arXiv:2303.02507v1 [quant-ph] 4 Mar 2023

具有位置相关质量的动能哈密顿量

R. M. Lima[1] 和 H. R. Christiansen[1,2*]

塞阿拉联邦教育、科学与技术学院,

邮编 62042-030 - 索布拉尔[1],和邮编 61940-750 - 马兰瓜佩[2],塞阿拉州，巴西

摘要

本文系统地考察了五种不同位置相关质量（PDM）分布下纯动能哈密顿量最相关的排序：类孤子型、倒数二次型和双二次型、指数型以及抛物型。由于动量算符与位置算符不对易，会产生多种有效势。我们分析了这些有效势的整体集合，发现其中既有出乎意料的相同之处，也存在差异。针对所考虑的二十五种情形，我们解析地求得了完整能谱和解。我们展示了简单的常质量解如何转化为由超越函数及其自变量构成的各种复杂组合。我们发现，具有非均匀质量密度的粒子可以呈现离散能谱，也可以呈现连续能谱；后者既可能有界，也可能无界。这些结果与以下事实相符：尽管外势为零，位置依赖质量本征函数并非真正的自由态，而是固态样品中的某种有效波。这正是位置依赖质量的起源。在所有情形下，我们都得到了精确而完整的谱表达式。因此，我们的方法将各种哈密顿量基元置于同等基础上，以便进行比较。这使我们能够在获得特定材料的实验能谱后，选择更合适的排列方式来模拟特定固体或异质结构。最后，我们对界面区域具有抛物型位置依赖质量粒子的双异质结构进行了一维模型计算。我们的研究也适用于在材料结构中加入外势的应用。

关键词： 量子力学；位置依赖质量；解析能谱；量子异质结构。

Publ发表于*Physica E: Low dimensional Systems and Nanostructures 150 (2023) 115688*。

*通讯作者。电子邮箱：hugo.christiansen@ifce.edu.br

1 引言

具有非均匀质量的粒子的量子力学一直受到哈密顿量对动力学变量排序的依赖这一问题的困扰。这个问题起源于固体物理学领域 [1–5]不久后，从涉及基本对称性的更为根本的角度来看，它也引起了人们的兴趣 [6–10]。

自20世纪60年代以来，位置依赖质量（PDM）模型一直在持续发展，并不断完善至今。特别是在过去十年中，由于其应用领域广泛，对位置依赖质量粒子量子系统的建模得到了发展 [11–16]。其中，该技术已被应用于理解半导体异质结构、晶体生长技术 [5, 17], 量子阱和量子点 [18–28], 氦团簇 [29], 梯度晶体 [30], 量子液体 [31], 具有尺寸变化、杂质、位错和几何缺陷的纳米线结构 [32–35], , 以及超导体研究 [4, 5, 7, 17, 30, 36–40]中的电子性质。

与此同时，量子系统的动力学已与从低能到高能物理的各类问题相关联而得到广泛研究。从数学上讲，该问题在于处理一个薛定谔方程；对于定态系统，这将归结为希尔伯特空间中的一个特征值问题 [41]。

在普通量子力学中，可精确求解势的数量相对有限；但一旦将恒定质量改为位置依赖分布，数学难题便会大幅增加。为了解析地处理这些问题，人们采用了不同的方法。我们将应用点正则变换，它能保持波动方程的标准形式不变 [11, 21, 22, 42, 43], , 但也存在其他方法，例如超对称量子力学 [44、李代数 [47] 和魏尔积分量子化 [48, 49] （更多参考文献见 [23, 50]），近年来这些方法也得到了应用。

对于非均匀质量， $M \equiv M(\boldsymbol{r})$，最一般的厄米动能哈密顿量 [1] 可表示为 [7]

$$\hat{T}_{a,b}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4}\left(M^a \hat{\boldsymbol{p}} M^{-1-a-b} \hat{\boldsymbol{p}} M^b + M^b \hat{\boldsymbol{p}} M^{-1-a-b} \hat{\boldsymbol{p}} M^a\right) , \tag{1}$$

其中 a， $b \in \mathbb{R}$ 是质量参数，且 $\hat{\boldsymbol{p}} \equiv -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$

文献中常见该表达式的一些特例将在此进行研究，并分别简称为 BDD（BenDaniel & Duke） [4] $(a = b = 0)$、 GW （ Gora & Williams） [5, 17, 36, 55]$(a = -1, b = 0)$、ZK（Zhu & Kroemer） [37] $(a = b = -1/2)$、LK（Li & Kuhn） [55] $(a = 0, b = -1/2)$ 和 MM（Mustafa & Mazharimousavi） [25] $(a = b = -1/4)$哈密顿量（或排序）。在 [7] 中，由质量参数以及伽利略

[1] 关于非厄米哈密顿量的讨论，见 [51, 52]。还值得注意的是，尽管宇称-时间对称性弱于厄米性，但已证明它在某些情况下允许幺正时间演化；见 [53] 和 [54]。

不变性所导致的固有模糊性（除非考虑 BDD排序[2]）也被指出——然而，值得注意的是，其他作者 [26, 45] 提出了 von Roos哈密顿量的推广形式，甚至提出了替代方案，并证明其遵循伽利略变换——此外，当考虑突变异质结（其特征是位置依赖质量存在有限不连续性）时 [56] 只有 $a = b$排序是可行的，前提是在一维情况下施加连续性条件于 $M^a\Psi(x)$和 $M^{-1-a}\Psi'(x)$。明显的伽利略不变性以及动能起源的模糊势消失（见下文）似乎是使 BDD 成为文献中最具共识的动能哈密顿量的主要原因，例如 [21, 22, 42, 43]。在 [39, 57]中也可以找到一些采用 BDD 质量参数的实验拟合结果。尽管如此，其他排序也已在某些系统中取得成功 [50], ，尤其是在界面并不突变时。例如，在某种材料内部对势和质量进行指数建模的情况下，应舍弃 BDD排序 [58]。

本文的安排如下。在第 2 节中，我们推导出一个仅涉及无量纲量的波函数微分方程；在第 2.1 小节中，我们聚焦于一维情形，并应用点正则变换，以便在质量为常数的空间中获得新波函数所满足的薛定谔方程。在第 3节中，在假设不存在外势的情况下，我们分析以下五种质量分布：类孤子分布和倒双二次分布（第 3.1小节）、倒数二次分布（第3.2小节）、指数分布（第 3.3小节）以及抛物线分布（第 3.4小节）。对于每种情形，我们都求得有效势、完整的能谱以及精确解析解，并绘制相应的概率密度。在第 4 节中，我们求解一维双异质结构问题：异质结内为抛物线型位置依赖质量粒子，异质结两侧的物质具有不同的质量载流子。最后，在第 5 节中，我们给出结论。

2 波函数的动力学方程

现在，我们将上述动能哈密顿量改写，以明确歧义部分，

$$\hat{T}_{a,b}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2M}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{1}{2M}\left(\frac{1}{M}\hat{\boldsymbol{p}}M\right)\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + U_{a,b}(\boldsymbol{r})\,, \tag{2a}$$

其中

$$U_{a,b}(\boldsymbol{r}) \equiv \frac{1}{2M}\left[\frac{a+b}{2}\hat{\boldsymbol{p}}\left(\frac{1}{M}\hat{\boldsymbol{p}}M\right) - \left(ab + \frac{a+b}{2}\right)\left(\frac{1}{M}\hat{\boldsymbol{p}}M\right)^2\right] \tag{2b}$$

[2]事实上，在 [9] 考虑伽利略不变性后可推导出 BDD（类似结果可见于 [8]）。

其表现得像一个源自动能起源的势项（值得注意的是，在此处分析的哈密顿量中，BDD排序是唯一使歧义项为零的排序）。

^若我们在$T_{a,b}(\boldsymbol{r})$ 中加入外势 $V(\boldsymbol{r})$，则可得到位置依赖质量粒子的波函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 所满足的以下微分方程

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\boldsymbol{\nabla}^2\Psi(\boldsymbol{r})+\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\boldsymbol{\nabla}M}{M}\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi(\boldsymbol{r})+\left(U_{a,b}(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\right)\Psi(\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{r})\,,$$
$$U_{a,b}(\boldsymbol{r})=-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{a+b}{2}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{\nabla}M}{M}\right)-\left(ab+\frac{a+b}{2}\right)\left(\frac{\boldsymbol{\nabla}M}{M}\right)^2\right]\,. \quad (3)$$

这是一个广义薛定谔方程，与通常的常质量薛定谔方程相比，它是一个截然不同的微分方程。

我们通过 $\boldsymbol{r}\to\epsilon\boldsymbol{r}$、 $\Psi(\boldsymbol{r})\to\epsilon^{-D/2}\psi(\boldsymbol{r})$和 $M(\boldsymbol{r})\to m_0 m(\boldsymbol{r})$对上述方程进行变换，其中$\boldsymbol{r}$ 现在是无量纲的； D 为空间维数； ϵ 和 m_0 分别是长度和质量的正值常数； $\psi(\boldsymbol{r})$ 和 $m(\boldsymbol{r})$ 分别是无量纲且经过重标度的波函数和质量。广义薛定谔方程变为

$$-\frac{1}{m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\boldsymbol{r})+\frac{1}{m}\frac{\boldsymbol{\nabla}m}{m}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r})+\left(\tilde{U}_{a,b}(\boldsymbol{r})+\tilde{V}(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r})=\tilde{E}\psi(\boldsymbol{r})\,, \quad (4a)$$

其中我们简记 $m(\boldsymbol{r})\equiv m$，并且

$$\tilde{E}\equiv\frac{2\epsilon^2 m_0}{\hbar^2}E\quad,\quad\tilde{V}(\boldsymbol{r})\equiv\frac{2\epsilon^2 m_0}{\hbar^2}V(\epsilon\boldsymbol{r})\quad\text{and}$$
$$\tilde{U}_{a,b}(\boldsymbol{r})\equiv\frac{2\epsilon^2 m_0}{\hbar^2}U_{a,b}(\epsilon\boldsymbol{r})=-\frac{1}{m}\left[\frac{a+b}{2}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{\nabla}m}{m}\right)-\left(ab+\frac{a+b}{2}\right)\left(\frac{\boldsymbol{\nabla}m}{m}\right)^2\right] \quad (4b)$$

分别表示无量纲且经过适当重标度的能量、外势和歧义动能势。

2.1 修改后的空间坐标中的新波函数的薛定谔方程

对于一维情形，当 $\hat{p}\equiv-i\hbar\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ 且 $m\equiv m(x)$ 时，我们将进行变量替换

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x}=m^{1/2}\Leftrightarrow z(x)=\int^x\sqrt{m(x)}dx\,, \quad (5a)$$

