

一维势场中粒子波包演变的研究

沈玥 物理学系 17307110399

摘要: 本文基于 html5 优秀的动画演示和用户交互特性, 利用有限差分法求解含时 Schrödinger 方程得到一维势场下波包随时间的演化关系并将其动态展示。讨论了高斯波包通过势垒时的透射系数在不同条件下的变化, 并做出透射系数与波包宽度、粒子能量和势垒宽度等参数的关系曲线图。模拟结果表明, 根据粒子入射能量和势垒能量的相对大小不同, 透射系数随上述参数有不同的依赖关系, 并在特定条件下将发生全透射的现象。

一、引言

薛定谔方程是量子力学中的基本方程。它是以异质结为基础的量子阱和超晶格等新型材料的理论基础之一^[1]。同时也为微观电子传输中的有趣现象, 如谐振隧穿效应、Fano 谐振^[2]等现象提供了理论解释。然而含时薛定谔方程是一个偏微分方程, 尽管在受迫谐振子^[3]等少数系统下可以精确求解, 大多数还是需要依赖于数值解法。一些常见的数值解法包括有限元法^[4], Crank-Nicolson 方法和辛算法^[5]等, 在稳定性、精确性和复杂性上各有优劣, 可以运用于不同的场合。在量子力学的学习过程中, 一些物理概念如波包、机率密度、波函数等常常给学生的理解造成困难, 对于这些物理过程缺乏直接的物理图像。而将上述数值算法结合 html5 网页框架出色的动画演示效果和用户交互特性, 可以将波函数的演变过程直观地展示出来。

本文主要利用有限差分结合简化后的 Crank-Nicolson 方法对一维势场下高斯波包的演变过程进行了模拟。探讨了高斯波包通过势垒时的透射系数随波包宽度、粒子能量和势垒宽度等参数的变化, 并对其原因作出分析。

二、实验原理

1、有限差分法

利用有限差分方法研究量子力学中的粒子在时空中的传播问题, 空间中有一势场 $V(r)$, 粒子从起始位置以波包形式开始运动, 当波包运动至势场附近, 波包产生分离, 部分穿过势场, 部分被反射回来。这是一个求解含时 Schrödinger 方程的问题。对于在一维中运动的粒子, 它的初始波函数形式可以用高斯波包表示:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-x_0)^2/\sigma^2} e^{ik_0x} \quad (1)$$

波包中心在 x_0 ，宽度为 σ 。平面波因子 e^{ik_0x} 使波包以 $v_0 = \frac{\hbar k_0}{m}$ 运动。

一维下的含时薛定谔方程为：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) \quad (2)$$

在 t 时刻，式（1）其形式解为：

$$\Psi(x, t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \Psi(x, 0) \quad (3)$$

除了在特定的势场和起始条件下，该式子很难计算得到解析解。但注意到原式是一个偏微分方程，可以利用有限差分法进行数值求解。有限差分法的基本思想是先将问题的定义域进行离散网格化，然后在网格点上，是通过有限差分来近似导数，从而寻求微分方程的近似解。[6]

对于一段时间间隔 τ ，可以将式（3）写为

$$\Psi(x, t + \tau) = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} \Psi(x, t)$$

若 τ 很小，可以将指数部分进行一阶近似并带回式（1）

$$\Psi(x, t + \tau) = \left(1 - \frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}\right) \Psi(x, t) = \left\{1 + \tau \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \tau \frac{i}{\hbar} V(x)\right\} \Psi(x, t) \quad (4)$$

即将时间域进行了离散化。同理可以利用空间离散化处理 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 项。 x 轴以步长 h 分割，时间以 τ 分割，记 $\Psi_{m,n} = \Psi(mh, n\tau)$ ，则可将Schrödinger方程式（3）化为如下形式

$$\Psi_{m,n+1} = \Psi_{m,n} + \frac{i\tau\hbar}{2m} \frac{\Psi_{m+1,n} + \Psi_{m-1,n} - 2\Psi_{m,n}}{h^2} - \frac{i\tau}{\hbar} V_m \Psi_{m,n} \quad (5)$$

对于空间中每一点给定初始波函数 $\Psi_{m,0}$ 理论上可求出后续时刻的波函数 $\Psi_{m,1}, \Psi_{m,2}, \dots$

但是，由于其中忽略了 τ 的高次项，该差分方程并不稳定。同时，它也不能满足波函数的归一化要求。

作为优化，将指数算符 Cayley 形式

$$e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} = \frac{1 - i\hat{H}\tau/2\hbar}{1 + i\hat{H}\tau/2\hbar}$$

