

零势场中变质量粒子的束缚能谱

戴满媛^{1)†} 聂义友¹⁾ 桑明煌¹⁾ 王贤平¹⁾ 殷 澄²⁾ 曹庄琪²⁾

1) (江西师范大学物理系, 南昌 330022)

2) (上海交通大学物理系, 上海 200240)

(2009 年 11 月 17 日收到; 2010 年 3 月 2 日收到修改稿)

结合点正则变换 (PCT) 与分析转移矩阵 (ATM) 两种方法, 得到了零势场中变质量粒子的束缚能谱. 通过计算变质量粒子穿透零势场的概率, 发现并解释了透射谱中共振峰与本征能量的一一对应关系.

关键词: 变质量, 零势场, 束缚能谱, 透射谱

PACC: 0365G, 0365N, 0365S

1. 引 言

由于电子在半导体^[1]、量子点^[2]、量子流体^[3]、³He 簇^[4]、金属簇^[5]等系统中的运动需变质量分布来描述, 所以变质量 Schrödinger 方程的求解引起了人们极大的兴趣. 相比质量恒定的情况^[6-9], 变质量求解更为复杂, 通常很难找到它的解析解, 但是对于某些特殊质量分布, 人们可通过超对称量子力学^[10], 路径积分^[11], 李代数^[12,13], 点正则变换 (point canonical transformation, PCT)^[14,15]等方法来得到其解析解. 其中 PCT 的基本思想是将质量恒定的物理系统作为参考问题, 变质量的物理系统看作目标问题, 通过坐标变换在参考问题的方程与目标问题的方程之间建立联系得出等效势. 若等效势可精确求解, 如 Coulomb 势, Morse 势等, 则变质量 Schrödinger 方程也能得到解析求解.

然而变质量分布的等效势为可精确求解势的情形并不多, 这就大大限制了 PCT 的使用范围. 另外分析转移矩阵 (analytical transfer matrix, ATM) 方法的量子化条件^[16,17]可以求解一维任意变化势阱的束缚能谱, 也能用于变质量情形^[18]. 但在计算过程必须先确定两个转折点 ($V(a) = V(b) = E$) 的位置, 如果势场为零, 而只有变质量分布, 其量子化条件也无法使用. 本文结合 PCT 和 ATM 两种方法, 求解零势场中变质量粒子的束缚能谱, 即先通过 PCT

将变质量分布转化为等效势, 这时不管其等效势是否可精确求解, 都可以通过 ATM 量子化条件求解其束缚能谱.

既然某些变质量分布粒子在零势场中也能有束缚能谱, 其透射谱是怎样? 是否与质量恒定粒子在零势场中透射率恒为 1 有什么不同? 自然引起我们的关注. 运用 ATM 透射率公式^[19]计算了变质量分布粒子穿透零势场的概率, 得到一些有用的结果.

2. 理论准备

2.1. 点正则变换 (PCT)

当粒子质量随坐标位置变化时, 系统的动能算符有多种定义. 采用动能算符中动量与质量对称的方式, 则一维变质量 Schrödinger 方程写为

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

为简便计, 已令 $m_0 = \hbar = 1$. 作如下变换: $\psi(x) = m(x)^{\frac{1}{4}} \varphi(y(x))$ 和 $\frac{dy}{dx} = m(x)^{\frac{1}{2}}$, 代入 (1) 式, 则变质量方程变换为质量恒定的方程

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \varphi(y)}{dy^2} + V_{\text{eff}}(y) \varphi(y) = E \varphi(y). \quad (2)$$

(1) 式和 (2) 式具有相同的束缚能谱, 而两式的势函

† E-mail: yizimanyuan@sohu.com

数关系为^[15]

$$V_{\text{eff}}(y(x)) = V(x) + \frac{1}{32} \left[\frac{7}{m(x)^3} \left(\frac{dm(x)}{dx} \right)^2 - \frac{4}{m(x)^2} \frac{d^2m(x)}{dx^2} \right]. \quad (3)$$

若(2)式中的等效势 $V_{\text{eff}}(y(x))$ 为可精确求解势, 则(1)式中的束缚能谱 E 及波函数 $\psi(x)$ 也易得到. 这就是 PCT 方法的原理. 本文取零势场 $V(x) = 0$, 这样等效势则完全由变质量分布 $m(x)$ 决定.

