文章编号:1674-2869(2008)04-0120-03

WKB 近似中基函数选择方式

李文胜,孙建美
(湖北汽车工业学院理学部,湖北 十堰 442002)

摘　要:WKB 近似法的应用非常广泛,计算势垒贯穿几率是其应用之一. 为了简化计算、明确图像,运用连接公式,讨论了 WKB 近似方法中选择基函数的两种方式,并对它们进行了比较,提出了基函数的选择标准.

关键词:WKB 近似;势垒贯穿;基函数
中图分类号:O413.2　　文献标识码:A

0　引　言

WKB 方法是量子力学中重要的近似方法[1],若势函数满足变化比较缓慢,且势垒足够厚和足够高的条件,就可以使用此方法方便地求解势垒贯穿问题. 然而,在选择函数时,一般教科书上都只介绍了一种方式,实际上存在两种不同的方式. 讨论比较这两种不同的方式,可以更透彻地理解该问题的物理思想,更好地利用此方法来解决实际问题.

1　WKB 近似法及其使用条件

对于薛定谔方程,当势函数为常数时,波函数的形式为:

$$\varphi=\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \tag{1}$$

式(1)中 $p=\sqrt{2m(E-U)}$,m 为粒子的质量,当 U 为位置的函数时,不妨设波函数为

$$\Phi=\exp\left(\frac{is}{\hbar}\right) \tag{2}$$

式(2)中 s 是坐标 x 的函数,一般说来如果 U 与常数很接近,则可认为 $s\approx px$,但要得到更精确的结果,就必须解薛定谔方程. 因此,对于一般的势函数,将 s 展开成 $\hbar$ 的幂级数

$$s=s_0(x)+\hbar s_1(x)+\frac{1}{2}\hbar^2 s_2(x)+\Lambda \tag{3}$$

为解得 s,将式(2)代入薛定谔方程经化简得到

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)^2+(U-E)-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 s}{\partial x^2}=0 \tag{4}$$

把(3)式代入(4)式,并舍去 $\hbar$ 二次幂以上的项得

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial s_0}{\partial x}\right)^2+(U-E)+\frac{\hbar}{m}\left(\frac{\partial s_0}{\partial x}\frac{\partial s_1}{\partial x}-\frac{i}{2}\frac{\partial^2 s_0}{\partial x^2}\right)+\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial s_0}{\partial x}\frac{\partial s_2}{\partial x}+\left(\frac{\partial s_1}{\partial x}\right)^2-i\frac{\partial^2 s_1}{\partial x^2}\right]=0 \tag{5}$$

因为此方程成立必须与 $\hbar$ 的取值无关,故 $\hbar$ 各次幂的系数必须分别为零. 由此得到下列方程

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial s_0}{\partial x}\right)^2+(U-E)=0 \tag{6}$$

$$\frac{\partial s_0}{\partial x}\frac{\partial s_1}{\partial x}-\frac{i}{2}\frac{\partial^2 s_0}{\partial x^2}=0 \tag{7}$$

$$\frac{\partial s_0}{\partial x}\frac{\partial s_2}{\partial x}+\left(\frac{\partial s_1}{\partial x}\right)^2-i\frac{\partial^2 s_1}{\partial x^2}=0 \tag{8}$$

这些方程能逐个解出,由 U−E 用式(6)可得 s_0;由 s_0 用式(7)可得 s_1;由 s_0、s_1 用式(8)可得 s_2. 如由式(6)得

$$\frac{\partial s_0}{\partial x}=\pm\sqrt{2m(E-U)}$$

$$s_0=\pm\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-U)}\,\mathrm{d}x \tag{9}$$

假设 E > U,仿上讨论可以解得

$$\exp(is_1)=\frac{1}{\sqrt[4]{2m(E-U)}}$$

$$s_2=\frac{1}{2}\frac{m\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)}{[2m(E-U)]^{3/2}}-\frac{1}{4}\int_{x_0}^{x}\frac{m^2\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)^2}{[2m(E-U)]^{5/2}}\mathrm{d}x$$

