqrt{\alpha}}{2} + \sqrt{\alpha} \cos \frac{g\sqrt{\alpha}}{2} = 0 \quad (13)$$

下面利用 Mathematica 软件用图解法求解超越方程(11)与(13).

### 2.3 图解法求解超越方程

令

$$f_1(\alpha) = (1 - 2\alpha) \sin(g\sqrt{\alpha}) + 2\sqrt{\alpha(1-\alpha)} \cos(g\sqrt{\alpha})$$

$$f_2(\alpha) = \sqrt{1-\alpha} \sin \frac{g\sqrt{\alpha}}{2} + \sqrt{\alpha} \cos \frac{g\sqrt{\alpha}}{2}$$

利用 Mathematica 的画图命令: `Plot[f(α), {α, 0, 1}]`, 可以得到函数  $f(\alpha)$  的图形如图2所示.

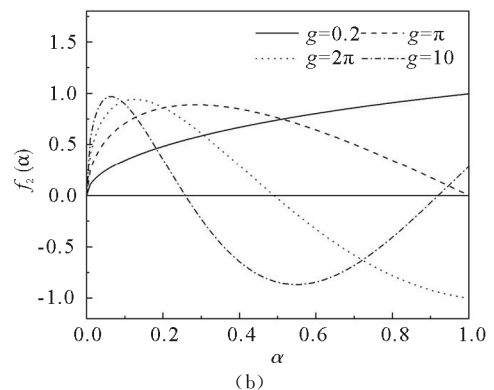
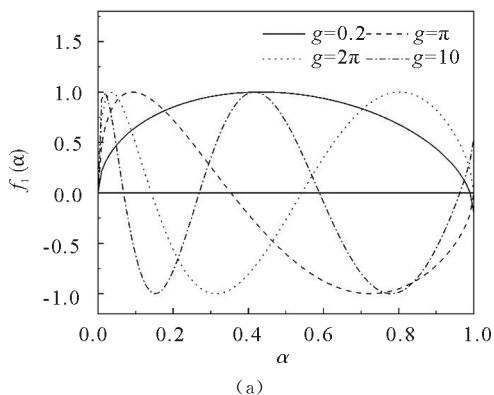


图2 不同  $g$  值下的  $f_1(\alpha)$  和  $f_2(\alpha)$  随  $\alpha$  的变化曲线

图2给出了当  $g$  取不同数值时, 函数  $f_1(\alpha)$  和  $f_2(\alpha)$  随着变量  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ) 的变化曲线图. 表1列出了对应于不同  $g$  值的对称势阱系统存在的束缚态能级.

表1 不同  $g$  值下一维有限深对称势阱存在的束缚态能级

$g$	0.2	2	$\pi$	4	7	10
$\alpha$	0.990 131	0.546 247	0.353 563	0.265 156	0.120 702	0.068 271
				0.898 225	0.466 273	0.269 514
					0.938 894	0.589 046
						0.962 869

从图2和表1,可以看到,随着 $g$ 值的增加,曲线与 $\alpha$ 轴的交点数目增多,即束缚态能级的个数随之增加,并且存在如下规律:

(1) 对于对称势阱,当 $0 < g \leq \pi$ 时,曲线 $f_1(\alpha)$ 与 $\alpha$ 轴有且仅有一个交点,即系统总是存在一个束缚态,当 $g \rightarrow 0$ 时, $\alpha \rightarrow 1, E \rightarrow U_0$ ,即对于很浅或很窄的势阱,基态能量越来越接近势阱的深度;对于半壁势阱,当 $g < \pi$ 时,曲线 $f_2(\alpha)$ 与 $\alpha$ 轴不存在交点,即系统不存在束缚态。

(2) 通过细致调节 $g$ 值的大小,可以得到如下规律:对于对称势阱,当 $\pi < g \leq 2\pi$ 时,曲线与 $\alpha$ 轴有两个交点,说明系统此时存在两个束缚态;当 $2\pi < g \leq 3\pi$ 时,系统存在3个束缚态……;对于半壁势阱,当 $\pi \leq g < 3\pi$ 时,曲线与 $\alpha$ 轴有一个交点,说明系统此时存在一个束缚态;当 $3\pi \leq g < 5\pi$ 时,系统存在两个束缚态……