映射 $\mathbb{R}\ni x\mapsto z\in\mathcal{D}\subset\mathbb{R}$，并定义一个函数 $\zeta(z)$，使得

$$\psi(x)=m^{1/4}\,\zeta(z(x))\,. \quad (5b)$$

将其代入方程（4a），我们得到一个关于质量恒定粒子的薛定谔方程，

$$-\zeta''(z)+V_{a,b}(z)\zeta(z)=\tilde{E}\zeta(z)\,, \tag{6a}$$

其无量纲有效势为

$$V_{a,b}(z)\equiv\tilde{V}\left(x(z)\right)+\frac{1}{m}\left[-\frac{1}{2}\left(a+b+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{m'}{m}\right)'+\left(ab+\frac{a+b}{2}+\frac{3}{16}\right)\left(\frac{m'}{m}\right)^2\right]\,, \tag{6b}$$

其中，为简便起见，我们记作 $m'\equiv\frac{m}{\mathrm{d}x}\Big|_{x(z)}$和 $m\equiv m\left(x(z)\right)$。请注意，对于 MM排序，有效势仍简单地为 $V_{a,b}(z)=V(x(z))$。

~由于此处我们关注的是不存在外势的情形，因此处处取 $V(x)=0$。当有效势$V_{a,b}(z)$ 关于某一点对称时，我们可以将方程组（6a）的通解 $\zeta_{a,b}(z)$写成关于同一点的对称和反对称特解的线性组合（LC）。得到满足边界条件的解后，我们使用方程组（5）在 x空间中写出本征函数（这是我们的最终目标）。

可以看出， $\Psi(x)$ 的归一化条件对 $\psi(x)$同样成立。另一方面，由方程组（5）容易看出，$|\psi(x)|^2dx=|\zeta(z)|^2dz$，这使得我们可以将 $\zeta(z)$解释为 z空间中的薛定谔波函数，其归一化满足 $\int_D|\zeta(z)|^2dz=1$，其中 $|\zeta(z)|^2$是概率密度。

3 质量分布

接下来，我们将介绍文献中出现的各种非均匀连续质量分布，其中一些也会在本文中引用。我们研究采用这类质量时，五种最重要的哈密顿量排序所对应的微分方程。首先，我们计算各个情形下的有效势，然后对其进行解析处理。在每种情形下，我们都将得到完整的精确能谱及相应的本征解。我们分析边界条件，并展示若干代表性态的概率密度。

3.1 类孤子与倒数双二次轮廓

让我们聚焦于两种特定的质量函数：孤子型分布[3] [11–13]，

$$M(x)=m_0\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{x}{\epsilon}\right)\Leftrightarrow m(x)=\mathrm{sech}^2\,x\,, \tag{7a}$$

[3]当考虑双曲势时，这种轮廓可能尤其合适。此外，在存在孤子解的含位置依赖质量（PDM）的非线性薛定谔方程中，它或许也是自然的选择。

以及倒双二次分布，

$$M(x) = m_0 \left[1 + \left(\frac{x}{\epsilon}\right)^2\right]^{-2} \Leftrightarrow m(x) = \left(1 + x^2\right)^{-2} \ . \tag{7b}$$

如下文将明确的那样，将这两个不同的轮廓一并处理会更为方便。

3.1.1 有效势

对于所谓的类孤子质量和倒数双二次质量分布，式（5a）给出

$$\begin{cases} \operatorname{sech} x = \cos z & \text{(for the soliton-like profile)} \\ x = \tan z & \text{(for the reciprocal biquadratic profile)} \end{cases} , \tag{8}$$

两种映射 $\mathbb{R} \ni x \mapsto z \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$。在这种情况下，以下标 a 和 b参数化的有效势——式（6b）——分别为

$$V_{a,b}(z) = \omega_{a,b} \tan^2 z + V_{a,b}^{(0)} \ , \tag{9a}$$

其中

$$\omega_{a,b} \equiv 4ab + 2(a+b) + \frac{3}{4} \quad \text{and} \quad V_{a,b}^{(0)} \equiv V_{a,b}(0) = a + b + \frac{1}{2} \tag{9b}$$

对于类孤子质量，以及

$$\omega_{a,b} \equiv 16ab + 6(a+b) + 2 \quad \text{and} \quad V_{a,b}^{(0)} \equiv V_{a,b}(0) = 2(a+b) + 1 \tag{9c}$$

倒数双二次质量（见表 1）。

表 1：对于最相关的排序以及每种质量分布，$\omega_{a、b}$ 和 $V_{a\,b}^{(0)}$ 的值。

排序	类孤子质量		倒数双二次质量	
	$\omega_{a,b}$	$V_{a,b}^{(0)}$	$\omega_{a,b}$	$V_{a,b}^{(0)}$
BDD	$3/4$	$1/2$	2	1
GW	$-5/4$	$-1/2$	-4	-1
ZK	$-1/4$	$-1/2$	0	-1
LK	$-1/4$	0	-1	0
MM	0	0	0	0

参数 $\omega_{a,\ b}$ 决定了V_a的全局行为：$_b(z)$：当 $\omega_{a,\ b} > 0$，$V_{a,\ b}(z)$ 是

无限深势阱；当 $\omega_{a,\ b} < 0$，$V_{a,\ b}(z)$ 是无底势垒；最后，当 $\omega_{a,\ b} = 0$，$V_{a,\ b}(z)$ 为常数。，$_b(z)$的图像见图 1。

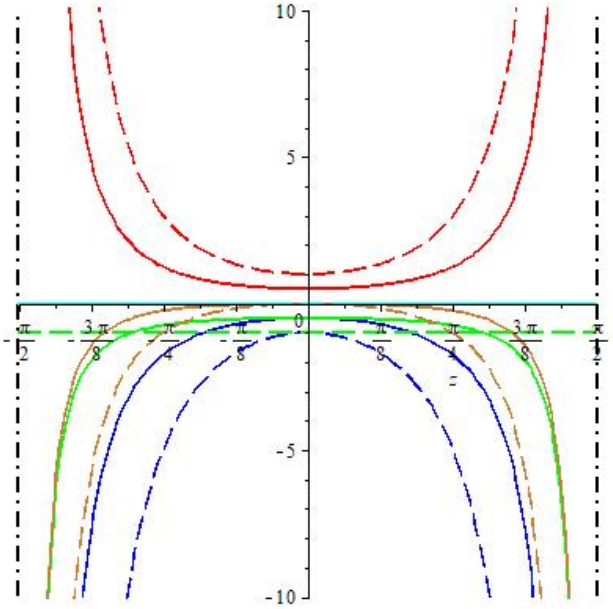


图 1：$V_{a,\ b}(z)$ 在类孤子（实线）和倒数双二次（虚线）轮廓下，以及采用 BDD、GW、ZK、LK 和 MM 排序时（分别以红色、蓝色、绿色、金色和青色表示）的形状。

3.1.2 解

现在，我们通过以下方式定义变量 y

$$y = \sin^2 z\,, \tag{10a}$$

它将 $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) \ni z \mapsto y \in [0,1)$ 映射到……，并定义函数 $\xi(y)$ 为

$$\zeta(z(y)) = y^{\mu}\,(1-y)^{\nu}\,\xi(y) \quad , \quad \mu, \nu \in \mathbb{C}\,. \tag{10b}$$

将其代入方程（6a），得到微分方程

$$y\,(1-y)\,\xi''(y) + \left[2\mu + \frac{1}{2} - (2\mu + 2\nu + 1)\,y\right]\xi'(y) + \\ + \left[\frac{\mu^2 - \frac{\mu}{2}}{y} + \frac{\nu^2 - \frac{\nu}{2} - \frac{\omega_{a,b}}{4}}{1-y} + \frac{\mathcal{E}_{a,b} + \omega_{a,b}}{4} - (\mu+\nu)^2\right]\xi(y) = 0\,, \tag{11}$$

其中 $\mathcal{E}_{a,\ b} \equiv \tilde{E} - V^{(0)}_{a\,b}$，。$\mathcal{E}_{a,\ b}$ 因此对应于相对于该值测得的能级

，该值为原点处的有效势。

选择 μ 和 ν 使得[4]

$$\mu^2-\frac{\mu}{2}=0\Rightarrow\mu_\pm=\frac{1\pm1}{4}\quad\text{and}\quad\nu^2-\frac{\nu}{2}-\frac{\omega_{a,b}}{4}=0\Rightarrow\nu_{a,b}=\frac{1}{4}\left(1-\sqrt{1+4\omega_{a,b}}\right)\,,\tag{12}$$

上述微分方程变为

$$y(1-y)\,\xi''(y)+\left[2\mu_\pm+\frac{1}{2}-\left(2\mu_\pm+2\nu_{a,b}+1\right)y\right]\xi'(y)-\\-\left[\left(\mu_\pm+\nu_{a,b}\right)^2-\frac{\mathcal{E}_{a,b}+\omega_{a,b}}{4}\right]\xi(y)=0\,.\tag{13}$$

这是一个高斯超几何方程，

$$\left\{y(1-y)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+\left[\gamma-(\alpha+\beta+1)\,y\right]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}-\alpha\beta\right\}{}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;y)=0\,,\tag{14}$$

其中 ${}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;y)$ 是参数为

$$\gamma_\pm\equiv2\mu_\pm+\frac{1}{2}=1\pm\frac{1}{2}\quad,\quad\alpha^\pm_{a,b}\equiv\mu_\pm+\nu_{a,b}+\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{E}_{a,b}+\omega_{a,b}}\quad\text{and}\quad\beta^\pm_{a,b}\equiv\mu_\pm+\nu_{a,b}-\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{E}_{a,b}+\omega_{a,b}}\,.$$

对于 μ的每个取值，在 $y=0$附近的一个解是 $\xi^\pm_{a,b}(y)={}_2F_1\left(\alpha^\pm_{a,b},\beta^\pm_{a,b};\gamma_\pm;y\right)$。由于$\gamma_\pm\notin\mathbb{Z}$，第二个独立解为 $\bar{\xi}^\pm_{a,b}(y)=y^{1-\gamma_\pm}{}_2F_1\left(\alpha^\pm_{a,b}+1-\gamma_\pm,\beta^\pm_{a,b}+1-\gamma_\pm;2-\gamma_\pm;y\right)$。通过方程组（10），我们得到在 z空间中的两个独立解（偶解和奇解）：

$$\zeta^\pm_{a,b}(z)=(\sin z)^{2\mu_\pm}(\cos z)^{2\nu_{a,b}}{}_2F_1\left(\alpha^\pm_{a,b},\beta^\pm_{a,b};\gamma_\pm;\sin^2z\right)\,.\tag{16}$$

利用方程组（x 空间中的解可由方程（5b）、（8）和（16）得到。对于类孤子质量，有

$$\begin{aligned}\psi^\pm_{a,b}(x)&=(\tanh x)^{2\mu_\pm}(\operatorname{sech}x)^{2\nu_{a,b}+\frac{1}{2}}{}_2F_1\left(\alpha^\pm_{a,b},\beta^\pm_{a,b};\gamma_\pm;\tanh^2x\right)\\&=(\tanh x)^{2\mu_\pm}(\operatorname{sech}x)^{2\nu_{a,b}+\frac{1}{2}}\times\\&\times{}_2F_1\left(\mu_\pm+\nu_{a,b}+\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{E}_{a,b}+\omega_{a,b}},\mu_\pm+\nu_{a,b}-\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{E}_{a,b}+\omega_{a,b}};1\pm\frac{1}{2};\tanh^2x\right)\,,\end{aligned}\tag{17a}$$

