

文章编号: 1000-0364(2008)05-1039-06

# 一维双势阱问题的理论研究

梁霞霞, 李冀光, 董晨钟

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

**摘要:** 利用数值计算的方法求解了一维理想双势阱模型的基态及低激发态能级和相应的波函数, 将双势阱之间的间距、双势阱的相对深度和双势阱的宽度与实际的物理问题建立了联系, 并分析了它们对一维双势阱的能级和相应波函数的影响, 定性地模拟了双原子分子和原子中的双势阱问题.

**关键词:** 一维双势阱; 能量本征值; 本征函数; 差分法

**中图分类号:** O56 **文献标识码:** A

## Investigation of one-dimension double-potential well

LIANG Xia-Xia, LI Ji-Guang, DONG Chen-Zhong

(College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

**Abstract:** We calculated the energy levels and wave functions for ideal one-dimension double-potential well by numerical method. Furthermore, we analyzed the effects of the width, the depth of double-potential well and the distance between the two well on the energy levels and wave functions, and found the relations with actual physical quantity.

**Key words:** one-dimension double-potential well, energy level, wave function, numerical method

## 1 引言

双势阱是量子体系中经常出现的一种势模型. 例如, 双原子分子中两个原子的原子核形成的库仑势, 某些过渡和稀有元素的  $d$  电子和  $f$  电子受到的有效势(如图 1(a) 所示<sup>[1]</sup>) 等就属于这种情况. 在最简单的双原子分子中, 电子受到的势场是两个库仑势阱, 其形状的变化是由于形成分子的原子的核电荷数不同造成的. 如果两个原子的核电荷数相等, 即等核双原子分子, 那么这个势场是一个对称的双势阱; 如果两个原子的核电荷数不等, 即异核双原子分子, 这时的势场是一个非对称双势阱. 在原子中, Mayer 在 1941 年就发现某些镧系原子的  $4f$  电子轨道和铀系原子的  $5f$  电子轨道的轨道平

均半径有明显减小的情况<sup>[2]</sup>, 后来的研究发现这是由于  $4f$  或  $5f$  轨道上的电子受到的势场与其它轨道上的电子受到的势场不同造成的<sup>[2]</sup>. 这时,  $f$  电子受到的势场有一个明显的特点, 即它是一个双势阱, 内外势阱被一势垒隔开. 外势阱为一长程库仑势, 可以存在无限多个束缚态; 内势阱比较窄, 并且随着电离度或原子序数的增加逐渐加深变宽, 同时两势阱中间的势垒也逐渐降低. 其它的研究也发现过渡元素的  $d$  轨道上的电子也会有类似的情况发生. 由于  $d$  轨道和  $f$  轨道受到的双势阱势与一般的库仑势的性质不同, 使得处于这些轨道上的电子的性质与其他轨道上的电子有很大不同, 这也使它们成为原子物理理论研究中感兴趣的前沿问题之一<sup>[3,4]</sup>.

收稿日期: 2007-09-30

基金项目: 国家自然科学基金 (10376026, 10434100)

作者简介: 梁霞霞 (1983 - ), 女, 甘肃静宁人, 西北师范大学物理与电子工程学院 2002 级本科生.

通讯作者: 董晨钟. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

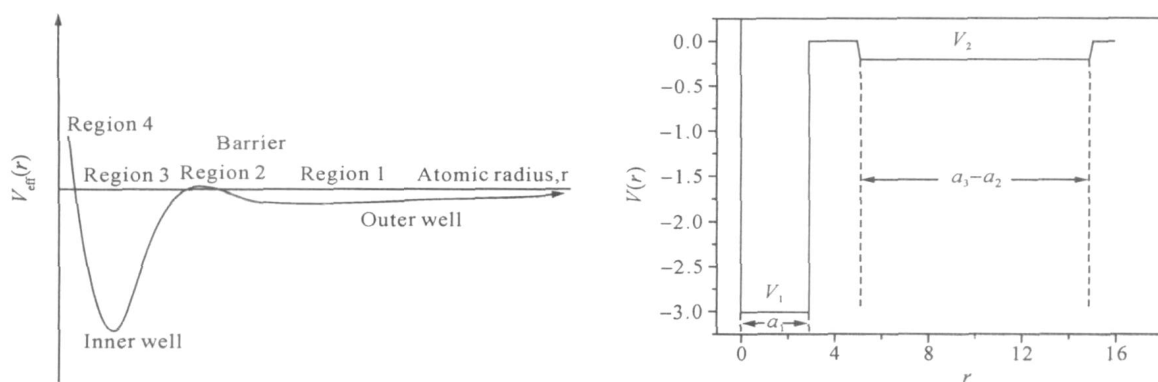


图 1 (a) 原子中的双势阱, (b) 简化的双势阱模型

Fig. 1 (a) Double-potential well in atom, (b) Simple model of double-potential well