因此我们可以看到,对于对称势阱,不需要满足任何条件,当 $g$ 取任意值时,即不管势阱的宽度、深度、粒子的质量取何值,粒子都会存在束缚态,且存在 $(n+1)$ 个束缚态的条件为

$$n\pi < g \leq (n+1)\pi \quad (14)$$

而对于半壁势阱,当且仅当 $g \geq \pi$ 时,才会有束缚态的出现,且运动粒子存在 $n$ 个束缚态的条件为

$$(2n-1)\pi \leq g < (2n+1)\pi \quad (15)$$

我们的结论和量子力学教材是一致的,但是式(14)和文献[3]的结论存在矛盾,通过对文献[3]的推导过程仔细检查后发现,在文献[3]中,利用三角函数和角公式将式(8)变成式(9)时出现了错误。正确的推导过程如下:

文献[3]中,式(8)和本文中式(10)的定义一致

$$(k_2^2 - k_1^2) \sin 2k_1 a + 2k_1 k_2 \cos 2k_1 a = 0$$

下面对该式进行化简。

$$\text{令 } b_1 = 2k_1 k_2, b_2 = k_2^2 - k_1^2, b_3 = \sqrt{b_1^2 + b_2^2}$$

则

$$\frac{b_1}{b_3} = \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \quad \frac{b_2}{b_3} = \frac{U_0 - 2E}{U_0}$$

定义

$$\sin \varphi = \frac{b_1}{b_3} = \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0}$$

所以

$$\varphi = \arcsin \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0}$$

$$\text{由于 } \arcsin \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \text{ 值域为 } \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right],$$

所以  $\cos \varphi > 0$

$$\cos \varphi = \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} = \frac{\sqrt{(2E - U_0)^2}}{U_0} =$$

$$\begin{cases} \frac{U_0 - 2E}{U_0} & E \leq \frac{U_0}{2} \\ \frac{2E - U_0}{U_0} & E > \frac{U_0}{2} \end{cases}$$

所以,当 $E \leq \frac{U_0}{2}$ 时

$$\begin{aligned} & \sin(2k_1 a + \varphi) = \\ & \sin 2k_1 a \cos \varphi + \cos 2k_1 a \sin \varphi = \\ & \frac{U_0 - 2E}{U_0} \sin 2k_1 a + \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \cos 2k_1 a \end{aligned}$$

即式(10)可化简为

$$\sin \left( 2k_1 a + \arcsin \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \right) = 0 \quad (16)$$

当 $E > \frac{U_0}{2}$ 时

$$\begin{aligned} \sin(2k_1 a - \varphi) &= \sin 2k_1 a \cos \varphi - \cos 2k_1 a \sin \varphi = \\ & \frac{2E - U_0}{U_0} \sin 2k_1 a - \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \cos 2k_1 a \end{aligned}$$

则式(10)可化简为

$$\sin \left( 2k_1 a - \arcsin \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \right) = 0 \quad (17)$$

在文献[3]中,对公式(8)进行化简时,仅仅考虑了 $E \leq \frac{U_0}{2}$ 这一种情况,得到了文献[3]中的式(9), $E > \frac{U_0}{2}$ 的情况未给予考虑。因此,文献[3]中对束缚态存在条件的推导存在错误。正确的解法,应如上述所示,在应用图解法求解方程(16)时,应只取 $E \leq \frac{U_0}{2}$ 的能级,在用图解法求解方程(17)时,应只取 $E > \frac{U_0}{2}$ 的能级,方可得到束缚态的所有能级。

在本文中,我们只需用图解法直接求解方程(10),即可得到区间 $(0, U_0)$ 的束缚态能级,无需将势阱 $U_0$ 划分成两个区间,这样使得问题更简单更明了。