[4]可以看出，$\nu_{a\text{的两个取值}b}$ 在 z 空间中会导出相同的解；为便于边界条件的分析，我们将采用负号。

而对于倒数双二次质量，

$$\psi^{\pm}_{a,b}(x) = x^{2\mu_\pm}\left(1+x^2\right)^{-\left(\mu_\pm+\nu_{a,b}+\frac{1}{2}\right)}{}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_\pm;\frac{x^2}{1+x^2}\right)$$
$$= x^{2\mu_\pm}\left(1+x^2\right)^{-\left(\mu_\pm+\nu_{a,b}+\frac{1}{2}\right)}\times$$
$$\times\,{}_2F_1\left(\mu_\pm+\nu_{a,b}+\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{E}_{a,b}+\omega_{a,b}},\mu_\pm+\nu_{a,b}-\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{E}_{a,b}+\omega_{a,b}};1\pm\frac{1}{2};\frac{x^2}{1+x^2}\right). \quad (17b)$$

方程（17）表明，若我们比较两个具有相同$\omega_{a\text{值的排序，}b}$（如具有类孤子质量的ZK排序和LK排序，或具有倒数双二次质量的ZK排序和MM排序），则其波函数仅在$\mathcal{E}_{a\text{方面有所不同，}b}$。因此，在这种情况下，若我们选择能级使得两个哈密顿量的$\tilde{E}-V^{(0)}_{a\,b}$相同，则两种排序的解也将完全相同。

3.1.3 能谱

z空间解必须满足边界条件$\zeta_{a,b}\left(\pm\frac{\pi}{2}\right)=0$。根据$\omega_{a,b}$的符号，我们区分三种情况。由夹逼定理可得，对于$\omega_{a,b}<0$，$\lim_{|z|\to\frac{\pi}{2}^-}(\cos z)^{2\nu_{a,b}}=$为0；对于$\omega_{a,b}=0$，为1；而对于$\omega_{a,b}>0$，为$\infty$。因此，对于$\omega_{a,b}\geq 0$，我们必须施加${}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_\pm;1\right)=\bar{0}$。这对应于类孤子质量的 MM 和 BDD 排序，以及倒数双二次质量的 BDD、ZK 和 MM 排序。当$\Re\left(\gamma_\pm-\alpha^{\pm}_{a,b}-\beta^{\pm}_{a,b}\right)=\Re\left(\frac{1}{2}\sqrt{1+4\omega_{a,b}}\right)>0$时，我们可以使用高斯求和定理 [59] 将其改写为

$${}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_\pm;1\right)=\frac{\Gamma\left(1\pm\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\sqrt{1+4\omega_{a,b}}\right)}{\Gamma\left(\gamma_\pm-\alpha^{\pm}_{a,b}\right)\Gamma\left(\gamma_\pm-\beta^{\pm}_{a,b}\right)}. \quad (18)$$

因此，边界条件意味着$\gamma_\pm-\alpha^{\pm}_{a,b}=-\kappa$, $\kappa\in\mathbb{Z}_+$ ($\kappa=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$)，进而使通解具有离散非简并能谱。该能谱如下

$$\tilde{E}_{a,b;n}=n^2+2\left(1-2\nu_{a,b}\right)n+1-2\nu_{a,b}+V^{(0)}_{a,b}\quad,\quad n\in\mathbb{Z}_+, \quad (19)$$

其中，对于解$\psi^{-}_{a,b}(x)$（偶解），$n\equiv 2\kappa$；对于解$\psi^{+}_{a,b}(x)$（奇解），$n\equiv 2\kappa+1$。基态为$\tilde{E}_{a,b;0}=1-2\nu_{a,b}+V^{(0)}_{a\,b}$，这大于$V^{(0)}_{a\,b}$，符合预期。

另一方面，对于$\omega_{a,b}<0$，有效势是无底势垒，并且对于任意能级，边界条件都会自动满足。谱由

边界处的导数 $\zeta^{\pm}_{a,\ b}{}'(z)$

$$\lim_{z\to\pm\frac{\pi}{2}}\zeta^{\pm}_{a,b}{}'(z)=-2\nu_{a,b}{}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_{\pm};1\right)\lim_{z\to\pm\frac{\pi}{2}}(\cos z)^{2\nu_{a,b}-1} \tag{20}$$

这是发散的。实际上，对于 $-\frac{1}{4}<\omega_{a,\ b}<0$ 可以通过约去超几何函数中的相同因子来避免奇点。在这种情况下，我们会得到与式（19）相同的谱。这个结果非常出乎意料，因为无底势垒似乎表现得像无限深势阱。对于 $\omega_{a,\ b}\leq-\frac{1}{4}$ 则无法这样做，因为超越方程 ${}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_{\pm};1\right)=0$ 在 $\tilde{E}$时无解；因此，具有类孤子质量的 GW、ZK 和 LK 排序，以及具有倒数双二次质量的 GW 和 LK 排序，不存在物理上可接受的态，必须予以舍弃。

Now 我们可以用 $\hbar$简洁地写出离散本征态（偶态和奇态）：

$$\psi^{\pm}_{a,b;\hbar}(x)=(\tanh x)^{2\mu_{\pm}}(\operatorname{sech}x)^{2\nu_{a,b}+\frac{1}{2}}{}_2F_1\left(2\mu_{\pm}+\frac{1}{2}+\hbar,2\nu_{a,b}-\frac{1}{2}-\hbar;1\pm\frac{1}{2};\tanh^2 x\right) \tag{21a}$$

对于类孤子质量，以及

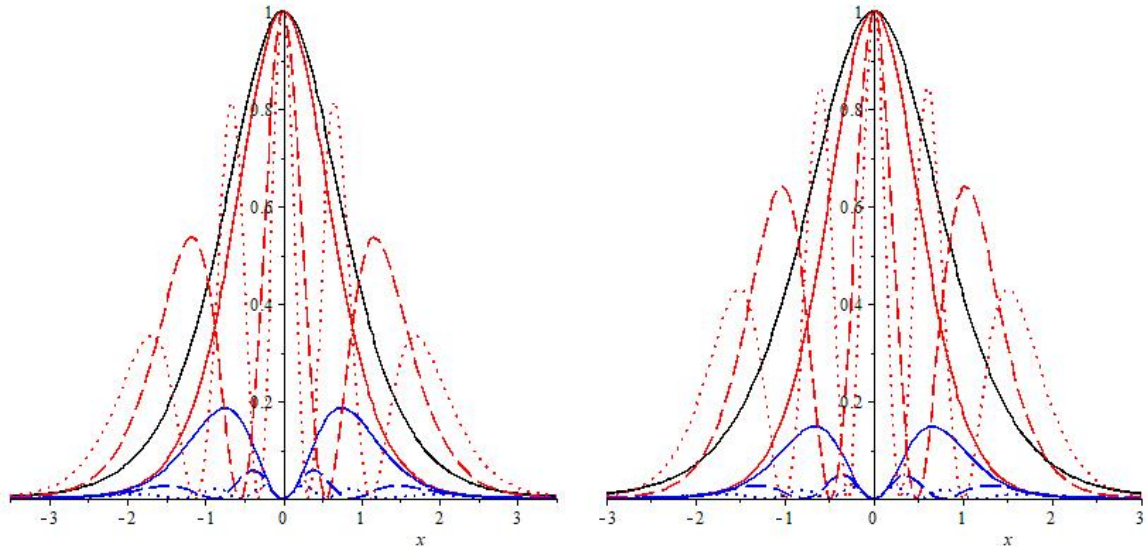
$$\psi^{\pm}_{a,b;\hbar}(x)=x^{2\mu_{\pm}}\left(1+x^2\right)^{-\left(\mu_{\pm}+\nu_{a,b}+\frac{1}{2}\right)}{}_2F_1\left(2\mu_{\pm}+\frac{1}{2}+\hbar,2\nu_{a,b}-\frac{1}{2}-\hbar;1\pm\frac{1}{2};\frac{x^2}{1+x^2}\right) \tag{21b}$$

对于倒数双二次质量。

3.1.4 概率密度图

各个特定解对应的概率密度 $\rho^{\pm}_{a,\ b}(x)\equiv\left|\psi^{\pm}_{a,\ b}(x)\right|^2$ 和 $\rho^{\pm}_{a,\ b;\hbar}(x)\equiv\left|\psi^{\pm}_{a,\ b;\hbar}(x)\right|^2$ 绘于图 2 和 3 （分别对应类孤子质量和倒数双二次质量）。

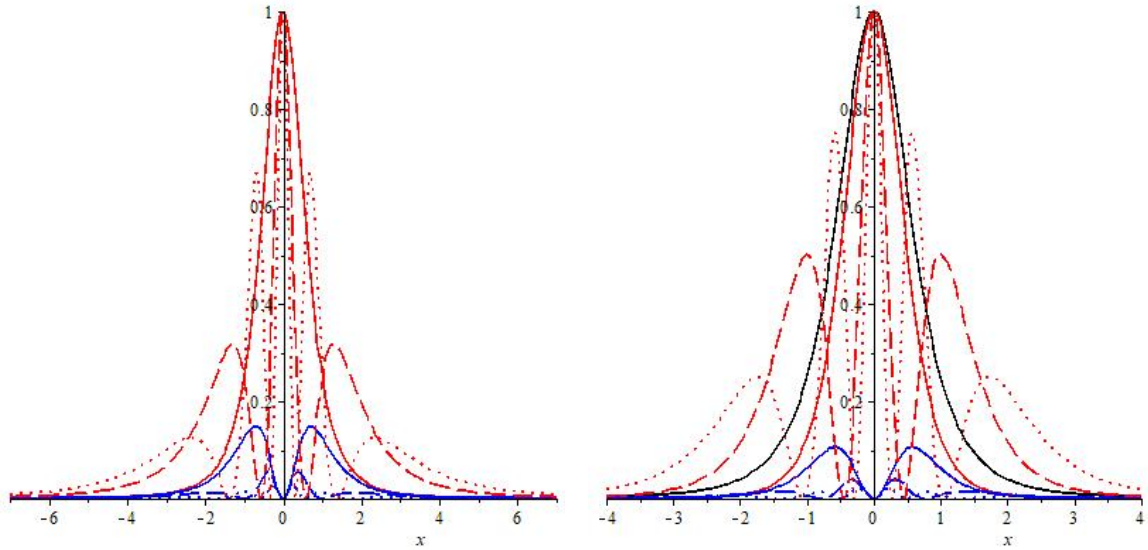
从图3(a) 可以看出，$\rho^{-}_{-1/2,\ -1/2;0}(x)=\rho^{-}_{-1/4,\ -1/4;0}(x)=m(x)$；利用恒等式 ${}_2F_1(\alpha,\beta;\alpha;y)=(1-y)^{-\beta}$ 很容易通过代数运算验证这一点。