为了克服在直接求解这些具体问题过程中的困难,直观的分析这些系统的物理规律,这里,我们将具体问题中的双势阱简化成了理想的一维双势阱(如图 1(b)所示),通过简单地调整双势阱之间的间距、双势阱的相对深度和双势阱的宽窄这几个与实际问题相关的物理参数,讨论了不同情况下的双势阱的能级结构及相应的本征函数,并分析了这些参数的物理意义,定性的研究了双原子分子和原子中的双势阱问题,为更深入地研究某些双原子分子和一些原子中的  $d$  和  $f$  轨道的电子性质提供了一种简便途径.

## 2 双势阱模型及其数值求解

根据图 1(b)中所示的一维双势阱模型,其势的形式可以表示成:

$$V(x) = \begin{cases} -V_1, & 0 \leq x \leq a_1 \\ -V_2, & a_2 \leq x \leq a_3 \end{cases} \quad (1)$$

其中  $V_1, V_2$  为任意正数. 在这个简化后的理想双势阱模型下,体系所满足的薛定谔方程可以写为

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x), \quad (2)$$

其中  $\mu$  为粒子质量. 我们取坐标区间为  $[0, a_3]$ , 则在这个区间上波函数满足的边界条件为:

$$\begin{cases} \psi(0) = 0 \\ \psi(a_3) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

因为  $V_1, V_2$  都是有限的,因此波函数  $\psi(x)$  和它的一阶导数在整个区间上是连续的,利用均匀差分法,可将这个区间坐标进行等距划分,分点为:

$$x_i = ih, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad (4)$$

其中  $h$  为步长,  $h = \frac{a_3}{n}$ .

在每个节点  $x_i$  上,方程(2)在一阶近似下表示成:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{h^2} \psi_{i-1} + \left[ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{h^2} + V(x_i) \right] \psi_i - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{h^2} \psi_{i+1} = E \psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (5)$$

为了计算的方便,我们取自然单位  $\mu = \hbar = 1$ (本文均采用此单位).

令  $b_i = \frac{1}{h^2} + V(x_i), c_i = -\frac{1}{2h^2}$ , 于是方程(5)可化为:

$$c_i \psi_{i-1} + b_i \psi_i + c_{i+1} \psi_{i+1} = E \psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (6)$$

将上式进一步用矩阵的形式表示为:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ c_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_3 & b_3 & c_3 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_{n-2} & b_{n-2} & c_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & c_{n-1} & b_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_{n-2} \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_{n-2} \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (7)$$

这样我们就将求解薛定谔方程 (2) 的特征值转化为求解方程 (7) 的特征值问题. 在具体的数值计算中, 我们通过直接对角化这个系数矩阵得到体系的能量本征值及相应的本征函数.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 双原子分子中的双势阱及基态波函数的特性

在双原子分子形成的势阱中, 核电荷数的不同可以反映在两势阱的深度上, 两原子核之间的距离则可由两势阱间的距离来体现. 这样我们在不同势阱深度的情况下, 通过变动两势阱之间的距离可以近似地反映双原子分子形成这一物理规律.

我们以单电子双原子分子离子为例, 首先在双势阱的相对深度相同  $V_1 = V_2 = 5$ , 内外势阱的宽度相同 ( $a_1 = a_3 - a_2 = 2$ ) 的情况下, 讨论不同的势阱间距对基态波函数的影响, 结果如图 2 所示. 从图中我们可以看书, 在两势阱的间距从 4 减小到 0.01 的过程中, 电子出现在外势阱中的几率在不断的增大, 并逐渐形成一个对称的双峰基态波函数.