这是一个酉正算符，可保证波函数归一性。依照之前的方法改写式（1）将涉及的空间微分算符写成差分形式，并且为了后续代码的方便起见将物理常数取为单位制 $\hbar = 1, m = 1$ 后得

$$\begin{aligned} \Psi_{m+1,n+1} + 2\{(i2\tau^{-1} - V_m)h^2 - 1\}\Psi_{m,n+1} + \Psi_{m-1,n+1} \\ = -\Psi_{m+1,n} + 2\{(i2\tau^{-1} + V_m)h^2 + 1\}\Psi_{m,n} - \Psi_{m-1,n} \end{aligned} \quad (6)$$

该方程虽然满足了稳定性和波函数的归一化需求，但该方程不再是简单的由 $\Psi_{m,n}$ 决定 $\Psi_{m,n+1}$ 的公式，等式左边各涉及前后时刻相邻三个位置的波函数，因此需要求解联立方程组。求解的困难之处在于矩阵的维数可能很大。虽然该方程组的系数矩阵是三对角矩阵，利用托马斯算法可以将其时间复杂度降至 $O(n)$ ，但是Javascript对于二维数组并不提供优秀的支持，使得即使利用托马斯算法，读取系数时依旧会出现麻烦，最终会使得动画效果不够流畅。为了简化代码，可以对改算法进行进一步优化。

2、显隐式组合差分方程到显式差分法的转换^[7]

利用三对角矩阵的特点，可以对上述显隐式组合差分方程式（6）进行进一步转化。定义其右边

$$A_{m,n} = -\Psi_{m+1,n} + 2\{(i2\tau^{-1} + V_m)h^2 + 1\}\Psi_{m,n} - \Psi_{m-1,n}$$

数值计算上，为了方便我们希望能将差分方程写成显式，以期可以利用 $\Psi_{m,n+1}$ 直接求得 $\Psi_{m+1,n+1}$ ，

即

$$\Psi_{m+1,n+1} = B_{m,n}\Psi_{m,n+1} + C_{m,n}$$

带回式子（6），可得

$$B_{m,n} = -2\{(i2\tau^{-1} - V_m)h^2 - 1\} - 1/B_{m-1,n}$$

$$C_{m,n} = A_{m,n} + C_{m-1,n}/B_{m-1,n}$$

上面的递推式只适用于内部区域，在边界上，由于波函数的平方归一要求，无论是什么样的波包，只要观测的空间域足够大，都可以认为 $\Psi_{0,n} = \Psi_{M,n} = 0$ ，在边界 $m = 0$ 处，由边界条件可得

$$B_{1,n} = -2\{(i2\tau^{-1} - V_1)h^2 - 1\}$$

$$C_{1,n} = A_{1,n}$$

再利用另一边 $m = M$ 处的边界条件，带回有

$$\Psi_{M-1,n+1} = -C_{M-1,n}/B_{M-1,n}$$

$$\Psi_{m,n+1} = (\Psi_{m+1,n+1} - C_{m,n})/B_{m,n}$$

至此，可以总结出该问题的核心算法：

- 1) 确定初始波函数 $\Psi_{m,0}$
- 2) 对于第 n 个时刻，已经求得 $\Psi_{m,n}$ ，应重复以下步骤：
从 $m = 1$ 处开始顺序计算 $A_{m,n}$ ，然后后计算 $B_{m,n}$ 和 $C_{m,n}$
从 $m = M - 1$ 开始逆序计算 $\Psi_{m,n+1}$
- 3) 更新 $\Psi_{m,n}$ 为 $\Psi_{m,n+1}$ ，作图并进入下一次运算

注意到 $A_{m,n}$, $B_{m,n}$, $C_{m,n}$ 的值只与 $\Psi_{m,n}$ 有关，因此对于第 n 时刻，只需要三个大小为 M 的一维数组用于记录 $A_{m,n}$, $B_{m,n}$, $C_{m,n}$ 的值，即可进行递推。并且这三个数组可以在每次更新后清空重复使用，以此大大降低了空间需求。

