

# 量子力学教学中引入三角周期势场的尝试

谢涛

四川轻化工大学物理与电子工程学院

**摘要:** 本文探讨了将三角周期势场引入量子力学教学的尝试。通过简单的数学变换, 将薛定谔方程写成标准Mathieu方程。采用打靶法数值求解Mathieu方程, 对粒子能量和势场幅度进行参数扫描, 得到了三角周期势场的能带结构。这一教学尝试有助于学生理解波动力学处理方法, 有助于培养学生的科研兴趣和提高教学质量。

**关键词:** 量子力学; 三角周期势场; Mathieu方程; 打靶法

【DOI】 10.12252/j.issn.2096-627X.2023.08.095

## 引言

在量子力学中, 三角周期势场是一个重要的模型, 它在多个领域都有着重要的应用和意义<sup>[1-4]</sup>。通过对三角周期势场的研究, 探讨波函数的周期性和离散能级等现象, 为理论物理研究提供了重要的模型和实验验证的基础。在半导体物理中, 三角周期势场可以用来描述晶格结构中的周期性势场对电子的影响。通过对三角周期势场的研究, 可以理解电子在晶格结构中的行为, 例如电子的能带结构、载流子的运输性质等。三角周期势场的研究还可以帮助理解光子晶体中的光子能带结构、光子的色散关系等重要光学性质。

将三角周期势场引入量子力学的教学尝试可以丰富教学内容, 有助于学生建立更全面的量子力学知识体系, 提高他们对不同势场特性的理解。引入三角周期势场的教学内容, 有助于提升学生对交叉学科的认识, 使其更好地适应未来科学研究和工程技术的发展需求。

因此, 将三角周期势场引入量子力学的教学尝试, 有助于提高教学效果, 激发学生的兴趣, 培养学生的研究能力, 以及更好地满足实际应用需求。

本文结构安排如下。第一节从薛定谔方程出发, 引入余弦周期势场后, 将其化为Mathieu方程。采用打靶法数值求解Mathieu方程, 得到在势场幅度与粒子能量平面图上的稳定区和不稳定区分布, 直观的展示了能带结构。并介绍了该项教学改革的优势和意义。第二节给

出总结。

## 一、理论基础和数值计算

薛定谔方程中的势场采用余弦周期形式, 则可以得到如下形式的方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0 \cos(kx)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

引入变量  $y = kx/2$ , 则上式可以写为标准的Mathieu方程<sup>[5]</sup>,

$$\frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + [a - 2q \cos(2y)]\psi(y) = 0 \quad (2)$$

其中,  $a = 8mE/\hbar^2k^2$ ,  $q = 4mV_0/\hbar^2k^2$ 。

将薛定谔方程化为Mathieu方程, 可以更方便地求解其周期性解, 从而更好地研究周期势场对量子系统的影响。同时, Mathieu方程也是一种常见的数学工具, 具有广泛的应用, 例如在声学、光学和电子学等领域中都有着重要的应用<sup>[6-9]</sup>。

我们注意到, 在实行如下三个变换时,

$$y \rightarrow -y;$$

$$y \rightarrow y \pm \pi;$$

$$y \rightarrow y \pm \pi/2, q \rightarrow -q;$$

Mathieu方程保持不变。也就是说, Mathieu方程的波函数具有  $\pi$  或  $2\pi$  的周期性, 以及确定的宇称, 因此Mathieu方程具有四种解<sup>[10]</sup>。我们将这四种解的宇称, 周期, 边界条件, 本征值和本征函数列表总结, 如表1所示。

表1 Mathieu方程的四种解和相应的边界条件

宇称	周期	边界条件	本征值	本征函数
偶	$\pi$	$\psi'(0) = \psi'(\pi/2) = 0$	$a_{2n}(q)$	$ce_{2n}(y, q)$
偶	$2\pi$	$\psi'(0) = \psi'(\pi/2) = 0$	$a_{2n+1}(q)$	$ce_{2n+1}(y, q)$
奇	$2\pi$	$\psi(0) = \psi(\pi/2) = 0$	$b_{2n+1}(q)$	$se_{2n+1}(y, q)$
奇	$\pi$	$\psi(0) = \psi(\pi/2) = 0$	$b_{2n+2}(q)$	$se_{2n+2}(y, q)$