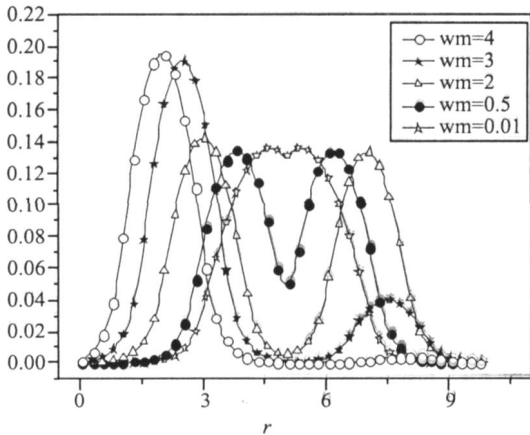


图 2 相同势阱深度 ( $V_1 = V_2 = 5$ ) 下, 不同的势阱间距中的基态波函数 (wm 表示势阱间距)

Fig. 2 Ground state wavefunction for double-potential well with different interval between individual well ( $V_1 = V_2 = 10$ ) (wm represents the separation between the individual well)

进一步, 我们讨论在内外势阱的宽度相同 ( $a_1 = a_3 - a_2 = 2$ ), 深度不同的双势阱 ( $V_1 = 10, V_2 = 9.8$ ) 情况下, 不同的势阱间距对基态波函数的影响. 如图 3 所示, 我们将间距从 2 减小到 0.01 的过程中, 电子出现在外势阱中的几率在不断的增大,

但与上面情况不同的是, 这时的基态波函数并不是对称的双峰.

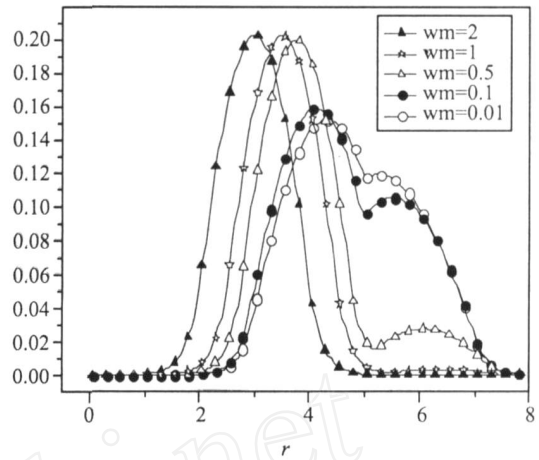


图 3 不同势阱深度 ( $V_1 = 10, V_2 = 9.8$ ) 下, 不同的势阱间距中的基态波函数 (wm 表示势阱间距)

Fig. 3 Ground state wavefunction for double-potential well with different interval between individual well ( $V_1 = 10, V_2 = 9.8$ ) (wm represents the separation between the individual well)

从上面展示的基态波函数的变化中可以可出, 对于由核电荷数相同的原子形成的分子, 由于它们具有相同的势阱深度, 当势阱间距很小 (如间距为 0.01), 即两原子之间的距离很近时, 可以形成分子. 而对于由核电荷数不同的原子形成的分子, 由于它们的势阱深度不同, 只有在更小的势阱间距下才可能形成分子, 而且这时的基态波函数并不像在核电荷数相同的原子形成的分子中的基态波函数具有对称的双峰结构, 电子在核电荷数较大的原子附近出现的几率较大.

#### 3.2 原子中的双势阱及基态和低激发态波函数的特性

原子中的  $d$  和  $f$  轨道上的电子感受到的有效势场是由原子核和其余电子形成的库仑势以及自身的离心势共同决定的. 一般而言它是一个双势阱, 其余电子的变化 (激发或电离) 将对这个势阱的形状 (内外势阱的宽度和深度) 有直接的影响. 下面我们通过改变势阱的深度和宽度, 模拟不同电子组态构成下形成的双势阱, 并将讨论它们对这些势阱中的电子的能级结构和相应的波函数的影响.

