2.1.4 有限深势阱

我们设阱外$V=V_0$，阱内仍然$V=0$. 可以理解为盒子硬度有限，但仍有$E<V_0$.

经典物理告诉我们：粒子如果能量$E=\frac{p^2}{2m}<V_0$，会被限制在盒子内； 与无限深没有区别。 如果$E=\frac{p^2}{2m}>V_0$，会离开盒子，自由运动。

下面我们看量子力学的结论怎样的。

考虑束缚定态$\Psi(x,t)=\psi_E(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$. （下面$\psi_E(x)$简写为$\psi$).

首先考虑阱内. 波函数满足

$$\psi''+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0. \tag{2.62}$$

由于势能在所有地方大于或等于零，所以$E>0$. 令$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, 解可以选实函数$\cos kx$和$\sin kx$的叠加，不选$e^{\pm ikx}$。

再考虑阱外：

$$\psi''+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi=0 \tag{2.63}$$

考虑$E<V_0$，与经典不同，我们不能武断认为

$$\psi(|x|>\frac{a}{2})=0 \tag{2.64}$$

令$k'=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

$$\psi''-k'^2\psi=0 \tag{2.65}$$

考虑到有物理意义的解在无穷远处不能发散，所以取

$$\psi=\begin{cases}Ae^{-k'x} & x>\frac{a}{2}\\ Be^{k'x} & x<-\frac{a}{2}\end{cases} \tag{2.66}$$

再考虑到束缚态解必须有宇称性, 两种可能: $A=B$，偶宇称；$A=-B$，奇宇称。

A 偶宇称解：

$$内\cos kx\,,外:\begin{cases}Ae^{-k'x} & x>\frac{a}{2}\\ Ae^{k'x} & x<-\frac{a}{2}\end{cases} \tag{2.67}$$

根据前面的定理：ψ，ψ'在$|x|=\frac{a}{2}$处连续:

$$\begin{aligned}\psi'|_{x=\frac{a}{2}-0^+} &= \psi'|_{x=\frac{a}{2}+0^+}\\ \psi|_{x=\frac{a}{2}-0^+} &= \psi|_{x=\frac{a}{2}+0^+}\\ (\ln\psi)'|_{x=\frac{a}{2}-0^+} &= (\ln\psi)'|_{x=\frac{a}{2}+0^+}\\ (\ln\cos kx)'|_{x=\frac{a}{2}} &= (\ln e^{-k'x})'\Big|_{x=\frac{a}{2}}\end{aligned} \tag{2.68}$$

$$-\frac{k\sin k\frac{a}{2}}{\cos k\frac{a}{2}}=-k' \tag{2.69}$$

$$\frac{ak}{2}\tan\frac{ka}{2}=\frac{k'a}{2} \tag{2.70}$$

令$\xi=\frac{ka}{2}$，$\eta=\frac{k'a}{2}$

$$\begin{cases}\xi\tan\xi=\eta\\ \xi^2+\eta^2=\frac{k^2a^2}{4}+\frac{k'^2a^2}{4}=\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{a^2}{4}+\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\frac{a^2}{4}=\frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\end{cases} \tag{2.71}$$

讨论:

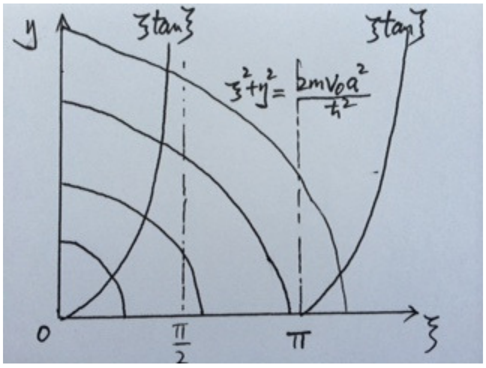

Figure 2.3: 式(2.71)的图解

- 交点给出E
- 深且宽, 井内能束缚住更多的量子态（波函数）. 无限深势井是极限情况.
- 浅而窄, 束缚态少，但是最少也有一个.

B 奇宇称解：

$$\text{内} \sin kx \ \text{外} \begin{cases} Ae^{-k'x} & x > \frac{a}{2} \\ -Ae^{k'x} & x < -\frac{a}{2} \end{cases} \tag{2.72}$$

大家自行讨论。

2.2 δ势阱

对于有限深势阱, 我们还可以规定阱内$V=-V_0$，阱外$V=0$. (因为势能零点可以任意选取). 那么:

$$\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx = -V_0 a \text{ (定义为}-\gamma). \tag{2.73}$$

若$V_0\to\infty, a\to 0$，但$V_0 a=\gamma$不变, 则我们可以把势能函数写为

$$V(x) = -\gamma\delta(x). \tag{2.74}$$

粒子的定态方程为:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{2.75}$$

$$\psi'' + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\delta(x)\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{2.76}$$

在$x\neq 0$处，$V=0$, 所以

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{2.77}$$

考虑束缚态 $E<V(\infty)=0$，令$\beta=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$

$$\psi'' - \beta^2\psi = 0 \tag{2.78}$$

方程的解为

$$\psi = e^{\pm\beta x}. \tag{2.79}$$

由于束缚态要求$x\to\pm\infty, \psi_E$有限, 所以

$$\psi_E = \begin{cases} C_1 e^{-\beta x} & x>0 \\ C_2 e^{\beta x} & x<0 \end{cases} \tag{2.80}$$

势能是偶宇称的，因此我们可以要求解有宇称性:

首先考虑偶宇称解: $\psi_E(x)=\psi_E(-x)$. 这就要求$C_1=C_2=C$.

在原点附近对(2.76)积分

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\left[\psi'' + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\delta(x)\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi\right]dx = \psi'(0^+) - \psi'(0^-) + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0) = 0 \tag{2.81}$$

那么

$$-\beta C e^{-\beta x}\big|_{0^+} - \beta C e^{\beta x}\big|_{0^-} = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}C \tag{2.82}$$

即

$$2\beta C = \frac{2m\gamma C}{\hbar^2} \tag{2.83}$$

因而

$$\beta^2 = (\frac{m\gamma}{\hbar^2})^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \tag{2.84}$$

我们发现束缚态是唯一的，其能量为

$$E = \frac{-m\gamma^2}{2\hbar^2} \tag{2.85}$$

根据归一化要求，可以算出: $C=\sqrt{\beta}$.

再来考虑奇宇称解, 这要求$C_1=-C_2=C$，由于$\psi(x)$处处连续，在$x=0$处

$$Ce^{-\beta x}|_{0^+} = -Ce^{\beta x}|_{0_-}. \tag{2.86}$$

因此$C=0$， 这说明没有奇宇称的束缚态。