2.2. 分析转移矩阵(ATM)方法

2.2.1. 量子化条件

与(1)式等效的 Riccati 方程为

$$\frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} q(x) = - \left[q(x)^2 + \left(\frac{\kappa(x)}{m(x)} \right)^2 \right], \quad (4)$$

其中 $q(x) = \frac{1}{m(x)\psi(x)} \frac{d\psi(x)}{dx}$, 而 $\kappa(x) = \sqrt{2m(x)(E - V(x))}$. 根据 ATM 量子化条件^[18]

$$\int_a^b \left(\kappa(x) + \frac{q(x)(\kappa'(x)m(x) - m'(x)\kappa(x))}{\kappa(x)^2 + m(x)^2q(x)^2} \right) dx$$

$$= (n + 1)\pi, \quad (5)$$

可知 $\kappa(x)$ 为主波波数, 而 $[q(x)(\kappa'(x)m(x) - m'(x)\kappa(x))]/[\kappa(x)^2 + m(x)^2q(x)^2]$ ($-\frac{q(x)\kappa'(x)}{q'(x)}$ 当 $m'(x) = 0$) 则为散射子波波数.

在两转折点 $x = a$ 和 $x = b$ 处有 $V(a) = V(b) = E$. 对于质量恒定及变质量分布情形, (5)式均适用. ATM 量子化条件修正了 WKB 量子化条件^[20]中的两个错误: 1) 粒子在转折点处的全反射相移为 π 而不是 $\pi/2$; 2) 给出了客观存在而被忽略的散射子波位相贡献.

2.2.2. 透射率公式

对在区间 $[0, s]$ 内任意连续的质量分布 $m(x)$ 及势函数 $V(x)$ 进行分层, 当分层数足够大时, 每小层内质量及势均可视为常量. 由波函数 $\psi(x)$ 及其一阶导数 $\psi'(x)$ 在分层界面处连续的条件, 得到 ATM 反射系数公式^[19]

$$r = \frac{r_{0l} + r_{ls} \exp \left[i2 \int_0^s \kappa(x) + \frac{q(x)(\kappa'(x)m(x) - m'(x)\kappa(x))}{\kappa(x)^2 + m(x)^2q(x)^2} dx \right]}{1 + r_{0l}r_{ls} \exp \left[i2 \int_0^s \kappa(x) + \frac{q(x)(\kappa'(x)m(x) - m'(x)\kappa(x))}{\kappa(x)^2 + m(x)^2q(x)^2} dx \right]}, \quad (6)$$

其中 $r_{0l} = \frac{m_l\kappa_0 - m_0\kappa_l}{m_l\kappa_0 + m_0\kappa_l}$, $r_{ls} = \frac{m_s\kappa_l - m_l\kappa_s}{m_s\kappa_l + m_l\kappa_s}$ 分别代表始点与末点处的反射系数. 透射率则可通过 $T = 1 - rr^*$ 求得.

3. 计算实例及结果分析

3.1. 例 1

考虑质量分布

$$m(x) = \frac{1}{2(\alpha^2 x^2 + 1)^2}, \quad x \in (-\infty, \infty). \quad (7)$$

当 $\alpha = 1, \alpha = 2$ 时的质量分布如图 1 所示.