##### 3.2.1 内势阱宽度的变化对电子的能级结构和相应的波函数的影响

我们首先选取  $V_1 = 10, V_2 = 8$  的双势阱, 固

定双势阱之间的间距(间距为1),外势阱的宽度(宽度为3)不变的情况下,调整内势阱的宽度,这时电子的基态能级和相应的本征函数的变化情况如图4所示.从图4中可以看出,随着内势阱宽度的不断变窄,基态能级不断的升高;而对于波函数,在内势阱中的基态波函数不断的向内势阱方向塌缩,但当内势阱的宽度减小到某一临界值时,随着内势阱宽度减小基态波函数会突然从内势阱外扩到外势阱中.内势阱宽度减小到某一临界值时基态波函数会突然从内势阱外扩到外势阱中的原因可以从测不准关系  $x \cdot p = \frac{\hbar}{2}$  定性的得到(假定双势阱中两个势阱的相互影响很小),当内势阱很窄时,基态能级将比内势阱深,这时内势阱不能承载基态,因此内势阱中的波函数会突然外扩到外势阱里.

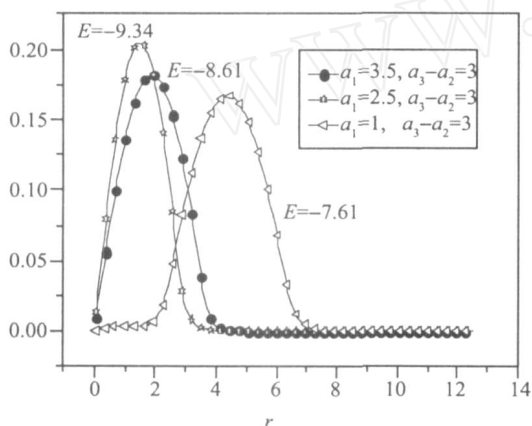


图4  $V_1 = 10, V_2 = 8$  时不同内势阱宽度下的基态能级和基态波函数

Fig. 4 Ground state energy and wavefunction for double potential well with different width ( $V_1 = 10, V_2 = 8$ )

我们还选取了  $V_1 = 10, V_2 = 2$  的双势阱,在保持双势阱之间的间距(间距为1)和外势阱的宽度(宽度为3)不变的情况下,调整内势阱的宽度,我们发现这时在内势阱中的基态波函数也会随着内势阱宽度的不断变小逐渐向内势阱方向移动;与前一种情况相似,当内势阱宽度减小到某一值时,基态波函数会从内势阱外扩到外势阱中,如图5所示.

这两种不同势阱深度下内势阱的宽度对基态波函数的影响的明显区别在于基态波函数从内势阱外扩到外势阱的临界值不同,并且内外势阱的相对深度小时,基态能级高.

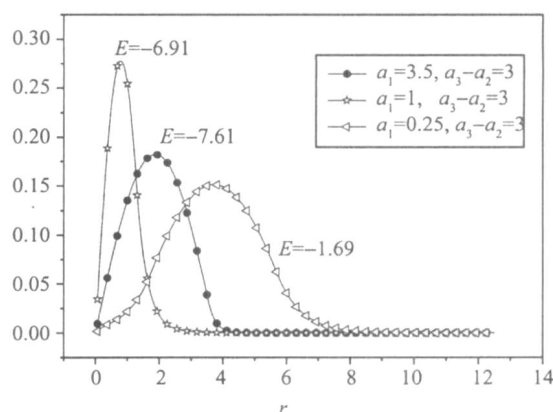


图5  $V_1 = 10, V_2 = 2$  时不同内势阱宽度下的基态能级和基态波函数

Fig. 5 Ground state energy and wavefunction for double potential well with different width ( $V_1 = 10, V_2 = 2$ )

### 3.2.2 外势阱宽度的变化对电子的能级结构和相应的波函数的影响

在双势阱的相对深度  $V_1 = 10, V_2 = 8$ ,内势阱的宽度为1的情况下,我们讨论了外势阱的宽度对能级结构和波函数的影响.我们发现随着外势阱的宽度不断变窄,基态能级逐渐升高,对应的能量本征函数均向内势阱方向偏移,当达到某一临界值时,基态波函数会从外势阱塌缩到内势阱中,如图6所示.