三、实验过程

网页界面如图所示，包含如下区域和功能

1、主界面

如图 1 所示，在该界面展示了势函数的形状和波函数的模值 $|\Psi_{m,n}|^2$ 的演变过程。

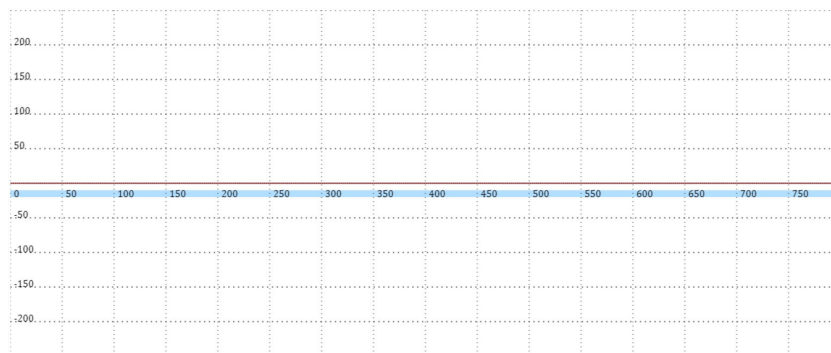


图 1 主界面示意图

A) 势函数设定

由于在有限差分法中，同时将势函数 $V(x)$ 进行了离散化，因此在该界面上可以将所有分立的势节点 V_0, V_1, \dots, V_M 依次连接起来形成势函数曲线。同时这种连线图为利用鼠标改变势函数提供了可能。利用 `windowToCanvas(x,y)` 将鼠标的坐标转换为画布内坐标以此判断移动的节点位置，利用 `onmousemove` 事件，在鼠标拖动节点时更新势函数作图即势节点大小。为了方便势垒势阱的设置，此处也支持批量移动势节点的操作。点击“批量”按钮，依次点击要移动的节点群的左端点和右端点，即可对该范围内所有势节点进行整体移动操作。每次调整势函数都会在页面上留下记录。

B) 创建动画

利用 `requestAnimationFrame(callback)` 函数创建动画。用户在完成势函数设定后点击“开始”按钮即可观察波函数的演化过程。`requestAnimationFrame(callback)` 可以在下一帧调用 `callback` 函数冰窖调用的时刻作为参数传递给该函数。因此在每一帧调用后，利用 Ψ_n 得到 Ψ_{n+1} 并重新绘图，即可得到波函数的演变过程。

2、波函数初始值的设定

如图 2 所示，该界面提供了两种方法以实现初始波函数的设定。正如原理部分所示，一维势场中粒子的初始状态可以用高斯波包来描述。由于势函数位置的任意性，可以固定波包中心 x_0 。因此第一种方法只需调节宽度 σ 和波包运动速度 k_0 即可描述不同的高斯波包。而同时任意形状的波包均可分解为一系列平面波的叠加，这些平面波仅存在初始相位和运动速度的不同。因此第二种方法则是通过叠加不同相位和速度的平面波来实现波函数的初始化。同样，更新的记录会显示在页面上。

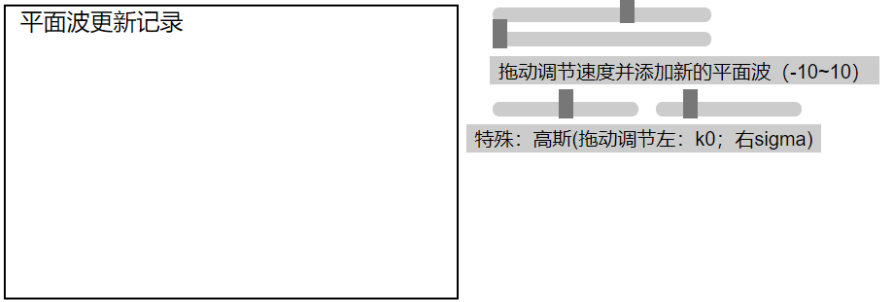


图 2 波函数更新界面示意图

3、概率分布演变界面

波函数的模值平方 $|\Psi_{m,n}|^2$ 反映了粒子在 n 时刻出现在 m 处的几率大小。利用之前势函数的更新记录，可以判断势场的覆盖范围。将势场前，势场中，势场后的概率进行加和并随着波函数的演变更新，可以得到概率分布演变图。如图 3 所示，在该界面上，纵轴为各部分所占概率，横轴为时间。黑线代表势场前，蓝线代表势场中，红线代表势场后。



图 3 概率分布演变界面示意图

4、透/反射系数扫描界面

在讨论势垒透射时一个重要的问题是透射反射和反射系数对于某参数，如入射粒子能量、势场大小、势场范围等的依赖关系。在量子力学上，透射系数和反射系数是用几率流密度定义的

$$R = \frac{j_{reflection}}{j_{incident}}, T = \frac{j_{transmission}}{j_{incident}}$$

其中 j 是几率流密度，定义为

$$j = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)$$

对于纯数值模拟的结果，几率流密度较难得到解析解，但对于一维条件下的平面波入射，可以做适当的简化。正如原理部分所叙述，一维中运动的粒子，其初始波函数可以用高斯波包来描述，当波包展宽 σ 足够大时可以认为是局域在某一范围内的平面波。设平面波的波函数为 $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ ，则其对应的几率流密度为

$$j = \frac{i\hbar}{2m}(-ikAe^{i(kx-\omega t)} \cdot Ae^{-i(kx-\omega t)} - ikAe^{-i(kx-\omega t)} \cdot Ae^{i(kx-\omega t)})$$

$$= \frac{\hbar k}{m} A^2 \propto |\Psi(x, t)|^2 \quad (7)$$

可以看到几率流密度与粒子在相同位置出现的概率是成正比的，因此在一维条件下，我们可以通过概率之比来近似的描述透射系数和反射系数，即近似认为

$$R \propto \frac{\sum_{i \text{ 在势前}} |\Psi_i(x, t)|^2}{\sum_i |\Psi_i(x, t)|^2}, T = \frac{\sum_{i \text{ 在势后}} |\Psi_i(x, t)|^2}{\sum_i |\Psi_i(x, t)|^2}$$