本文采用打靶法数值求解Mathieu方程，打靶法是一种常用的数值求解微分方程的方法。其基本思想是将微分方程的边界值问题转化为一个初值问题，然后通过调整初始条件来寻找满足给定边界条件的解。对于二阶常微分方程，通常将其化为两个一阶微分方程，然后利用数值积分方法求解这个初值问题，从而得到原方程的数值解。

图1展示了Mathieu方程的本征值  $a_n(q)$  和  $b_n(q)$  随  $q$  的变化曲线。当  $q=0$  时，三角周期势场幅度为零，粒子自由，其能量连续。此时， $a_n(0) = n^2$ ， $b_n(0) = n^2$ 。当  $q$  有限时，填充色彩部分是稳定区域。只有在稳定区域的能量值才被允许，故这种能带被称为允带。未填充色彩部分是不稳定区域，其中的能量值不被允许，被称为禁带。当  $q \rightarrow \infty$  时，允带宽度趋于零，形成能级结构。

图1中的  $a_n(q)$  和  $b_n(q)$  构成了允带和禁带的交界。禁带决定了材料的导电性质，材料的导电性质与禁带的大小有关。对于导体来说，禁带很小或者不存在；对于绝缘体来说，禁带很大。同时，禁带宽度还决定了材料的吸收和发射光谱特性。能带结构中的允带宽度决定了材料的导电性质和光学性质。对于导体来说，能带宽度较大；对于绝缘体来说，能带宽度较小。另外，能带的形状对材料的电子输运性质有重要影响。例如，对于半导体，能带结构可能呈现出直接带隙或间接带隙的特征。总之，能带结构描述了固体中电子能级的分布情况，对于材料的导电性质、光学性质和电子结构等方面具有重要的物理意义。通过理论计算和实验研究，可以揭示不同材料的能带结构特征。

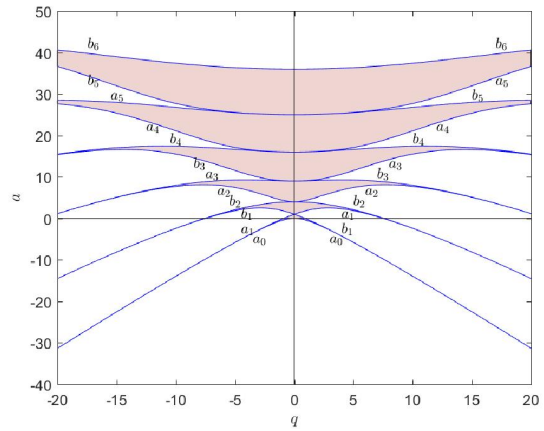


图1 Mathieu方程本征值  $a(q)$

图2展示了Mathieu方程在稳定区 ( $q=3, a=3$ ) 和不稳定区 ( $q=3, a=6$ ) 的本征函数，其中图2 (a) 和图2 (c) 代表偶宇称，图2 (b) 和图2 (d) 代表奇宇称。显然，在不稳定区的本征函数是无界的，粒子不可能出现在该区域。