由(6)式计算所得变质量粒子穿透零势场的透射谱如图 2 所示.

$$\text{作坐标变换 } y = \int \sqrt{m(x)} dx = \frac{\sqrt{2}}{2\alpha} \arctan(\alpha x),$$

求得反函数 $x = \tan(\sqrt{2}\alpha y)/\alpha$, 其中自变量的取值范

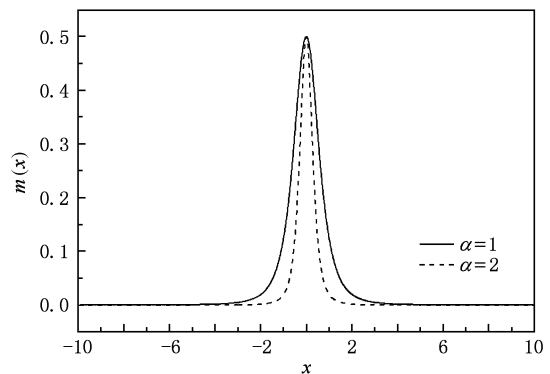


图 1 例 1 的变质量分布图

围为 $y \in (-\sqrt{2}\pi/4\alpha, \sqrt{2}\pi/4\alpha)$, 代入(3)式, 可得等效势

$$V_{\text{eff}}(y) = 2\alpha^4 x^2 + \alpha^2 = \frac{2\alpha^2}{\cos^2(\sqrt{2}\alpha y)} - \alpha^2, \quad y \in (-\sqrt{2}\pi/4\alpha, \sqrt{2}\pi/4\alpha), \quad (8)$$

此等效势为一维可精确求解的无限深势阱, 束缚能

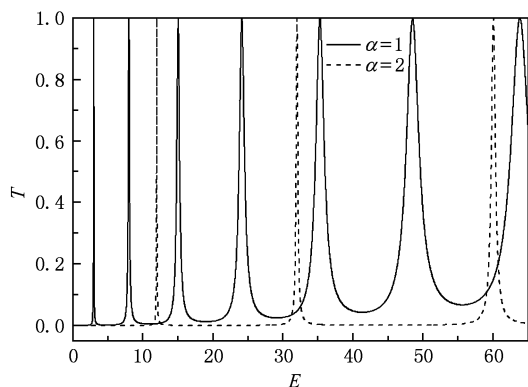


图2 例1的透射谱

谱由下式确定:

$$E_n^\pm = \alpha^2 \left(\left(\frac{4n + 5 \mp 1}{2} \right)^2 - 1 \right), \quad (9)$$

其中上标 \pm 分别代表偶 (even) 宇称与奇 (odd) 宇称. 表 1, 2 列出了由 (9) 式和 ATM 量子化条件 (5) 式计算得到的束缚能谱, 以及利用 (6) 式计算所得变质量粒子穿透零势场概率等于 1 时对应的粒子能量 ($T(E) = 1$).

表1 本征能谱 ($\alpha=1$) 及 $T(E) = 1$ 处能量

n	解析解	数值解 ^[21]	ATM	$T(E) = 1$
0 even	3	3.004881	2.999936	3.004219
0 odd	8	8.028904	7.999802	8.021406
1 even	15	15.093414	14.999451	15.061719
1 odd	24	24.224355	23.998352	24.149531
2 even	35	35.448810	34.996582	35.297031
2 odd	48	48.793785	47.993652	48.520469
3 even	63		62.999268	63.832031

表2 本征能谱 ($\alpha=2$) 及 $T(E) = 1$ 处能量

n	解析解	ATM	$T(E) = 1$
0 even	12	11.999893	12.002656
0 odd	32	31.999817	32.018594
1 even	60	59.999512	60.057969

3.2. 例 2

第二个例子的变质量分布为

$$m(x) = \operatorname{sech}^4(x), x \in (-\infty, \infty). \quad (10)$$

其质量分布如图 3 所示.

由 (6) 式计算所得变质量粒子穿透零势场的透射谱如图 4 所示.