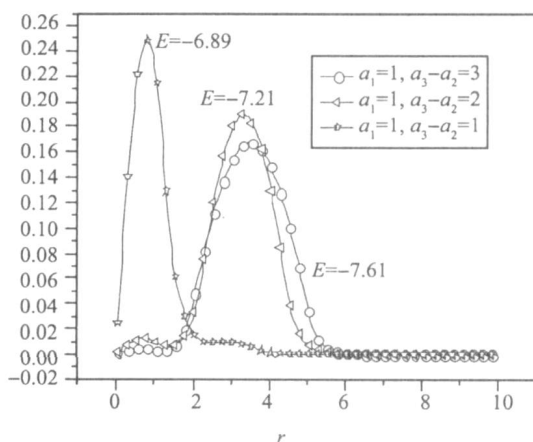


图6  $V_1 = 10, V_2 = 8$  时不同外势阱宽度下的基态能级和基态波函数

Fig. 6 Ground state energy and wavefunction for double potential well with different width of outer well ( $V_1 = 10, V_2 = 8$ )

在  $V_1 = 10, V_2 = 2$ , 内势阱的宽度为 1, 势阱相对深度较大的双势阱中, 在外势阱的宽度不断变窄的过程中, 基态本征函数始终处于内势阱中, 只是稍向原点移动, 如图 7 所示.

与势阱相对深度较小时相比, 势阱相对深度较大时基态波函数始终在内阱中, 并不会出现波函数塌缩现象.

### 3.2.3 双势阱的相对深度对电子的能级结构和相应的波函数的影响

在图 8 中, 我们讨论了当内势阱宽度为 1, 外

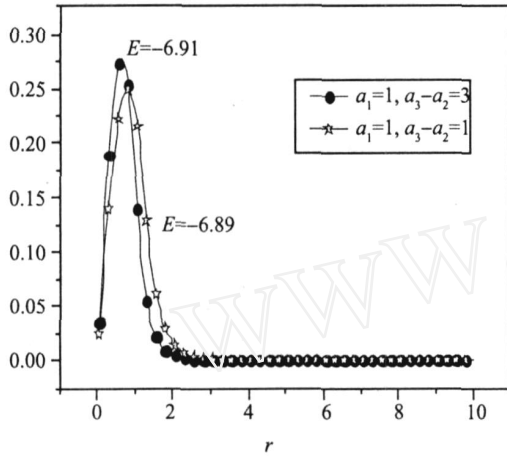


图 7  $V_1 = 10, V_2 = 2$  时不同外势阱宽度下的基态能级和基态波函数

Fig. 7 Ground state energy and wavefunction for double-potential well with different width of outer well ( $V_1 = 10, V_2 = 2$ )

势阱宽度为 3, 内外两势阱之间的间距为 1, 内势阱深度为 10 时, 基态波函数随着外势阱的变深的变化规律. 我们发现, 随着外势阱变深, 电子的波函数将从内势阱外扩到外势阱中, 并且基态能级在不断的降低.

进一步我们也讨论了外势阱的深度对第一、第二激发态的波函数的影响, 如图 9(a)、(b) 所示. 从图中可以看出, 当内势阱的深度为 10, 外势阱的深度从 2 降到 8 时, 第一激发态的能级在不断的降

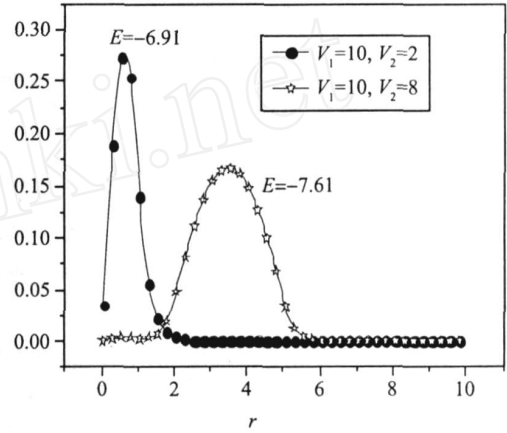


图 8  $V_1 = 10$  时不同外势阱深度下的基态能级和基态波函数

Fig. 8 Ground state energy and wavefunction for double-potential well with different depth of outer well ( $V_1 = 10$ )