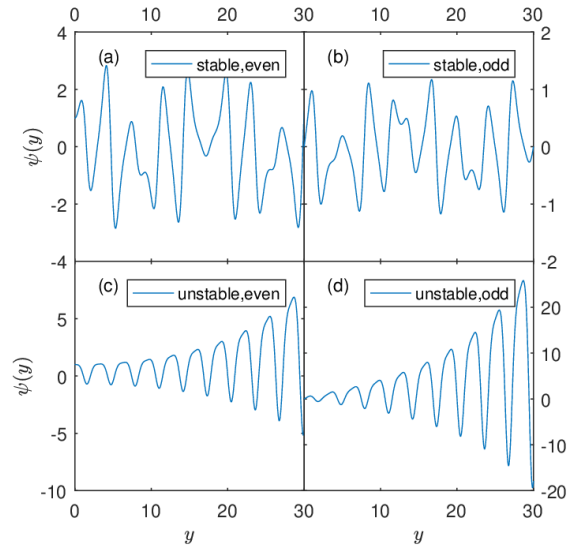


图2 Mathieu方程在稳定区和不稳定区的本征函数

该项工作对量子力学教学改革具有以下几点意义：

- (1) 引入数值方法。传统的量子力学教学通常采用理论推导和数学计算方法，而引入数值方法可以更加直观地展示量子力学的基本原理和现象。量子力学中的定态薛定谔方程属于二阶微分方程边值问题，对于这类问题，只要势场非奇异，都可以采用打靶法数值求解。所以，掌握这种数值计算方法对于学习量子力学是必不可少的；
- (2) 强化实践能力。首先，通过这一教学，学

生能够学习数值计算方法和编程技能。其次，学生在掌握数值计算方法和编程技能的过程中，会培养自身的科研素养。这对于学生未来从事科研工作或者工程技术领域的职业发展至关重要。此外，随着科技的不断发展，数值计算方法和编程技能已经成为许多行业的基本要求。因此，通过这项工作培养的实践能力和科研素养将为学生未来的学习和工作奠定坚实的基础；（3）拓展应用领域。首先，该项工作将量子力学应用于固体物理学中的能带结构计算，拓展了量子力学的应用领域。学生通过学习这一应用，能够深入了解不同学科之间的联系和交叉点，增强学生的学科交叉能力。其次，学生通过能带结构的计算，可以更加直观地理解能带结构的形成原理和特点。这有助于学生在后期的固体物理学习中深化对能带结构的理解，理解不同材料的导电性质和光学性质。通过学习这一应用，学生能够更加深入地了解材料的物理性质。

## 二、结论

本文尝试将三角周期势场引入量子力学的教学之中。通过一个简单的数学变换，薛定谔方程可化为Mathieu方程。采用打靶法数值求解这一方程，所得到的能量-势场幅度二维图，可以直观地展示能带结构，有助于学生更好地理解基本物理概念，提升他们对交叉学科的认识和理解，对学生的后期学习以及科研兴趣的培养具有积极影响。

## 参考文献

[1] Wolfgang Paul. Electromagnetic traps for charged and neutral particles[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1990, 62: 531-540.

[2] Juan Ignacio Cirac, Peter Zoller. Quantum Computations with Cold Trapped Ions[J]. *Physical Review Letters*, 1995, 74: 4091-4094.

[3] Raymond March. An Introduction to Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry[J]. *Journal*

*of Mass Spectrometry*, 1997, 32: 351-369.

[4] Harald J W Muller-Kirsten. Introduction to Quantum Mechanics: Schrodinger Equation and Path Integral[M]. Singapore: World Scientific Publishing Company Private Trading Enterprise Limited, 2012: 339-378.

[5] Norman McLachlan. Theory and Application of Mathieu Functions[M]. London: Oxford University Press, 1947: 10-27.

[6] Lawrence Ruby. Application of Mathieu Equation[J]. *American Journal of Physics*, 1996, 64: 39-44.

[7] Vladimir Baranov. Analytical approach for description of ion motion in quadrupole mass spectrometer[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2003, 14: 818-824.

[8] Ana Maria Rey, Guido Pupillo, Charles Clark, Carl Williams. Ultracold atoms confined in an optical lattice plus parabolic potential: A closed-form approach[J]. *Physical Review A*, 2005, 72: 033616.

[9] Muhammad Ayub, Khalid Naseer, Manzoor Ali, Farhan Saif. Atom optics quantum pendulum[J]. *Journal of Russian Laser Research*, 2009, 30: 205-223.

[10] Milton Abramowitz, Irene Stegun. Handbook of Mathematical Functions[M]. Washington, DC: US Government Printing Office, 1964: 721-750.

作者简介：谢涛（1976年-），男，讲师，主要从事大学物理教学和等离子体微湍流理论研究。

基金项目：四川省科技厅自然科学基金面上项目“托卡马克二维微观撕裂模气球理论研究”（2023NSFSC0069）。