以此讨论相关参数的依赖关系。在该界面上，纵轴为透（反）射率，横轴为相应参数。如图 4 以入射粒子能量为例。



图 4 透/反射系数扫描界面示意图

四、案例示意

首先通过几个比较常见的一维势场下的情形来验证该程序的正确性。

1、无限深势阱中的本征态

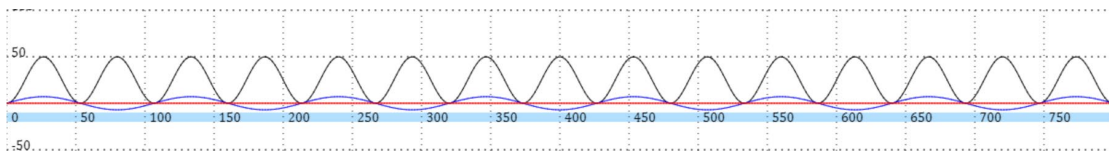
由于在该算法中的边界条件 $\Psi_{0,n} = \Psi_{M,n} = 0$ ，实际上可以认为算法覆盖的空间域对应于一个无限深势阱。对应势函数为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

无限深势阱的本征态对应于阱中驻波，

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-\frac{E}{\hbar}t}, E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

对于本征态，其能量为确定值，其模平方 $|\Psi(x, t)|^2$ 不应随时间改变，但波函数实部和虚部会随时间震荡。



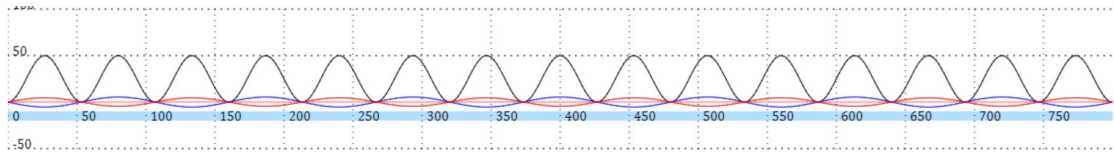


图 5 无限深势阱本征态的演化示意图

如图 5 所示，黑线为 $|\Psi(x,t)|^2$ ，蓝线为波函数实部，红线为波函数虚部。波函数由上图演变指下图，可以看到是符合理论计算的。

2、高斯波包的延展

对于用式 (1) 描述的一维中运动的粒子，在波包运动时会展宽。其原因在于波包本身可以看成是由一系列形式为 e^{ikx} 的平面波组成，其权重是傅里叶展开系数，每个在空间中传播的平面有不同的速度，并且一半沿 $+x$ 方向，另一半沿着 $-x$ 方向，因此每个分量的运动导致波包的展宽。取 $\sigma = 0.5, k_0 = 7$ 模拟结果如图 6，从左至右为高斯波包的演变过程。

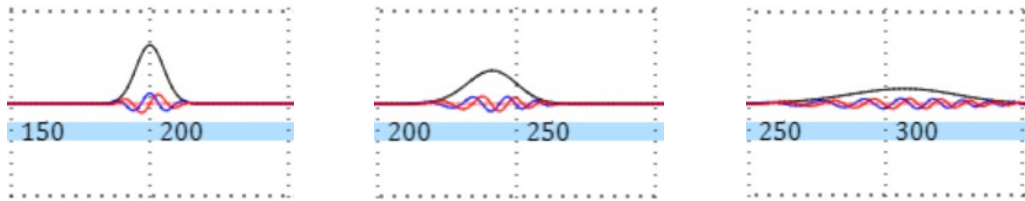


图 6 自由运动的高斯波包延展示意图

可以看到，波包高度随时间的增加而降低，宽度增大，但在全空间中的几率守恒。

3、波包对势垒（势阱）的透射和反射

用波包的传播运动可以研究一大类包含例子反射、透射和隧穿等现象的问题。首先考虑反射壁问题，在给定的空间中有高为 V_0 的势垒，让波包从自由空间向此壁运动。设定 $t = 0$ 时波包中心 $x_0 = 200$ ，取 $\sigma = 0.5, k_0 = 7$ ，势垒 $V(x) = 100(216 \leq x \leq 226)$ 进行模拟，波包演化结果如图 7 前三张图所示，第四张图展示了概率分布图随时间的变化。