### 3 结束语

本文对一维有限深对称方势阱和半壁势阱中运

动粒子的束缚能存在的条件进行了探究,计算结果表明,对于一维有限深对称方势阱,粒子束缚能的存在与势阱的宽度、深度和粒子的质量无关,肯定会有束缚态的存在;而在半壁势阱中,束缚态的出现是有条件的.这个条件可以用来解释原子分子物理中的现象,即两个粒子之间存在吸引不一定能够形成束缚态.因为我们在解两体问题的时候,引入雅可比坐标将两体问题化成单体问题时,在中心立场下,考虑基态情况,在球坐标系中,此时系统满足的薛定谔方程和一维半壁有限深势阱满足的方程一致.因此,即

使这两个粒子之间存在吸引,也不一定能够形成束缚态.并且,分别给出了在两种势阱中运动的粒子存在  $n$  个束缚态的条件,指出了早期文献存在的问题.

### 参考文献

- 1 曾谨言.量子力学卷 I (第4版)[M].北京:科学出版社,2006.65~74
- 2 L. I. Schiff. Quantum Mechanics(First Edition)[M]. McGraw-Hill Book Company, 1949.36~38
- 3 王磊.一维有限深方势阱中束缚态存在条件的求解[J].菏泽学院学报,2014,36(2):36~38

## Bound States in One Dimensional Square Well with Finite Depth

Chen Xiaoyun

(Science of College, Jinling Institute of Technology, Nanjing, Jiangsu 211169)

**Abstract:** In the paper, we mainly discuss the existence conditions of bound state for a particle moving in one-dimension finite square well and the uncertainty principle. A transcendental equation for the energy of the particle is obtained by solving the Schrödinger equation. The equation is solved and the energy levels are obtained with the help of software Mathematica. Besides, we analyze the existence of the bound states. Our results show that there is always one bound state for the particle in one-dimension symmetric finite square well, no matter how shallow or narrow the well becomes and no matter what the mass of the particle is. Whereas there exists condition for a particle moving in a half finite square well. What's more, we give the conditions for the existence of numbers of the bound states in these two square well, respectively.

**Key words:** one-dimension finite square well; bound state; stationary Schrödinger equation

(上接第18页)

人才培养模式的要求出发,根据光电信息科学与工程专业的学科交叉性特点,构建了一种更加适合当前新工科应用需求的课堂内外相结合的光电信息科学与工程专业人才培养模式.该模式将课堂内外结合,从培养目标、课程体系、评价体系、课外拓展等方面入手,充分激发学生学习的积极性和参与创新性活动的主观能动性,提升学生专业素养的同时提升学生的创新能力,为学生后续进入社会增加竞争力,以满足当前新工科形势下的人才培养模式的创新性要求.项目研究的受益面不仅适合于山西大同大学光电信息科学与工程专业学生的培养,而且也适合于所有高等学校光电信息科学与工程专业学生的培养,同时还能为其他工科专业学生的培养提供借鉴和参考.

### 参考文献

- 1 林健.面向未来的中国新工科建设[J].清华大学教育研

究,2017,38(2):26~35

- 2 徐学锋,邓广涛,李东印,等.基于采矿工程实践作品大赛的科教结合新工科协同育人理念与探索.教育现代化,2019(34):3~5
- 3 中华人民共和国教育部.教育部办公厅关于公布首批“新工科”研究与实践项目的通知[Z].2018-07-03
- 4 <https://baike.baidu.com/item/%E6%96%B0%E5%B7%A5%E7%A7%91>
- 5 庞永师,林昭雄,陈德豪,等.应用型人才创新能力培养模式探索[J].高等工程教育研究,2008(2):145~148
- 6 宇纓,胡天明,侯爱民.应用型IT人才创新能力培养模式的研究[J].教育探索,2007(10):135~136
- 7 牟海维,孙鉴,张勇,等.光电子技术创新人才培养模式的研究与实践[J].长春理工大学学报,2010(7):164~166
- 8 彭正宇,刘红梅.大学素质教育中的社会性创新能力的培养[J].教育现代化,2016(7):14~15