(a) $\rho^{\pm}$的图 (x) 在 $\hbar = 0$下的图，1 和 2（分别用固体、虚线和点线表示）$_{-1/4,}^{-1/4;\hbar}$。

(b) $\rho^{\pm}$的图 (x)对于 $\hbar = 0$，1 和 2（分别用实线、虚线表示和点线）。$_{0,\ 0;\hbar}$

图 2：类孤子质量下偶（红色）和奇（蓝色）未归一化解对应的概率密度图，以及（a）MM 和（b）BDD 排序。黑色实线对应于 $m(x) = \mathrm{sech}^2 x$。



（a）$\rho^{\pm}_{-1/2,\ -1/2;\hbar}(x)$ 和 $\rho^{\pm}_{-1/4,\ -1/4;\hbar}(x)$ 的图；（b）$\rho^{\pm}_{0\ ,\ 0;\hbar}(x)$ 的图，对于 $\hbar = 0$，1 和 2（分别用实线、虚线$\hbar = 0$，1 和 2（分别用实线、虚线和点线表示）。表示）。

图 3：倒数双二次质量下偶（红色）和奇（蓝色）未归一化解对应的概率密度图，以及（a）ZK 和 MM，以及（b）BDD 排序。黑色实线对应于 $m(x) = \left(1 + x^2\right)^{-2}$。

3.2 倒二次质量轮廓

现在我们研究倒二次质量 [14, 23, 60–63],

$$M(x) = m_0\left[1+\left(\frac{x}{\epsilon}\right)^2\right]^{-1} \Leftrightarrow m(x) = \left(1+x^2\right)^{-1}. \tag{22}$$

3.2.1 有效势

对于这种质量，式（5a）得出

$$x = \sinh z\,, \tag{23}$$

映射 $\mathbb{R} \ni x \mapsto z \in \mathbb{R}$。有效势——式（6b）——为

$$V_{a,b}(z) = \omega_{a,b}\,\mathrm{sech}^2\, z + V_{a,b}^{(\infty)} = V_{a,b}^{(0)} - \omega_{a,b}\tanh^2 z\,, \tag{24a}$$

其中我们定义（见表 2）

$$\omega_{a,b} \equiv \frac{1}{4} - 4ab \quad , \quad V_{a,b}^{(0)} \equiv V_{a,b}(0) = a+b+\frac{1}{2} \quad \text{and} \quad V_{a,b}^{(\infty)} \equiv V_{a,b}(\pm\infty) = 4ab+a+b+\frac{1}{4}\,. \tag{24b}$$

表 2：对于倒二次质量的每种排序，$\omega_{a、b}$、$V_{a\,b}^{(0)}$、和 $V_{a\,b}^{(\infty)}$ 的取值。

排序	$\omega_{a,b}$	$V_{a,b}^{(0)}$	$V_{a,b}^{(\infty)}$
BDD	1/4	1/2	1/4
GW	1/4	−1/2	−3/4
ZK	−3/4	−1/2	1/4
LK	1/4	0	−1/4
MM	0	0	0

我们观察到，当 $\omega_{a、b} < 0$ 时，$V_{a、b}(z)$ 是一个有限势阱；而当 $\omega_{a、b} > 0$ 时，它是一个有限势垒；当 $\omega_{a、b} = 0$、$V_{a、b}(z)$ 时，它则是均匀的。此外，由于 $V_{a、b}^{(0)} - V_{a、b}^{(\infty)} = \omega_{a、b}$，我们可以将 $|\omega_{a、b}|$ 解释为势阱或势垒的振幅。

其图像$V_{a,\ b}(z)$ 见图 4。

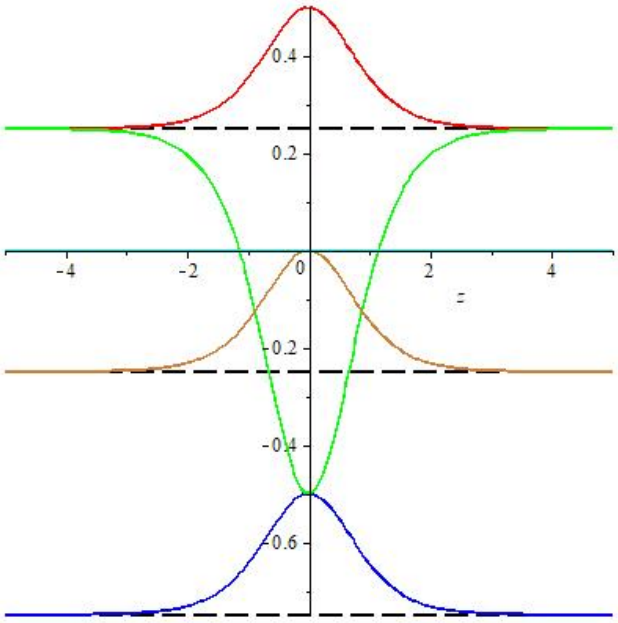


图4：倒数二次轮廓及 BDD、GW、ZK、LK 和 MM 排序对应的 $V_{a,\ b}(z)$ 图形（分别以红色、蓝色、绿色、金色和青色表示）。

3.2.2 解

我们再次通过定义变量来进行变量替换

$$y = \tanh^2 z\ , \tag{25a}$$

映射 $\mathbb{R} \ni z \mapsto y \in [0,1)$，并定义函数 $\xi(y)$ 如下

$$\zeta(z(y)) = y^{\mu}\,(1-y)^{\nu}\,\xi(y) \quad , \quad \mu, \nu \in \mathbb{C}\ . \tag{25b}$$

因此，方程（6a）化为以下微分方程:

$$y\,(1-y)\,\xi''(y) + \left[2\mu + \frac{1}{2} - \left(2\mu + 2\nu + \frac{3}{2}\right) y\right] \xi'(y) + \\ + \left[\frac{\mu^2 - \frac{\mu}{2}}{y} + \frac{\nu^2 + \frac{\mathcal{E}_{a,b}}{4}}{1-y} - \frac{\omega_{a,b}}{4} - (\mu+\nu)^2 - \frac{\mu+\nu}{2}\right] \xi(y) = 0\ , \tag{26}$$

其中我们定义了 $\mathcal{E}_{a,\ b} \equiv \tilde{E} - V^{(\infty)}_{a\,b}{}_{,}$。因此，$\mathcal{E}_{a,\ b}$ 表示相对于无穷远处势值测得的能级。在这种情况下，我们选择 μ 和 ν，使得

$$\mu^2 - \frac{\mu}{2} = 0 \Rightarrow \mu_{\pm} = \frac{1 \pm 1}{4} \quad \text{and} \quad \nu^2 + \frac{\mathcal{E}_{a,b}}{4} = 0 \Rightarrow \nu_{a,b} = -\frac{1}{2}\sqrt{-\mathcal{E}_{a,b}}\ , \tag{27}$$

上式变为

$$y(1-y)\,\xi''(y)+\left[2\mu_{\pm}+\frac{1}{2}-\left(2\mu_{\pm}+2\nu_{a,b}+\frac{3}{2}\right)y\right]\xi'(y)- \\ -\left[\left(\mu_{\pm}+\nu_{a,b}\right)^2+\frac{\mu_{\pm}+\nu_{a,b}}{2}+\frac{\omega_{a,b}}{4}\right]\xi(y)=0\,, \quad (28)$$

这是一个参数为以下形式的高斯超几何方程

$$\gamma_{\pm}\equiv 2\mu_{\pm}+\frac{1}{2}=1\pm\frac{1}{2} \quad , \quad \alpha^{\pm}_{a,b}\equiv\mu_{\pm}+\nu_{a,b}+\frac{1}{4}+\sqrt{ab} \quad \text{and} \quad \beta^{\pm}_{a,b}\equiv\mu_{\pm}+\nu_{a,b}+\frac{1}{4}-\sqrt{ab}\,. \quad (29)$$

由于 $\gamma_{\pm}\notin\mathbb{Z}$，因此对于 μ 的两个取值，前一个方程在小节3.1 中以 $y=0$、$\xi^{\pm}_{a,b}(y)$ 和 $\bar{\xi}^{\pm}_{a,b}(y)$为中心时，具有相同的两个独立解。结合方程组（25），可得 z 空间中的两个独立解，

$$\zeta^{\pm}_{a,b}(z)=(\tanh z)^{2\mu_{\pm}}(\operatorname{sech} z)^{2\nu_{a,b}}\,{}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_{\pm};\tanh^2 z\right)\,. \quad (30)$$

通过组合方程组（ x（5b）、（23）和（30），可得

$$\begin{aligned}\psi^{\pm}_{a,b}(x)&=x^{2\mu_{\pm}}\left(1+x^2\right)^{-\left(\mu_{\pm}+\nu_{a,b}+\frac{1}{4}\right)}\,{}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_{\pm};\frac{x^2}{1+x^2}\right)\\&=x^{2\mu_{\pm}}\left(1+x^2\right)^{-\left(\mu_{\pm}+\nu_{a,b}+\frac{1}{4}\right)}\times\\&\times\,{}_2F_1\left(\mu_{\pm}+\nu_{a,b}+\frac{1}{4}+\sqrt{ab},\mu_{\pm}+\nu_{a,b}+\frac{1}{4}-\sqrt{ab};1\pm\frac{1}{2};\frac{x^2}{1+x^2}\right)\,. \quad (31)\end{aligned}$$

再一次，当我们比较满足 $\omega_{a,b}$ 相等的两种排序（即 BDD、GW 和 LK排序的情况）时，解的区别取决于 $\mathcal{E}_{a,b}$的取值。因此，如果对于这类排序，我们相对于 $V^{(\infty)}_{a\,b}$，测量能级，那么所得解完全相同。有趣的是，对于$\nu_{a,b}=\frac{1}{2}\sqrt{-\mathcal{E}_{a,b}}$，我们也会得到等价的结果。

-

3.2.3 能谱

在这种情况下，$\zeta_{a,b}(z)$ 的归一化条件要求 $\zeta^{\pm}_{a,b}(\pm\infty)<\infty$。由于 $\lim_{z\to\pm\infty}(\operatorname{sech} z)^{2\nu_{a,b}}$在 $\mathcal{E}_{a,b}>0$时无定义，在 $\mathcal{E}_{a,b}=0$ 时等于 1，而在 $\mathcal{E}_{a,b}<0$时等于无穷大，因此我们可以将分析分为以下三种情况：