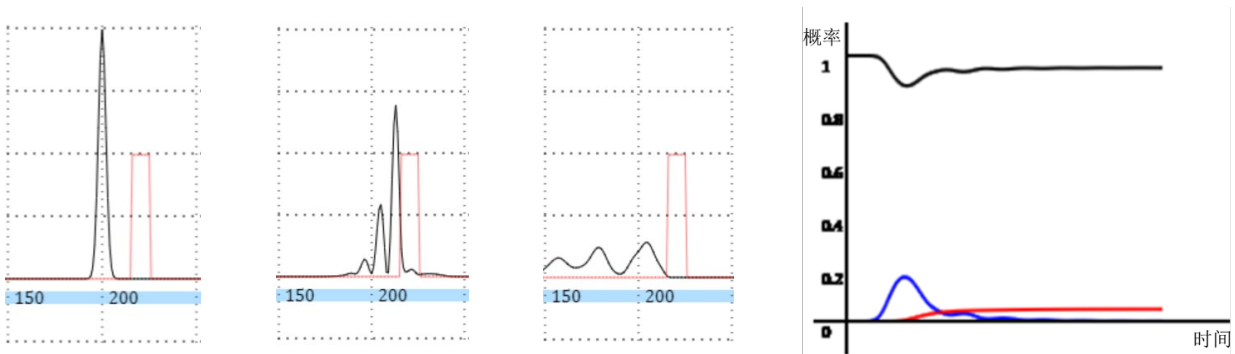


图 7 高斯波包入射势垒示意图 (1-3) 和概率演变图 (4)

可以发现，当势垒高度 $V_0 \gg \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$ 时，波包在势垒壁上被反射回来， $|\Psi|^2$ 有明显震荡现象，且有部分

粒子穿过势垒，形成粒子的隧穿效应。

同样的方法也可研究势阱透射问题。势阱 $V(x) = -50(220 \leq x \leq 232)$ ，高斯波包设定同上，模拟结果及概率分布如图 4 所示。

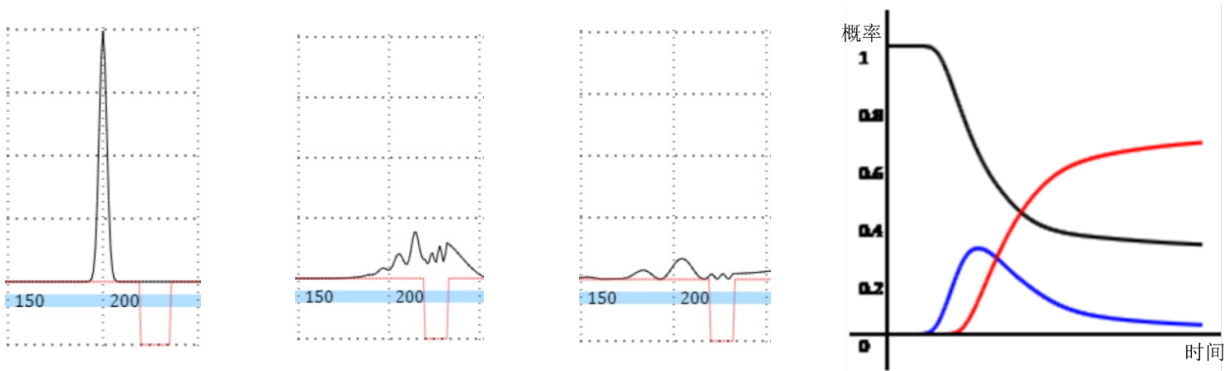


图 8 高斯波包入射势阱示意图 (1-3) 和概率演变图

可以看到，尽管粒子能量大于势阱，依旧有小部分波包被反射回来，这也是典型的量子效应。

五、实验结果和分析

接下来将利用概率分布图和扫描功能研究势垒透射率与粒子能量、势垒宽度以及波包宽度的关系，并对粒子能量 $E > V_0$ 和 $E < V_0$ 两种情况进行讨论

1、透射率和波包宽度的关系

固定 $x_0 = 200, k_0 = 10$ 不变，改变 σ 的取值，从 0.1 至 1，每 0.1 做一次模拟。模拟 $E > V_0$ 的情况，取 $V(x) = 5(225 \leq x \leq 237)$ ，模拟结果如图 5 所示。左图为每次模拟中的概率分布图，每次突变意味着改变了一次 σ ，右图为整理后的透射率与 σ 的关系图。