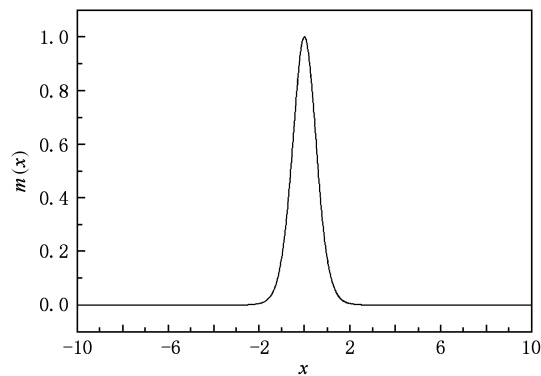


图3 例2的变质量分布图

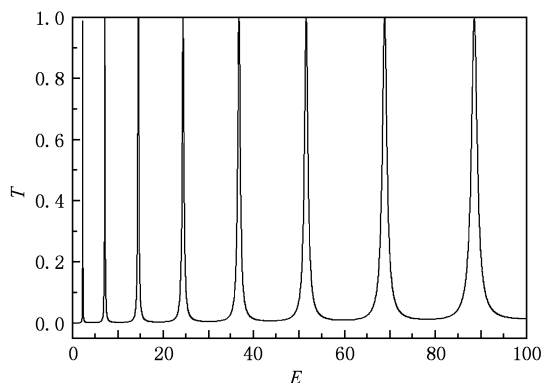


图4 例2的透射谱

作坐标变换 $y = \int \sqrt{m(x)} dx = \tanh(x)$, 其反函数为 $x = \operatorname{arctanh}(y)$, $y \in (-1, 1)$, 代入 (3) 式, 可得等效势

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(y(x)) &= \frac{3}{2} \cosh^4 x - \cosh^2 x \\ &= \frac{3}{2} \frac{1}{(1-y^2)^2} - \frac{1}{1-y^2}, \\ &y \in (-1, 1), \end{aligned} \quad (11)$$

此等效势也是一维无限深势阱, 但其不可精确求解. 而 ATMM 量子化条件可求解一维任意势的束缚能谱. 表 3 列出了由 ATM 量子化条件 (5) 式计算得到的本征能谱, 以及利用 (6) 式计算所得变质量粒子穿透零势场概率等于 1 时对应的粒子能量 ($T(E) = 1$).

3.3. 结果分析

两种变质量分布的等效势均为一维无限深势阱, 计算表明, 即使在零势场中, 粒子也可束缚在其自身的变质量分布中, 并且有离散的束缚能谱. 通过 PCT 后, 不管其等效势阱是否可精确求解, ATM 量子化条件均能精确给出束缚能谱.

表3 ATM 本征能谱及 $T(E) = 1$ 处能量

n	ATM	$T(E) = 1$
1	2.310944	2.309375
2	7.181671	7.184375
3	14.541382	14.553125
4	24.378540	24.403125
5	36.688843	36.728125
6	51.470337	51.528125
7	68.720703	68.809375
8	88.439941	88.565625

众所周知,对于势阱的束缚态本征能量,由于左转折点处波函数没有入射波成分,所以反射系数在此能量下为一无穷大的极点,这一特征已用于求解势阱的束缚能谱^[22]. 然而,计算得到变质量粒子穿透零势场的概率在束缚态本征能量处恰好为1,即共振峰与本征能量一一对应. 在此作如下分析:

以第一种质量分布($\alpha = 1$)为例,其坐标区域 $x \in (-\infty, \infty)$, 所得一维无限深等效势阱的坐标区域为 $y \in (-\sqrt{2}\pi/4, \sqrt{2}\pi/4)$. 而在利用式(6)计算透射率过程中,不可能选取无穷大为积分区域,并且在 $|x|$ 比较大的区域,其质量分布改变不明显. 我们截取的计算区域为 $|x| \leq 18$, 这样所对应的等效势在范围 $|y| \leq \sqrt{2}/2\arctan(18) \approx 1.07$ 内与无限深势阱一样,而在区域 $1.07 \leq |y| \leq \sqrt{2}\pi/4$ 为 $V = V(y = 1.07)$ 的常势,其他区域为零势. 其可简化为如图5所示的 ABCBA 一维有限深势阱分布. 其中 A 表示零势 V_0 , B 表示势垒 V_b , 宽度为 L_b , C 表示势阱 V_w , 宽度为 L_w .