1. $\mathcal{E}_{a,b}>0\Leftrightarrow\tilde{E}>V^{(\infty)}_{a\,b}$，（散射态）：$\zeta_{a,b}(z)$ 无限振荡，并由 ${}_2F_1\left(\alpha^{\pm}_{a,b},\beta^{\pm}_{a,b};\gamma_{\pm};\tanh^2 z\right)$调制，但$\psi_{a,b}(x)$是可归一化的，因为

$$\lim_{x\to\pm\infty}m^{1/4}=\lim_{x\to\pm\infty}\left(1+x^2\right)^{-1/4}=0\,. \quad (32)$$

能谱是连续的；

2. $\mathcal{E}_{a,b}=0 \Leftrightarrow \tilde{E}=V_{a\,b}^{(\infty)}$，（平凡态）：$\zeta_{a,\,b}(z)$ 化为平凡解，因此无关紧要 t;

3. $\mathcal{E}_{a,\,b}<0 \Leftrightarrow \tilde{E}<V_{a\,b}^{(\infty)}$，（束缚态）：在这种情况下，我们必须要求 ${}_2F_1\left(\alpha_{a,b}^{\pm},\beta_{a,b}^{\pm};\gamma_{\pm};1\right)=0$，因此，由于 $\Re\left(\gamma_{\pm}-\alpha_{a,b}^{\pm}-\underline{\beta_{a,b}^{\pm}}\right)=\Re\left(\sqrt{-\mathcal{E}_{a,b}}\right)>0$，我们可以再次使用高斯求和定理，并取$\gamma_{\pm}-\alpha_{a\,,\,b}^{\pm}=-\kappa$，$\kappa\in\mathbb{Z}_{+}$（$\kappa=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$）。由此，对于通解，我们得到离散非简并能谱

$$\tilde{E}_{a,b;n}=-n^2+\left(4\sqrt{ab}-1\right)n+2\sqrt{ab}-\frac{1}{2}+V_{a,b}^{(0)}\,, \tag{33a}$$

其中，对于解$\psi_{a\,,\,b}^{-}(x)$（偶解），$n\equiv 2\kappa$；而对于解$\psi_{a\,,\,b}^{+}(x)$（奇解），$n\equiv 2\kappa+1$。我们还验证了这些态被限制在区间内

$$0\le n<2\sqrt{ab}-\frac{1}{2}\Leftrightarrow 0\le\kappa<\sqrt{ab}-\mu_{\pm}-\frac{1}{4}\,. \tag{33b}$$

用 $\omega_{a,\,b}$ 表示:

- 当 $\omega_{a,\,b}\ge 0$ 时，解全部属于散射型;
- 当$-2\le\omega_{a,\,b}<0$ 时，只有一个束缚态（基态），其余全部属于散射型;
- 当 $\omega_{a,\,b}<-2$ 时，束缚态和散射态均存在，通解由两个特解的线性组合给出。

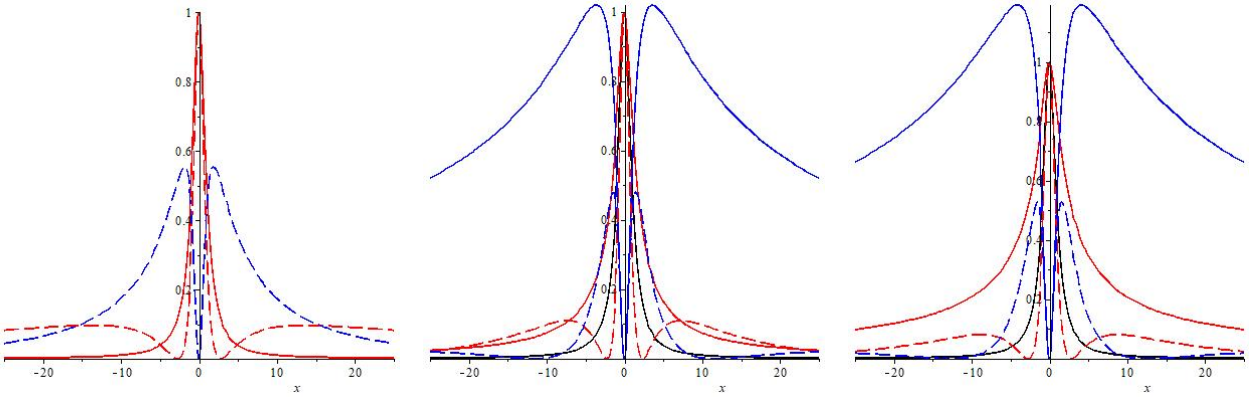
综上，当有效势为有限势垒（$\omega_{a,\,b}>0$）或均匀势（$\omega_{a,\,b}=0$）时，不存在束缚态。另一方面，当有效势为有限势阱（$\omega_{a,\,b}<0$）时，束缚态是离散的，其能级由方程组（33）给出。用 κ 表示，方程（31）可写为

$$\psi_{a,b;\kappa}^{\pm}(x)=x^{2\mu_{\pm}}\left(1+x^2\right)^{-\left(\kappa+2\mu_{\pm}+\frac{1}{2}-\sqrt{ab}\right)}\times \\ \times\,{}_2F_1\left(\kappa+2\mu_{\pm}+\frac{1}{2},\kappa+2\mu_{\pm}+\frac{1}{2}-2\sqrt{ab};1\pm\frac{1}{2};\frac{x^2}{1+x^2}\right)\,. \tag{34}$$

在这种情况下，当我们比较具有相同$\omega_{a,\,b}$的两种排序时，可以通过 κ的取值区分这些解。

3.2.4 概率密度图

对于这种质量分布，ZK排序是唯一存在束缚态的排序；更具体地说，只有基态[5] （图中绘出了$\rho^{-}_{-1/2,\ -1/2;0}(x)$ 和$\rho^{\pm}_{-1/2,\ -1/2}(x)$ 在 $\tilde{E}=1/2$ 时的图像，见图5(a)）。对于其他排序，$\rho^{\pm}_{a}$、$_{b}(x)$ 的图像绘于图5(b) 和5(c)；在这种情况下，BDD、ZK排序和LK排序对应同一幅图。



(a) $\rho^{-}_{-1/2,\ -1/2;0}(x)$ （实线（b）$\rho^{\pm}_{-1/4,\ -1/4}(x)$ 对应 $\tilde{E}=$ （c）$\rho^{\pm}_{0}$，$_{0}(x)$、 $\rho^{\pm}_{-1,\ 0}(x)$ 和红线）以及 $\rho^{\pm}_{-1/2\,-1/2}(x)$ $\tilde{E}=$，对应（虚线）。1/32 和 1（分别为实线和虚线）。$\rho^{\pm}_{0}$，$_{-1/2}(x)$ 对应 $1/2$ $\tilde{E}=V^{(\infty)}_{a}$，$_{b}$ $+1/32$ 以及 $V^{(\infty)}_{a}$，$_{b}$ $+1$ （分别为实线和虚线）。

图 5：倒数二次质量对应的偶（红色）和奇（蓝色）未归一化解的概率密度图，以及 (a) ZK、(b) MM 和 (c)BDD、GW 和 LK排序。黑色实线表示曲线 $m(x)=\left(1+x^{2}\right)^{-1}$。

在图 5(a) 中，我们验证了$\rho^{-}_{-1/2,\ -1/2;0}(x)=m(x)$，这可以利用恒等式 $_{2}F_{1}(\alpha,\beta;\alpha;y)=(1-y)^{-\beta}$来验证。

3.3 指数分布

我们取如下指数分布 [45, 58, 64]:

$$M(x)=m_{0}e^{-2|x|/\epsilon}\Leftrightarrow m(x)=e^{-2|x|}\ , \tag{35}$$

它在两个方向上渐近趋于零。

[5]参见表 2并与方程组 (33)

3.3.1 有效势

在这种情况下，式（5a）意味着存在如下关系

$$e^{-|x|} = 1 - |z| \,, \tag{36}$$

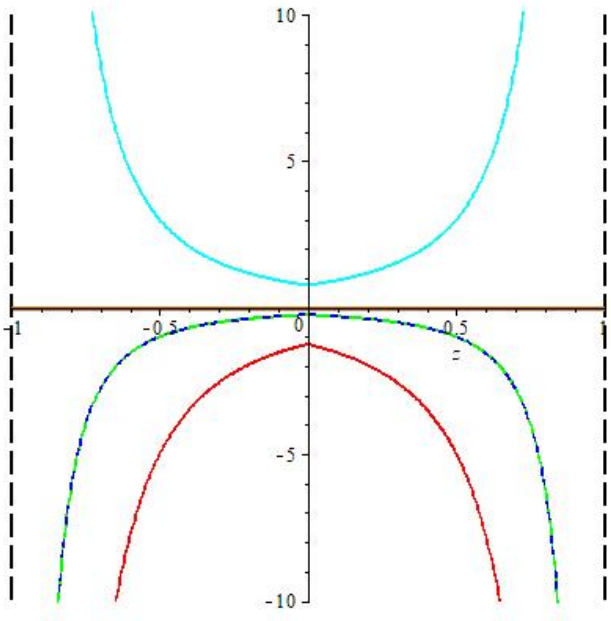
映射 $\mathbb{R} \ni x \mapsto z \in (-1,1)$。每个分支的积分常数均以如下方式选取：
$\mathbb{R}^*_- \ni x \mapsto z \in (-1,0)$ 和 $\mathbb{R}_+ \ni x \mapsto z \in [-1,1)$。有效势——方程（6b）——为

$$V_{a,b}(z) = \frac{\omega_{a,b}}{(1-|z|)^2} \quad , \quad \omega_{a,b} \equiv 4ab + 2\,(a+b) + \frac{3}{4}, \tag{37}$$

它在整个定义域内连续（有趣的是，$\omega_{a,\,b}$ 与孤子型轮廓中得到的相同）。当 $\omega_{a,\,b} \neq 0$它有一个临界点 $V_{a,\,b}(0) = \omega_{a,\,b}$ 以及两个奇点，位于 $z = \pm 1$，其位置取决于 $\omega_{a,\,b}$的符号：若 $\omega_{a,\,b} > 0$ 则 $V_{a,\,b}(z)$ 是一个无限深势阱；若 $\omega_{a,\,b} < 0$ 则它是一个无底势垒。

很容易看出，当不同排序具有相同的 $\omega_{a,\,b}$ 值时（ZK排序和LK排序就是如此），它们也具有相同的有效势，因此对于相同的能量，我们预期会得到相同的解。

图形$V_{a、\,b}(z)$ 如图所示。6。



.