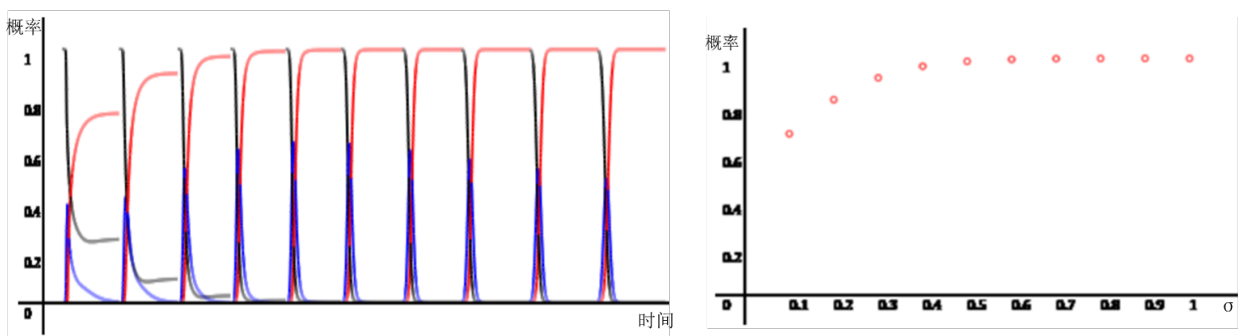


图 9 $E > V_0$ 时透射系数与波包宽度的关系图

同理模拟 $E < V_0$ 的情况，取 $V(x) = 50(224 \leq x \leq 239)$ ，模拟结果如图 10。

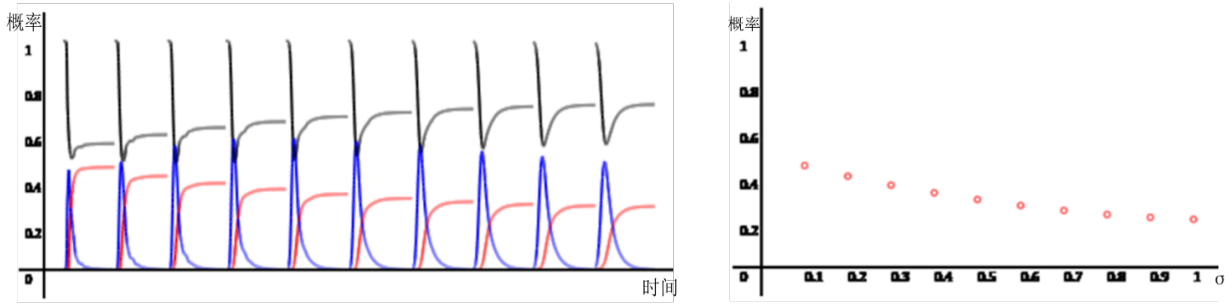


图 10 $E < V_0$ 时透射系数与波包宽度的关系图

可以看到，当 $E > V_0$ 时，波包展宽增加，透射率增加，而当 $E < V_0$ 时，波包展宽增加，透射率减小。这一现象可以从海森堡不确定性原理上得到一定程度的解释。高斯波包满足最小的不确定性，即 $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ ，而位置的不确定性 $\Delta x \propto \sigma$ ，因此展宽越宽，动量的不确定性越小且集中在 $\hbar k_0$ ，粒子的能量的不确定性也会减小且集中在 $E = \frac{(\hbar k_0)^2}{2m}$ 。因此随着展宽增加，当 $E > V_0$ 时，有更大的概率粒子能够透过势垒，而 $E < V_0$ 时粒子透过的概率更小。

2、透射率与能量的关系

对于势阱，不同能量的粒子入射会发生全透射现象。可以证明，对势阱

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

能量为 E 的波包，其透射率为

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2(k_2 a)\right)^{-1} = \left(1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}\right)\right)^{-1}$$

当 $E = -V_0 + \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2}$ 时发生全透射。模拟时 $\sigma = 2$ 固定不变，取 $V(x) = -50(226 \leq x \leq 249)$ ，调节 k_0

从 1 到 10 每 0.1 做一次模拟，得到扫描图如图

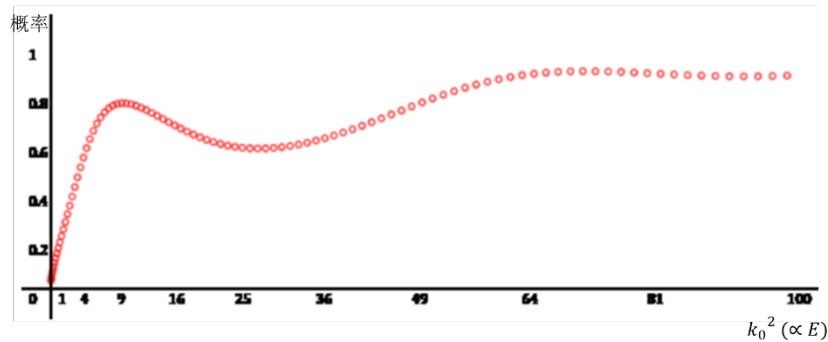


图 11 势阱透射率与粒子能量关系图

可以看到透射率曲线并不是随能量单调变化的，这正是全透射的影响。但是模拟结果中透射几率并没有达到 1。这一方面是由于波包本身不能完全替代平面波，另一方面，尽管全透射发生时反射系数为 0，但并不代表势场前粒子出现几率就为 0，因此透射率并不会达到 1。