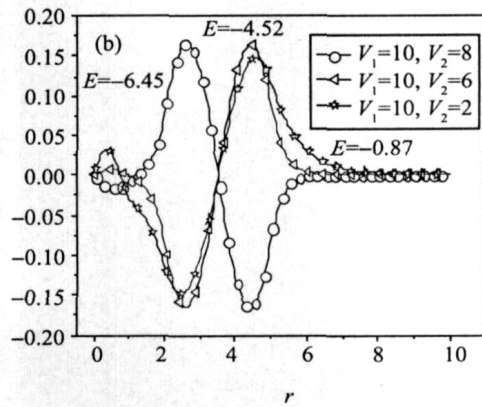
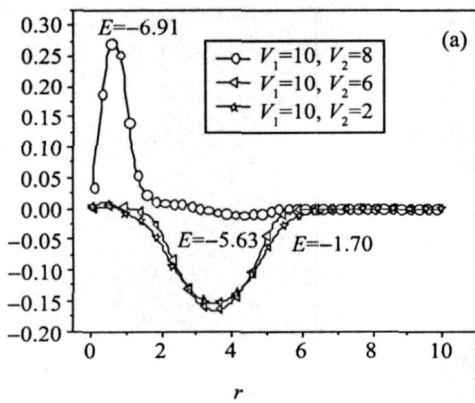


图 9  $V_1 = 10$  时不同外势阱深度下的激发态能级和激发态波函数

(a) 第一激发态的能级和波函数; (b) 第二激发态的能级和波函数

Fig. 9 Excited state energy and wavefunction for double-potential well with different depth of outer well ( $V_1 = 10$ ) (a) Energy and wavefunction of the first excited state, (b) Energy and wavefunction of the second excited state

低,相应的波函数的位置、振幅和相位都发生了明显的变化;第二激发态的能级也在不断的降低,且相应的波函数也有一个明显的相位变化。

可见,相对深度较小时波函数经常出现在更宽的势阱中,并且这时的能级较高;相对深度较大时,波函数一般出现在势阱深的一边,但是这时的能级比较低。

## 4 结 语

本文利用数值计算方法,通过求解理想一维双势阱模型的能级和波函数,系统的研究了与双原子分子的形成和原子中  $d$  和  $f$  轨道上的电子波函数塌缩有直接关系的几个参数,即双势阱之间的间距及双势阱的相对深度和双势阱的宽窄的变化对系统的能级和波函数的影响。结果表明:

(1) 当内外势阱宽度和两势阱的相对深度不变时,减小双势阱之间的间距,基态波函数会出现对称的双峰结构,相对深度的变化引起了基态波函数的不对称性和键长;

(2) 双势阱中两势阱的相对深度越大,内外势阱的宽度变化对基态波函数和能级的影响越小;

(3) 相对深度较小时波函数经常出现在更宽的势阱中,并且这时的能级值较高;相对深度较大时,波函数一般出现在势阱深的一边,但是这时的

能级值比较低。

## 参考文献:

- [1] Lipson R H, Hu X K, Mitchell J B A, *et al.* State-dependent associative ionization in xenon [J]. *Phys. Rev. A*, 2003, 68: 012717
- [2] Mayer M G. Rare-Earth and Transuranic Elements [J]. *Phys. Rev.*, 1941, 60: 184
- [3] Migdalck J, Siegel W. Collapse of  $d$  and  $f$  orbitals in the isoelectronic sequence of single ionized ytterbium [J]. *Phys. Rev. A*, 2000, 61: 062502
- [4] Luo Y E, Dong C Z, Xie L Y, *et al.* Theoretical study on  $f$ -wavefunction of ions along xenon isonuclear and isoelectronic sequence [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2008, 25: 25 (in Chinese) [罗月娥, 董晨钟, 颌录有, 等. Xe 原子的等核及等电子系列离子径向波函数性质的研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2008, 25: 25]
- [5] Zeng J Y. *Quantum mechanics* [M]. Beijing: Science Press, 1997: 12 (in Chinese) [曾谨言. 量子力学 [M]. 北京: 科学出版社, 1997: 12]
- [6] Chu S L. *Atomic physics* [M]. Beijing: Higher Education Press, 1997: 7 (in Chinese) [褚圣麟. 原子物理学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1979: 6]
- [7] Wei Y Q, Zhang J Q, Zhang H B. *The method of numerical calculation* [M]. Beijing: Science Press, 2004: 12 (in Chinese) [魏毅强, 张建强, 张洪斌. 数值计算方法 [M]. 北京: 科学出版社, 2004: 12]