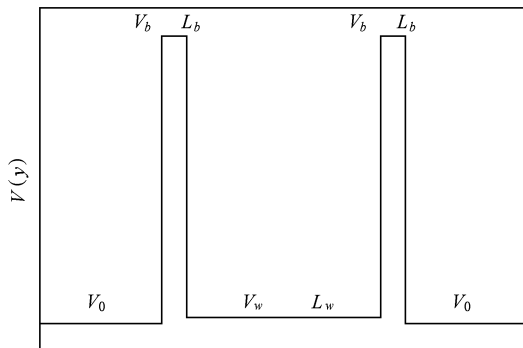


图5 等效势简化后的 ABCBA 势分布

此势分布结构的透射率解析公式为^[23]

$$T = \{1 + V_w^2 \sin^2(k_w L_w) / [4E(E - V_w)] + HV_b \sinh(\beta_b L_b) \times [2V_w(V_b - E) \sin(k_w L_w) - HV_b \sinh(\beta_b L_b)] / [4E(E - V_w) \times (V_b - E)^2]\}^{-1}, \quad (12)$$

其中

$$H = 2[(E - V_w)(V_b - E)]^{1/2} \cosh(\beta_b L_b) \cos(k_w L_w) - (2E - V_b - V_w) \sinh(\beta_b L_b) \sin(k_w L_w), \quad (13)$$

且 $k_w = \sqrt{2m(E - V_w)}$, $\beta_b = \sqrt{2m(V_b - E)}$. 若 $V_w \approx 0$, 即 ABABA 型, 若 $H = 0$ 可得共振透射率 $T = 1$. 由 $H = 0$, 可得

$$2[E(V_b - E)]^{1/2} / (2E - V_a) = \tan k_w L_w \tanh \beta L_a. \quad (14)$$

因势垒高度 $V_b \gg E$, 可设 $\tanh \beta L_a \approx 1$, 则(14)式变为一维有限深势阱的本征能量方程. 因势垒高度 V_b 已非常大, 故在小能量范围, 其所得束缚能谱即为一维无限深势阱的束缚能谱. 至此便解释了变质量粒子穿透零势场的共振峰为何与其本征能量一一对应. 同时在分析过程中运用了几个近似条件, 所以共振峰能量与本征能量还是有些细微差别. 这在计算结果中也有所体现.

最后需要特别指出, 本文针对变质量粒子的束缚态这一问题提出的简单可行方法, 可以直接推广运用到各种实际的物理系统中. 比如, 半导体物理基础中, 电子在固态晶体中的能量状态通常是采用单电子近似来研究. 而单电子近似的精髓就在于通过引入电子(空穴)的有效质量这一概念, 来概括晶格的周期性势场和其它电子(空穴)对该电子(空穴)的影响. 不同的材料中电子和空穴的有效质量是不相同的, 本文的研究成果可以适用于研究各类异质结构中的束缚能谱.

4. 结 论

综上所述, 本文提出了一种适用于求解零势场中任意变质量粒子的束缚能谱的方法. 从前面的分析可知, PCT 与 ATM 方法结合后, 扩大了各自的适用范围. 对于零势函数情形, 因没有转折点, 则不可直接用 ATM 量子化条件, 若先由 PCT 将变质量分布变换为其等效势后, 束缚能谱才可由 ATM 量子化条件求得. 而 PCT 之前仅能用于等效势可精确求解的情形, 通过结合运用 ATM 方法, PCT 现可用于求解一维任意变质量系统中的束缚能谱. 另外, 计算实例表明变质量粒子透射谱与质量恒定粒子在零势场中透射率

恒为 1 完全不同,其透射率随粒子入射能量变化,且 共振透射峰与本征能量有一一对应关系.