对于有限高势垒

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

可以发现如果 $E > V_0$ 其通解与上述势阱并没有本质的区别，因此透射率曲线也会有类似的波动。

$V(x) = 14(227 \leq x \leq 249)$ ，扫描结果如图。

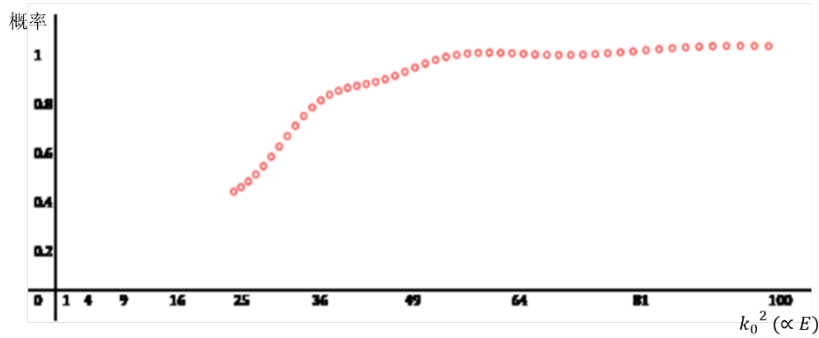


图 12 $E > V_0$ 时势垒透射率与粒子能量关系图

如果 $E < V_0$ ，势垒中通解为

$$\psi(x) = Ce^{k_3x} + De^{-k_3x}$$

其中 $k_3^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

可以计算得对能量为 E 的波包，其透射率为

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} (e^{k_3a} - e^{-k_3a})^2\right)^{-1}$$

模拟时 $V(x) = 50(230 \leq x \leq 250)$ ，扫描结果如图

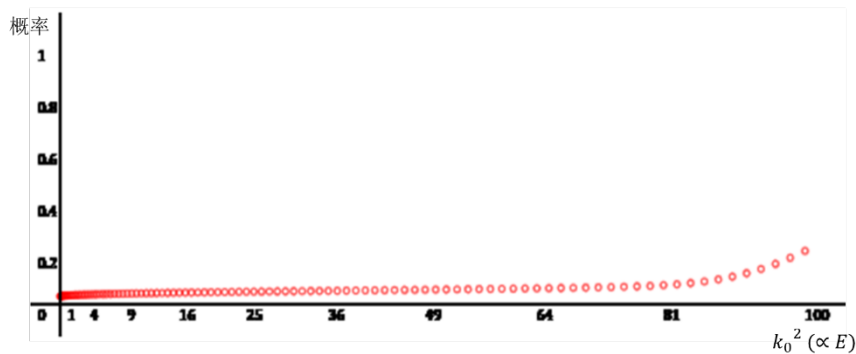


图 13 $E < V_0$ 时势垒透射率与粒子能量关系图

可知随着能量的增加，透射率增加。事实上由式 (7) 可知实际透射系数与 k_0 也相关，因此其增加趋势还会更大一些。

3、透射率和势垒宽度的关系

对于有限高势垒 $E > V_0$ 的情况，可以看见当入射粒子能量、势垒都完全确定时，

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}\right)\right)^{-1} = \frac{1}{1 + W_1 \sin^2(k_2 a)}$$

透射率应该是一个对势垒宽度 a 周期性变换的类似于三角函数的图像，在 $k_2 a = n\pi$ 时会发生全透射。

模拟时取 $k_0 = 5, \sigma = 10, V(x) = 8$ ，势垒覆盖范围从 $x = 250$ 开始，宽度从 1 增加至 40，每隔 1 做一次模拟。扫描结果如图

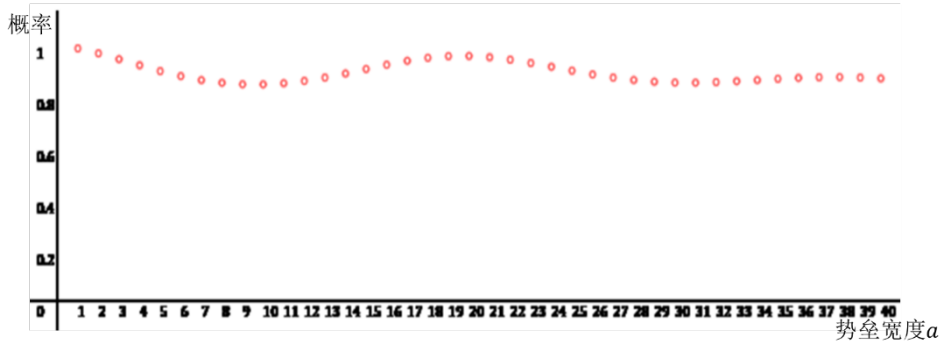


图 14 $E > V_0$ 时透射率与势垒宽度关系图 ($\sigma = 10$)