图6：$V_{a,\,b}(z)$ 的图像，涉及GW、ZK、LK、MM和BDD排序的指数质量（分别以红色、蓝色、绿色、金色和青色表示）。注意$V_{-1/2,\,-1/2}(z)$与$V_{0,\,-1/2}(z)$之间的重叠

3.3.2 解

这次我们通过以下方式改变变量

$$y = \nu\,(1-|z|) \quad , \quad \nu \in \mathbb{C}^* \,, \tag{38a}$$

映射 $(-1,1) \ni z \mapsto y \in \{y \in \mathbb{C}^*, |y| \leq |\nu|\}$（在周界 $|y| = |\nu|\,(z=0)$ 处， z 空间中的解可通过连续性得到），并定义函数 $\xi(y)$，使得

$$\zeta(z(y)) = \left(\frac{y}{\nu}\right)^{1/2} \xi(y) \,. \tag{38b}$$

这样，式（6a）变换为[6]

$$y^2\xi''(y) + y\xi'(y) + \left(\frac{\tilde{E}}{\nu^2}y^2 - \alpha_{a,b}^2\right)\xi(y) = 0 \quad , \quad \alpha_{a,b} \equiv \frac{1}{2}\sqrt{1+4\omega_{a,b}} \in \mathbb{R}_+ \cup \mathbb{I}_+^* \,. \tag{39a}$$

令 $\nu = \sqrt{\tilde{E}}$ 为 $\tilde{E} \neq 0$， $\nu = 1$为 $\tilde{E} = 0$，则上式变为

s

$$\begin{cases} y^2\xi''(y) + y\xi'(y) + \left(y^2 - \alpha_{a,b}^2\right)\xi(y) = 0 & \tilde{E} \neq 0 \\ y^2\xi''(y) + y\xi'(y) - \alpha_{a,b}^2\xi(y) = 0 & \tilde{E} = 0 \end{cases} , \tag{39b}$$

第一行等价于阶数为 $\alpha_{a,\ b}$ 的正则贝塞尔方程，第二行则等价于二阶齐次欧拉-柯西方程。

每个微分方程的两个独立解为

$$\xi_{a,b}^{(1)}(y) = \begin{cases} J_{\alpha_{a,b}}(y) & \tilde{E} \neq 0 \\ y^{\alpha_{a,b}} & \tilde{E} = 0 \end{cases} \quad \text{and} \quad \xi_{a,b}^{(2)}(y) = \begin{cases} H_{\alpha_{a,b}}^{(1)}(y) & & \tilde{E} \neq 0 \\ \begin{cases} y^{-\alpha_{a,b}} & \alpha_{a,b} \neq 0 \\ \ln y & \alpha_{a,b} = 0 \end{cases} & & \tilde{E} = 0 \end{cases} , \tag{40}$$

其中 $J_\alpha(y)$ 和 $H_\alpha^{(1)}(y)$ 分别是 α 阶第一类贝塞尔函数和汉克尔函数。将它们与方程组（38）结合，可得 z 空间中的解：

$$\zeta_{a,b}^{(1)}(z) = \begin{cases} \sqrt{1-|z|}\,J_{\alpha_{a,b}}\left(\sqrt{\tilde{E}}\,(1-|z|)\right) & \tilde{E} \neq 0 \\ (1-|z|)^{\frac{1}{2}+\alpha_{a,b}} & \tilde{E} = 0 \end{cases} \tag{41a}$$

[6]这里，$\mathbb{I}_+^*$ 表示由形如 ih 的元素构成的集合，其中 $h \in \mathbb{R}_+^*$。

and

$$\zeta^{(2)}_{a,b}(z)=\begin{cases}\sqrt{1-|z|}H^{(1)}_{\alpha_{a,b}}\left(\sqrt{\tilde{E}}\,(1-|z|)\right) & \tilde{E}\neq 0\\ \begin{cases}(1-|z|)^{\frac{1}{2}-\alpha_{a,b}} & \alpha_{a,b}\neq 0\\ \sqrt{1-|z|}\ln(1-|z|) & \alpha_{a,b}=0\end{cases} & \tilde{E}=0\end{cases}. \tag{41b}$$

3.3.3 能谱

空间中的通解 $\zeta_{a,\ b}(z)$，必须满足条件 $\zeta_{a,\ b}(\pm 1)=0$ 以及 $\zeta'_{a,\ b}(0)=0$（第二个条件由波函数导数的连续性得到；注意方程组（41）中的函数是偶函数）。

考虑贝塞尔函数在自变量较小时的渐近行为，并借助恒等式

$$C'_\alpha(y)=C_{\alpha-1}(y)-\frac{\alpha}{y}C_\alpha(y)\,, \tag{42}$$

其中，$C_\alpha(y)$表示函数 $J_\alpha(y)$或 $H^{(1)}_\alpha(y)$，我们得出，当$\alpha_{a,b}\in\mathbb{I}^*_+\Leftrightarrow\omega_{a,b}<-\frac{1}{4}$时，不存在满足上述条件的解。另一方面，当$\alpha_{a,b}\geq 0\Leftrightarrow\omega_{a,b}\geq-\frac{1}{4}$时，只有方程（41a）是物理上有效的解。它给出离散能谱$\tilde{E}_{a,b;n}\equiv k^2_{a,b;n}$，其中$k_{a,b;n}>0$是超越方程的第 n个正解

$$2k_{a,b}J_{\alpha_{a,b}-1}\left(k_{a,b}\right)+\left(1-2\alpha_{a,b}\right)J_{\alpha_{a,b}}\left(k_{a,b}\right)=0\,, \tag{43}$$

由于交换$k_{a,b;n}\to-k_{a,b;n}$会产生相同的能谱，我们发现本征态呈现二重简并。

在 x 空间中，解由方程组（5b）、（36）和（41）结合得到，并考虑方程（43）

$$\psi_{a,b;n}(x)=e^{-|x|}J_{\alpha_{a,b}}\left(k_{a,b;n}e^{-|x|}\right)\quad,\quad n\in\mathbb{Z}^*_+\quad,\quad\omega_{a,b}\geq-\frac{1}{4}\,. \tag{44}$$

观察式（44）可知，本征态可通过排序（表示为 $\alpha_{a,\ b}$）以及能级 $\tilde{E}_{a,\ b;n}\equiv k^2_{a,\ b;n}$彼此区分。因此，能量相同的本征态在具有相同$\omega_{a,\ b}$的两种排序中无法区分，这符合预期。

对于每一种排序，$k_{a,\ b;n}\equiv\sqrt{\tilde{E}_{a,\ b;n}}$ 的值都可以根据式（43）（见表 3），利用数值方法计算得到。

表 3：BDD、ZK/LK 和 MM 排序的前三个值$k_{a,\ b;n}$。GW排序没有有效解。

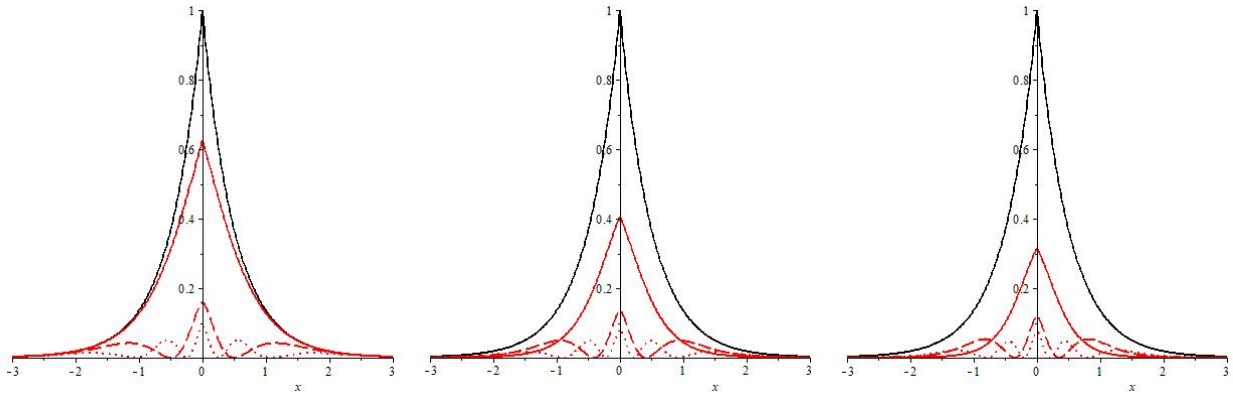
排序	$k_{a,\ b;n}$		
	$n=1$	$n=2$	$n=3$
ZK/LK	0.9407705639	3.959371185	7.086380848
MM	1.570796327	4.712388980	7.853981634
BDD	2.165871271	5.427433202	8.595426306

值得注意的是，指数质量系统只有束缚态，即使对于$-\frac{1}{4} \leq \omega_{a、b} < 0$这样的排序也不例外；它们对应的势$V_{a、b}(z)$是无底势垒。这与通常的理解相矛盾：通常认为这类系统应该只有散射态，且谱连续并向下无界。正如我们所见，在这种情况下，无底势垒的作用就像无限深势阱。

由于没有有效解，GW排序会被自动移除。

3.3.4 概率密度图

图中绘出了$\rho_{a、b;n}(x) \equiv \left|\psi_{a、b;n}(x)\right|^2$，见图7。由于与 ZK 和 LK 排序相关的概率密度完全相同，因此将它们绘制在同一张图中。



(a) (b) (c)

图7：指数质量下，与式（44）（未归一化解）相关的概率密度图，以及（a）ZK 和 LK，（b）MM 和（c）BDD 排序，取 $n=1$、2和3（分别以实线、虚线和点线表示）。黑色实线对应于 $m(x)=e^{-2|x|}$。

图 7 表明，尽管 z 空间中的解具有连续导数，但 x 空间中的解并非如此。事实上，对式（44）求导并考虑式（43），我们得出

that

$$\lim_{x\to 0^{\pm}} \psi'_{a,b;n}(x) = \pm\frac{1}{k_{a,b;n}}\left(\frac{1}{2} - k_{a,b;n}\right) J_{\alpha_{a,b}}\left(k_{a,b;n}\right) \ , \tag{45}$$

即，仅当 $k_{a,\ b;n} = \frac{1}{2}$ 或当 $k_{a,\ b;n}$ 是第一类贝塞尔函数的某个零点时，解的导数在原点处才是连续的，而这未必成立。

3.4 抛物型轮廓

让我们着重分析一种抛物型质量密度 [23, 65, 66],

$$M(x) = m_0\left(\frac{2x}{\epsilon}\right)^2 \Leftrightarrow m(x) = 4x^2 \ . \tag{46}$$

由于这是一个无限增长的轮廓，我们将其限制在有限区域内 $|x| < \ell, \quad \ell > 0$ 这可能代表一种异质结构。这样，解便无需满足边界条件。

3.4.1 有效势

对于这种质量，式（5a）可得如下变换

$$x^2 = |z| \ , \tag{47}$$

将 $(-\ell, \ell) \ni x \mapsto z \in \left(-\ell^2, \ell^2\right)$ 映射为。式（5b）给出有效势 al

$$V_{a,b}(z) = \frac{\omega_{a,b}}{z^2} \quad , \quad \omega_{a,b} \equiv ab + \frac{3}{4}(a+b) + \frac{5}{16} \ . \tag{48}$$