- [1] Bastard G 1988 *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure* (Les Ulis: Editions de Physique)
- [2] Serra L I, Lipparini E 1997 *Europhys. Lett.* **40** 667
- [3] Arias de Saavedra F, Boronat J, Polls A, Fabrocini A 1994 *Phys. Rev. B* **50** 4248
- [4] Barranco M, Pi M, Gatica S M, Hernandez E S, Navarro J 1997 *Phys. Rev. B* **56** 8997
- [5] Puente A, Serra L I, Casas M 1994 *Z. Phys. D* **31** 283
- [6] Cooper F, Khare A, Sukhatem U 1995 *Phys. Rep.* **251** 267
- [7] Chen G 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 680 (in Chinese) [陈刚 2004 物理学报 **53** 680]
- [8] Lu F L, Chen C Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 688 (in Chinese) [陆法林、陈昌远 2004 物理学报 **53** 688]
- [9] Jia C S, Jiang X W, Wang X G, Yang Q B 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 12 (in Chinese) [贾春生、蒋效卫、王孝国、杨秋波 1997 物理学报 **46** 12]
- [10] Gonul B, Gonul B, Tutcu D, Ozer O 2002 *Mod. Phys. Lett. A* **17** 2057
- [11] Mandal B P 2000 *Int. J. Mod. Phys. A* **15** 1225
- [12] Roy B 2005 *Europhys. Lett.* **72** 1
- [13] Dong S H, Pena J J, Pacheco-Garcia C, Garcia-ravelo J 2007 *Mod. Phys. Lett. A* **22** 1039
- [14] Cai C Y, Ren Z Z, Ju G X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2528 (in Chinese) [蔡长英、任中洲、鞠国兴 2005 物理学报 **54** 2528]
- [15] Gonul B, Ozer O, Gonul B, Uzgün F 2002 *Mod. Phys. Lett. A* **37** 2453
- [16] Cao Z Q, Liu Q, Shen Q S, Dou X M, Chen Y L, Ozaki Y 2001 *Phys. Rev. A* **63** 054103-1
- [17] Xu T, Cao Z Q and Fang J H 2008 *Chin. Phys. B* **17** 4378
- [18] Ou Y C, Cao Z Q, Shen Q S 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 4283
- [19] Su P Y, Cao Z Q, Chen K S, Yin C, Shen Q S 2008 *J. Phys. A: Math. Theor.* **41** 465301
- [20] Miller S C, Good R H 1953 *Phys. Rev.* **91** 174
- [21] Pena J J, Ovando G, Morales J, Garcia-Ravelo J, Pacheco-Garcia C 2007 *Int. J. Quantum. Chem.* **107** 3039
- [22] Deck R T, Li X S 1995 *Am. J. Phys.* **63** 920
- [23] Yamamoto H 1987 *Appl. Phys. A* **42** 245

The bound energy spectrum of position-dependent mass particle in the null potential

Dai Man-Yuan^{1)†} Nie Yi-You¹⁾ Sang Ming-Huang¹⁾ Wang Xian-Ping¹⁾
Yin Cheng²⁾ Cao Zhuang-Qi²⁾

1) (Department of Physics, Jiangxi Normal University, Nanchang 330022, China)

2) (Department of Physics, Shanghai JiaoTong University, Shanghai 200240, China)

(Received 17 November 2009; revised manuscript received 2 March 2010)

Abstract

The bound energy spectrum of a position-dependent mass particle which is trapped in a null potential is obtained by combining the point canonical transformation (PCT) method and the analytical transfer matrix (ATM) method. With the calculation for the transmission of a position-dependent mass particle passing through the null potential, the one-to-one correspondence between transmission resonance peak and eigenenergy is found and explained.

Keywords: position-dependent mass, null potential, bound energy spectrum, transmission

PACC: 0365G, 0365N, 0365S

† E-mail: yizimanyuan@sohu.com