由 s_2 的表达式可见,只要 $\partial U/\partial x$ 较小,且 E-U 不趋于零,s_2 便较小. 也能证明[2],若 U 的所有阶导数都很小,则更高的项(s_3,s_4 等)都将趋于零. 在此条件下的近似解能较精确地反映实际情况. 因此

$$\frac{m\hbar(\partial U/\partial x)}{[2m(E-U)]^{3/2}}\ll 1 \tag{10}$$

成立与否是 WKB 近似法能否适用的判据. 取 $s=$

收稿日期:2008-03-27
作者简介:李文胜(1955-),男,湖北荆州人,副教授. 研究方向:大学物理教学与研究.

s_0,并代入(2)式中,则薛定谔方程的解是

$$\Phi = \frac{A}{\sqrt[4]{E-U}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-U)}\,\mathrm{d}x\right] + \frac{B}{\sqrt[4]{E-U}}\exp\left[\frac{-i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-U)}\,\mathrm{d}x\right] \tag{11}$$

式中 A、B 为任意常数,正、负指数分别对应沿 x 轴正、负方向传播的波,在 U 为常数的特殊情况下,它们均化为平面波.

2　选择基函数的两种方式

求解势垒贯穿问题是 WKB 近似法的重要应用. 对于如图 1 所示的势垒,利用该方法求解时,先选择某一区域的波函数[3](即基函数),然后利用连接公式,依次求出其它区域的波函数. 选择基函数有两种方式,即从左到右或从右到左.

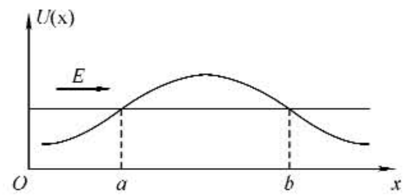

图 1　势垒函数图

Fig. 1　Figure of potential barrier function

对于从左到右,先选择 $x<a$ 区域的基函数形式为

$$\varphi_{\mathrm{I}} = \frac{2}{\sqrt{V}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{a}p\,\mathrm{d}x + \frac{\pi}{4}\right) \tag{12}$$

利用欧拉公式得

$$\varphi_{\mathrm{I}} = \frac{1}{i\sqrt{V}}\left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{a}p\,\mathrm{d}x + i\frac{\pi}{4}\right) - \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{a}p\,\mathrm{d}x - i\frac{\pi}{4}\right)\right] \tag{13}$$

其中 V 为入射粒子的速度,$p=\sqrt{2m(E-U)}$,m 为粒子的质量. 利用连接公式[4] 可以求得区域 $a<x<b$ 中的波函数为

$$\varphi_{\mathrm{II}} = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{a}^{x}|p|\,\mathrm{d}x\right) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_{a}^{b}p\,\mathrm{d}x\right|\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_{b}^{x}p\,\mathrm{d}x\right|\right) \tag{14}$$

再利用连接公式,可以求出 $x>b$ 区域内的波函数

$$\varphi_{\mathrm{III}} = -\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_{a}^{b}p\,\mathrm{d}x\right|\right)\times\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{b}^{x}p\,\mathrm{d}x + \frac{i\pi}{4}\right) \tag{15}$$

设由式(12)所示的基函数对应的入射粒子流密度为 1,则式(15)所表示的透射波对应的透射粒子流密度为

$$|\varphi_{\mathrm{III}}|^2 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\left|\int_{a}^{b}p\,\mathrm{d}x\right|\right) \tag{16}$$

因此势垒贯穿的几率为

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\left|\int_{a}^{b}\sqrt{2m(E-U)}\,\mathrm{d}x\right|\right) \tag{17}$$

对于从右到左,先选择 $x>b$ 区域中的基函数,在此区域由于只有沿 x 轴正向传播的波(即透射波),故其形式为

$$\varphi_{\mathrm{III}} = \frac{A}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{b}^{x}p\,\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right) \tag{18}$$

依连接公式,在 $a<x<b$ 区域中的波函数为

$$\varphi_{\mathrm{II}} = \frac{A}{\sqrt{q}}\left[\frac{1}{2}\exp\left(-\int_{x}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right) - i\exp\left(\int_{x}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right)\right] \tag{19}$$

式中 $q=ip$,再由连接公式,在 $x<a$ 的区域中的波函数为

$$\varphi_{\mathrm{I}} = \frac{-A}{\sqrt{p}}\left[\frac{1}{2}\exp\left(-\int_{a}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right)\sin\left(\int_{b}^{a}\frac{p}{\hbar}\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right) + 2i\exp\left(\int_{b}^{a}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right)\cos\left(\int_{x}^{a}\frac{p}{\hbar}\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)\right] \tag{20}$$