如果将 $\sigma = 2$ ，同样做扫描

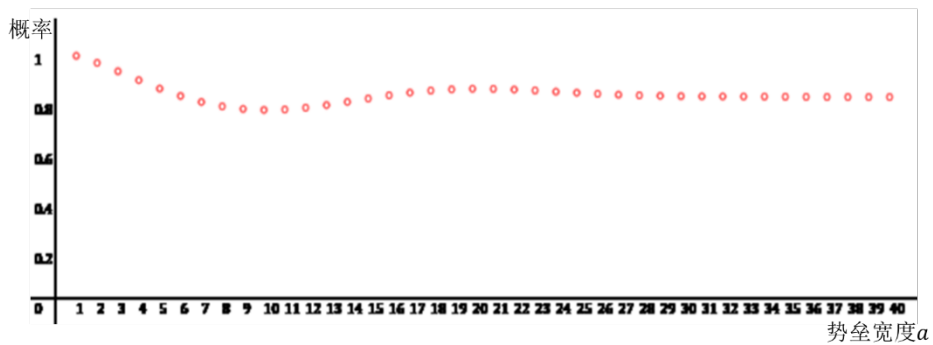


图 15 $E > V_0$ 时透射率与势垒宽度关系图 ($\sigma = 2$)

可以看到，波包宽度更大的时候周期性更好，结果也更接近于平面波的理论分析。这意味着，入射粒子进入势垒后碰到两侧势垒壁发生反射和透射，当粒子能量合适，经过多次反射透射后波的相位相同，彼此相干相长，出现共振透射。

对于有限高势垒 $E < V_0$ 的情况，令 $V(x) = 15$ ，同样进行扫描，结果如图

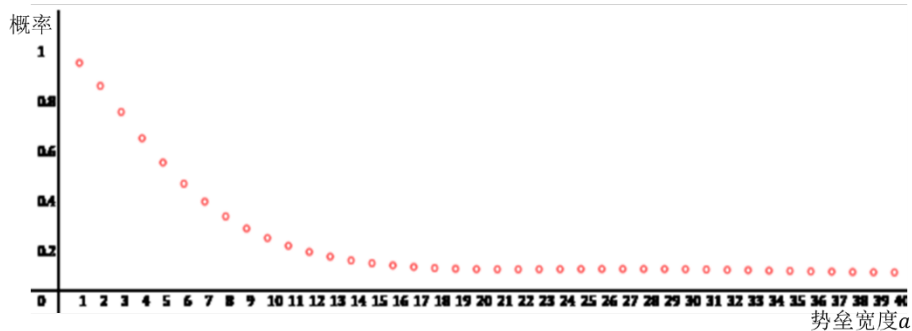


图 16 $E < V_0$ 时透射率与势垒宽度关系图

透射率随势垒宽度而减小。

六、实验结论

本实验模拟了一维条件下高斯波包在不同势场下的运动，讨论了势垒的透射率与不同参数的依赖关系。模拟结果表明，当入射粒子能量 $E > V_0$ 时，透射率随波包宽度的增加而增加，对特定的粒子能量和势垒宽度将会发生全透射现象；当入射粒子能量 $E < V_0$ 时，透射率随波包宽度的增加而减小，随粒子能量的增加而增加，随势垒宽度的增加而减小，不会发生全透射现象，符合理论计算的预期。本实验为学生理解量子力学中的基本概念提供了启示。

七、参考文献

[1]王忆锋,唐利斌,罗顺芝.一维含时薛定谔方程的 MATLAB 有限差分矩阵分解算法[J].红外,2010,31(10):40-43.

[2]Griffiths D J, Schroeter D F. Introduction to quantum mechanics[M]. Cambridge University Press, 2018.

[3]李淑红,郑忠喜,高迎芳,刘文森.含时受迫谐振子薛定谔方程的精确解[J].山西大学学报(自然科学版),2003(02):139-142.

[4]黄亚兰. 一维无界域上薛定谔方程的有限元方法[D].湘潭大学,2010.

[5]牟其善,马会燕.含时薛定谔方程的几种数值算法比较[J].山东教育学院学报,1998(04):11-13.

[6]中文维基百科,有限差分法

[7]丁泽军,计算物理讲义