我们观察到，经过变换 $1 - |z| \to |z|$（以及不同的 $\omega_{a,\ b}$）后，该表达式与指数质量的有效势相似。因此，可以进行一些类似的考量。实际上，势的行为会因 $\omega_{a,\ b}$ 的符号而截然不同：如果 $\omega_{a,\ b} > 0 (\omega_{a,\ b} < 0)$，那么势就是无限势垒（无底势阱），因为它在原点处发散至 $+\infty\ (-\infty)$。不同排序对应的有效势图见图 8。

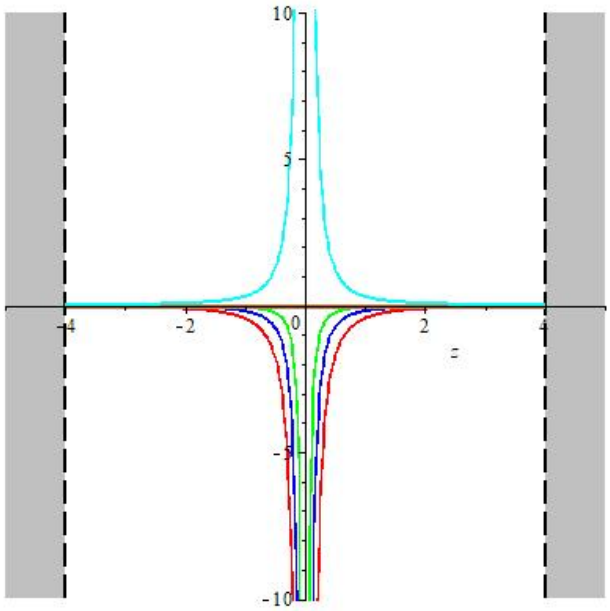


图8：GW（$V_{a,\ b}(z)$）、ZK（$\omega_{-1,\ 0}=-7/16$）、LK（$\omega_{-1/2,\ -1/2}=-3/16$）、MM（$\omega_{0,\ -1/2}=-1/16$）和 BDD（$\omega_{-1/4,\ -1/4}=0$）排序的有效势的形状（分别以红色、蓝色、绿色、金色和青色表示），并与一个在 $\omega_{0,\ 0}=5/16$ 空间中限制于区间 x 的系统相关。

3.4.2 解

该系统在 z 空间中与指数质量系统的相似性，使我们可以将方程组（41）认作此情形的解。我们只需令 $1-|z|\to|z|$，并代入 $\omega_{a\ 的定义b}$（$\alpha_{a,\ b}$ 和 $\omega_{a,\ b}$ 参数仍满足关系式 $\alpha_{a,\ b}=\frac{1}{2}\sqrt{1+4\omega_{a,\ b}}$）。

对原点处解及其导数的分析表明，当$\alpha_{a、b}\in\mathbb{I}_{+}^{*}\cup\left[0,\frac{1}{2}\right)\Leftrightarrow\omega_{a、b}<0$时不存在解，这意味着，对于此轮廓，在 z 空间中具有无底势阱有效势的排序会自动被排除。当$\alpha_{a、b}=\frac{1}{2}\Leftrightarrow\omega_{a、b}=0$ 时，只有第一个零能量解是可接受的，且可化简为 $\zeta_{a、b}(z)=1$。另一方面，当$\alpha_{a、b}>\frac{1}{2}\Leftrightarrow\omega_{a、b}>0$ 时，只有第一个解及其导数在 $z=0$处收敛且连续。因此，对于正的 $\omega_{a、b}$ 参数，物理上可接受的解为

$$\zeta_{a,b}(z)=\begin{cases}\sqrt{|z|}J_{\alpha_{a,b}}\left(\sqrt{\tilde{E}}|z|\right) & \tilde{E}\neq 0\\ |z|^{\frac{1}{2}+\alpha_{a,b}} & \tilde{E}=0\end{cases},\quad \alpha_{a,b}>\frac{1}{2}. \tag{49}$$

将其与方程组 (5b)、(47)结合，得到 x 空间本征态

$$\psi_{a,b}(x)=\begin{cases}|x|^{3/2}J_{\alpha_{a,b}}\left(\sqrt{\tilde{E}}x^2\right) & \tilde{E}\neq 0\\ |x|^{\frac{3}{2}+2\alpha_{a,b}} & \tilde{E}=0\end{cases},\quad \omega_{a,b}>0\,. \tag{50}$$

3.4.3 能谱

如果我们考虑一个在 $|x|>\ell$ 中质量和/或外势任意的异质结构模型，就可以研究势 $V_{a,\ b}(z)$ 在区域 $|z|>\ell^2$ 中的表现。随后，我们便能够求出能级，并最终评估由 $\lim_{z\to\pm\ell^{\pm}}\zeta_{a,\ b}(z)$ 和 $\lim_{z\to\pm\ell^{\pm}}\zeta'_{a,\ b}(z)$ 导致离散化或简并的条件。

例如，假设在 $|x|>\ell$ 中质量均匀且外势仍为零，那么 $V_{a,\ b}(z)=0$ 在 $|z|>\ell^2$ 中，解将全部为自由散射态。反之，如果质量在区间 $(-\ell^2,\ell^2)$ 外具有正凹性，有效势将形成一个势阱，因此可能存在能量高于其最低点的负能量束缚态。

3.4.4 概率密度图

BDD排序的概率密度图如图9所示。前面的讨论为我们展示至少一种具有负本征能量的情形提供了合理依据。无论如何，所显示的区域（$|x|<\ell$）展示了抛物线质量分布和BDD排序下穿过势的隧穿态。

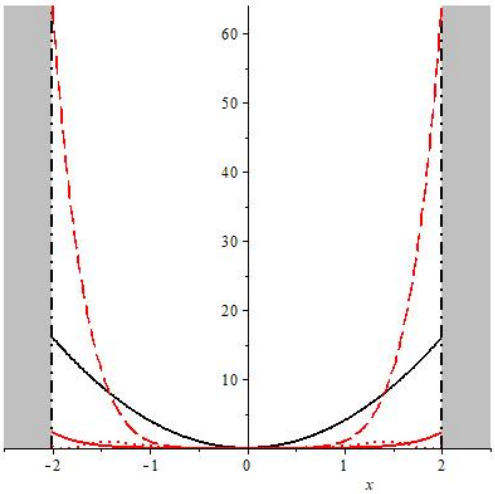


图 9：BDD $\rho_{0,\ 0}(x)$ 对于 $\tilde{E}=-1/32$、0 和 1 的图形（分别对应红色实线、虚线和点线）。黑色实线对应于 $m(x)=4x^2$。其他排序不可接受。

4 双异质结构：一个示例

为了应用我们之前的结果，我们将考虑一个一维量子异质结构模型，其中两个区域之间的电荷载流子具有抛物线型的PDM。粒子质量从 $m_0 m_1$ 变为 $m_0 m_2$，$m_{1,2} > 0$，沿着一个关于原点对称、大小为 2ℓ s的中间区域IR变化：

$$M(x) = \begin{cases} m_0 m_1 & \frac{x}{\epsilon} < -\ell \\ 4m_0\eta\left(\frac{x}{\epsilon} + \chi\right)^2 & \left|\frac{x}{\epsilon}\right| \le \ell \\ m_0 m_2 & \frac{x}{\epsilon} > \ell \end{cases} \Leftrightarrow m = \begin{cases} m_1 & x < -\ell \\ 4\eta(x+\chi)^2 & |x| \le \ell \\ m_2 & x > \ell \end{cases}, \tag{51}$$

与 $\chi = \frac{\sqrt{m_2}+\sqrt{m_1}}{\sqrt{m_2}-\sqrt{m_1}}\ell$ 和 $\eta = \frac{(\sqrt{m_2}-\sqrt{m_1})^2}{16\ell^2}$。

4.1 解

对于 $|x| > \ell$ 该 质量为常数，解是众所周知的普通波函数

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{|k_1|x} & x < -\ell \\ Be^{-|k_2|x} & x > \ell \end{cases} \qquad \tilde{E} < 0 \tag{52a}$$

and

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1 x} + ARe^{-ik_1 x} & x < -\ell \\ ATe^{ik_2 x} & x > \ell \end{cases} \qquad \tilde{E} > 0 \tag{52b}$$

其中 A，B，R，$T \in \mathbb{C}$（R和 T与反射和透射系数相关）以及 $k_{1,2} \equiv \left(m_{1,2}\tilde{E}\right)^{1/2}$。在红外区，特解 $\psi_{a,b}^{(1,2)}(x)$ 即为上一节得到的解，~ ~其中 $x \to x + \chi$ 和 $E \to \eta E$。现在，边界条件允许两个独立分量，因此内部的通解为 $\psi_{a,b}(x)$在 $|x| \le \ell$，由 $\psi_{a,b}(x) = C^{(1)}\psi_{a,b}^{(1)}(x) + C^{(2)}\psi_{a,b}^{(2)}(x)$给出，其中 $C^{(1,2)} \in \mathbb{C}$和

$$\psi_{a,b}^{(1)}(x) = \begin{cases} |x+\chi|^{3/2} I_{\alpha_{a,b}}\left(\left(\eta\left|\tilde{E}\right|\right)^{1/2}(x+\chi)^2\right) & \tilde{E} < 0 \\ |x+\chi|^{3/2} J_{\alpha_{a,b}}\left(\left(\eta\tilde{E}\right)^{1/2}(x+\chi)^2\right) & \tilde{E} > 0 \end{cases} \tag{53a}$$

and

$$\psi^{(2)}_{a,b}(x)=\begin{cases}|x+\chi|^{3/2}K_{\alpha_{a,b}}\left(\left(\eta\left|\tilde{E}\right|\right)^{1/2}(x+\chi)^2\right) & \tilde{E}<0\\ |x+\chi|^{3/2}H^{(1)}_{\alpha_{a,b}}\left(\left(\eta\tilde{E}\right)^{1/2}(x+\chi)^2\right) & \tilde{E}>0\end{cases}, \tag{53b}$$

这里我们选择用修正贝塞尔函数来表示这些解。

4.2 边界条件

边界条件通过要求 $\psi_{a,b}(x)$ 和 $\psi'_{a,b}(x)$ 连续来定义。我们可以将这些条件简洁地写成如下形式。定义以下列向量

$$\boldsymbol{\vartheta}_{a,b;\tau}\equiv\begin{pmatrix}\psi^{(1)}_{a,b}\left((-1)^\tau\ell\right)\\ \psi^{(2)}_{a,b}\left((-1)^\tau\ell\right)\end{pmatrix}\quad,\quad\dot{\boldsymbol{\vartheta}}_{a,b;\tau}\equiv\begin{pmatrix}\psi^{(1)'}_{a,b}\left((-1)^\tau\ell\right)\\ \psi^{(2)'}_{a,b}\left((-1)^\tau\ell\right)\end{pmatrix}\quad,\quad\boldsymbol{C}\equiv\begin{pmatrix}C^{(1)}\\ C^{(2)}\end{pmatrix}\quad\text{and}$$

$$\boldsymbol{\kappa}_{a,b;\tau}\equiv\dot{\boldsymbol{\vartheta}}_{a,b;\tau}-(-1)^\tau ik_\tau\boldsymbol{\vartheta}_{a,b;\tau}\,, \tag{54}$$