利用欧拉公式整理得到

$$\begin{aligned}\varphi_{\mathrm{I}} = &-\frac{iA}{\sqrt{p}}\left\{\exp\left[-i\left(\int_{a}^{x}\frac{p}{\hbar}\mathrm{d}x + \frac{\pi}{4}\right)\right]\times\left[\exp\left(\int_{a}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right) - \frac{1}{4}\exp\left(-\int_{a}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right)\right]\right\} - \\ &\frac{iA}{\sqrt{p}}\left\{\exp\left[i\left(\int_{a}^{x}\frac{p}{\hbar}\mathrm{d}x + \frac{\pi}{4}\right)\right]\times\left[\exp\left(\int_{a}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right) + \frac{1}{4}\exp\left(-\int_{a}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right)\right]\right\}\end{aligned} \tag{21}$$

由式(21)可见前半部为反射波,后半部为入射波,入射系数为

$$M = \left\{\frac{-iA}{\sqrt{p}}\left[\exp\left(\int_{a}^{b}\frac{q}{\hbar}dx\right) + \frac{1}{4}\exp\left(-\int_{a}^{b}\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right)\right]\right\} \tag{22}$$

考虑到

$$\exp\left(\int_a^b \frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right) \gg \exp\left(\int_a^b -\frac{q}{\hbar}\mathrm{d}x\right)$$

根据势垒贯穿几率的定义，由式(22) 和(19) 可以得到势垒贯穿的几率为

$$T = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\left|\int_a^b \sqrt{2m(E-U)}\,\mathrm{d}x\right|\right] \tag{23}$$

式(23) 和式(17) 完全一样.

3　两种方式的比较

按照从左到右的方法，处理的过程完全循照波实际传播的过程，这便于人们理解. 但是将其波函数 φ_{I} 取成正弦或余弦的形式，利用欧拉公式展开后，正如式(13) 所表示的那样，就会出现入射波和反射波强度相同的情况. 这样容易给人造成误解：既然两者的强度相等，即在 $x<a$ 的区域中，入射粒子全被势垒反射，而在 $x>b$ 的区域将不存在透射波，即势垒贯穿几率应为零，而不是式(17) 所表示的结果. 造成这种误解的原因是因为一开始就忽略了 $\frac{1}{4}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_a^b q\,\mathrm{d}x\right)$ 这一项[5]. 显然这样处理图像模糊，不便理解. 如果把 φ_I 取成入射波和反射波之和，且两者系数不同，显然可以避免上述问题，但计算将变得复杂，所以该方式也有些局限性. 然而，按照从右到左的方法，虽说求解过程逆着波的传播过程，计算量有所增加，但此方式中波函数 φ_{III} 只有透射波(沿 x 轴正方向传播的波)，物理图像十分清晰，便于理解. 所以此方式明显优于第一种方式.

4　结　语

求解金属电子的冷发射，放射性蜕变等都是势垒贯穿的重要应用[6]. 在实际应用过程中，应依照势垒的具体形式选择基函数. 既使得图像清晰，又使得计算相对简单，是我们选择基函数的标准.

参考文献：

[1] 李颜霞，毛日新. 用 WKB 近似法计算库仑场的分波相角[J]. 沈阳师范大学学报，2006，(4)：430-432.

[2] 林琼桂. 若干二维问题的 WKB 近似能级[J]. 大学物理，2002，(1)：23-25.

[3] 席　夫. 量子力学[M]. 北京：人民教育出版社，1982：308-321.

[4] Clark. H. A First Course in Quantum Mechanics [M]. New York：Van Nostrand Company，1982：174-186.

[5] 文焕邦，刘敬乾. 量子力学[M]. 成都：四川科学出版社，1986：152-156.

[6] 周世勋. 量子力学教程[M]. 北京：人民教育出版社，1979：44-50.

Methods of choosing basic function in WKB approximation

LI Wen-sheng*, *SUN Jian-mei

(Dept. of Basic Science, Hubei Automotive Industries Institute, Shiyan 442002, China)

Abstract: WKB approximation method has various utilisations including the calculation of potential barrier transmitter probability. In order to simplify the calculation, clear the images, and utilise connection formula, two methods of choosing the base functions in WKB approximation are discussed and compared in this article. The standard of choosing the base function has also been brought forward.

Key words: WKB approximation; potential barrier transmitter; basic function

本文编辑：萧　宁