其中 $\tau=1,\ 2$。对于 $\gamma^{(1,2)}\in\mathbb{C}$，我们还定义

$$\begin{pmatrix}\gamma^{(1)}\\ \gamma^{(2)}\end{pmatrix}_\perp\equiv\begin{pmatrix}\gamma^{(2)}\\ -\gamma^{(1)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\ -1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\gamma^{(1)}\\ \gamma^{(2)}\end{pmatrix}, \tag{55}$$

即，索引 $\perp$ 表示将 $\frac{\pi}{2}$ 逆时针旋转。

边界条件意味着

$$\begin{cases}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\vartheta}^T_{a,b;1}\\ \dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;1}\end{pmatrix}\boldsymbol{C}=Ae^{-\ell|k_1|}\begin{pmatrix}1\\ |k_1|\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}\boldsymbol{\vartheta}^T_{a,b;2}\\ \dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;2}\end{pmatrix}\boldsymbol{C}=Be^{-\ell|k_2|}\begin{pmatrix}1\\ -|k_2|\end{pmatrix}\end{cases}\qquad\tilde{E}<0 \tag{56a}$$

and

$$\begin{cases}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\vartheta}^T_{a,b;1}\\ \dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;1}\end{pmatrix}\boldsymbol{C}=Ae^{-i\ell k_1}\begin{pmatrix}1\\ ik_1\end{pmatrix}+ARe^{i\ell k_1}\begin{pmatrix}1\\ -ik_1\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}\boldsymbol{\vartheta}^T_{a,b;2}\\ \dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;2}\end{pmatrix}\boldsymbol{C}=ATe^{i\ell k_2}\begin{pmatrix}1\\ ik_2\end{pmatrix}\end{cases}\qquad\tilde{E}>0 \tag{56b}$$

(^{T} 表示转置）。对于 $\tilde{E} < 0$，方程组（56a）给出 B 和 $C^{(1,2)}$，以 A表示，

$$C_{a,b} = -A_{a,b} e^{-\ell |k_1|} \frac{\boldsymbol{\kappa}_{a,b;1\perp}}{\dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;1} \boldsymbol{\vartheta}_{a,b;1\perp}} \quad \text{and} \quad B_{a,b} = -A_{a,b} e^{\ell(|k_2|-|k_1|)} \frac{\boldsymbol{\vartheta}^T_{a,b;2} \boldsymbol{\kappa}_{a,b;1\perp}}{\dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;1} \boldsymbol{\vartheta}_{a,b;1\perp}}. \tag{57a}$$

A 将通过归一化确定，离散能级则由以下超越方程得出

$$\boldsymbol{\kappa}^T_{a,b;1} \boldsymbol{\kappa}_{a,b;2\perp} = 0. \tag{57b}$$

对于 $\tilde{E} > 0$ 态，方程组（56b）给出 $C^{(1,2)}$，R 以及 T，它们以自由入射波振幅 A表示，

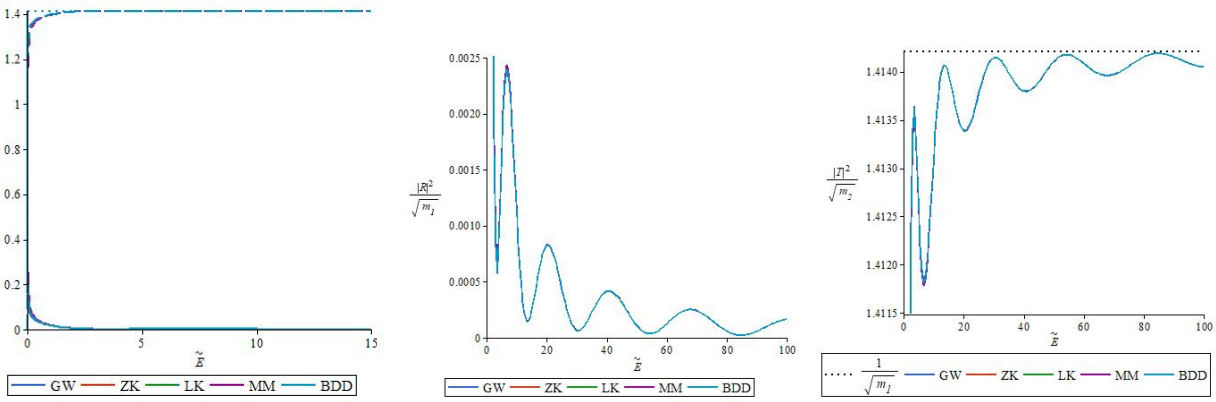
$$C_{a,b} = -2Aik_1 e^{-i\ell k_1} \frac{\boldsymbol{\kappa}_{a,b;2\perp}}{\boldsymbol{\kappa}^T_{a,b;1} \boldsymbol{\kappa}_{a,b;2\perp}} \quad \text{and}$$
$$\begin{pmatrix} R_{a,b} \\ T_{a,b} \end{pmatrix} = -\frac{e^{-i\ell k_1}}{\boldsymbol{\kappa}^T_{a,b;1} \boldsymbol{\kappa}_{a,b;2\perp}} \begin{pmatrix} e^{-i\ell k_1} \left(\dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;1} - ik_1 \boldsymbol{\vartheta}^T_{a,b;1} \right) \boldsymbol{\kappa}_{a,b;2\perp} \\ 2ik_1 e^{-i\ell k_2} \dot{\boldsymbol{\vartheta}}^T_{a,b;2} \boldsymbol{\vartheta}_{a,b;2\perp} \end{pmatrix}. \tag{58}$$

4.3 结果

为了绘制结果，我们选择质量参数 $m_1 = m_2/2 = 0.5$ 和 $\ell = 1$。我们将考虑 $m_0 \approx m_e$，其中 m_e 是自由电子质量，而 $\epsilon \approx \mu m$ 对于半导体中典型的异质结也是如此。在这种情况下，由于方程（57b）无解，因此不存在束缚态。相反，我们有散射态，对通量概率的研究结果为

$$\frac{|R_{a,b}|^2}{\sqrt{m_1}} + \frac{|T_{a,b}|^2}{\sqrt{m_2}} = \frac{1}{\sqrt{m_1}} \quad . \tag{59}$$

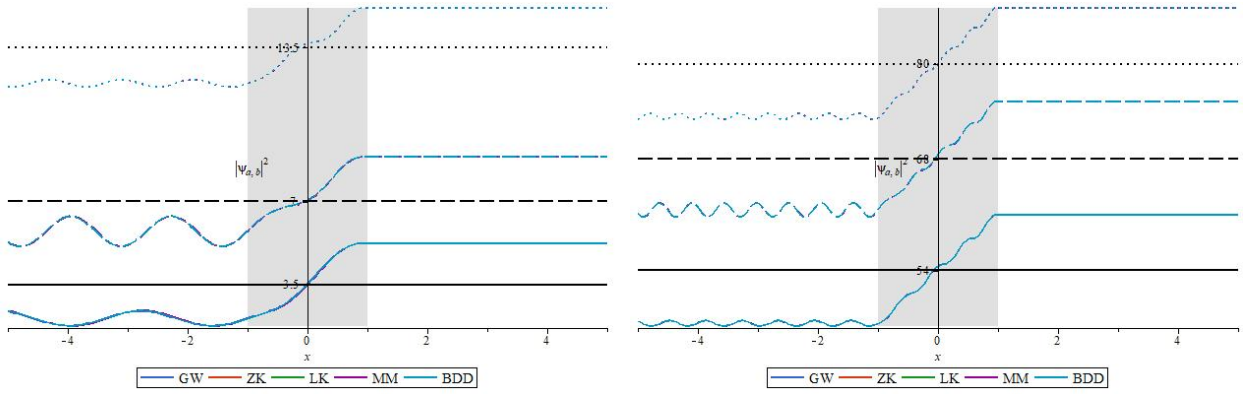
在图10 中，我们可以看到$|R_{a、b}|^2$ 和$|T_{a,\ b}|^2$ 随能量变化的行为，并验证公式（59）的有效性。



(a) (b) (c)

图10：(a) $|R_{a、b}|^2/\sqrt{m_1}$ 和$|T_{a、b}|^2/\sqrt{m_2}$ 的图（分别为实线和虚线）。点线对应于$|R_{a、b}|^2/\sqrt{m_1}+|T_{a、b}|^2/\sqrt{m_2}$，其等于 $1/\sqrt{m_1}$，见式（59）。(b) 和(c) 为图10(a)局部细节的放大图。

在图11 中，我们绘制了若干能级的概率密度。



(a) (b)

图11：(a) $|\psi_{a、b}(x)|^2$ 在 $\tilde{E}=3.5$、7。0 和13。5 时的图（分别为实线、虚线和点线）以及~和(b) $E=54$、68 和80 （分别为实线、虚线和点线）。阴影区域为中间区域IR，其中质量随位置变化。为便于可视化，振幅经过选取，且图形已在竖直方向上上移，以区分能级。

5 最后讨论

根据量子力学的正则对易关系，在考虑位置依赖质量时，量子粒子的哈密顿量可以有多种构造形式。这必然会导致截然不同的能谱和粒子本征态。本文着重研究纯动能哈密顿量，以便比较考虑

几种排序方式和质量分布得到了统一处理。为此，我们系统地计算了由五种不同排序方式和五种不同空间依赖质量所得到的哈密顿量的能量本征值和本征函数。由于不同的排序方式/质量分布组合，我们获得了全新且种类繁多的本征态。其中，发现了与双曲型、指数型或有理函数相关的高斯超几何函数和贝塞尔函数——见方程组 (17)、(31)、(43) 和 (50)。在表 4 中，我们总结了各种组合的能谱类型。从该表可以看出，倒二次质量是唯一一种对于每种排序方式都只呈现连续谱的轮廓，并且所有情况下均具有一个最小本征值。对于这种轮廓，只有 ZK 排序方式在最小值与连续带之间存在能隙。类孤子、倒数双二次和指数型轮廓仅允许离散谱，并且某些排序方式不存在任何允许的物理解（类孤子对应 GW、ZK 和 LK，倒数双二次对应 GW 和 LK，而指数型仅对应 GW）。抛物型质量是整组排序方式中物理解最少的轮廓。

在不同的排序中，GW 是唯一一种除倒数二次质量分布外，对任何质量分布都不存在物理上允许的解的排序。另一方面，MM 和 BDD 对每一种质量分布都有包含基态的完整谱。对于离散谱，ZK 能级总是低于 MM 的能级，而 MM 的能级又略低于 BDD 排序对应的能级（关于能谱的类似比较可见 [67]）。

根据排序方式的不同，我们从纯动能位置依赖质量哈密顿量中得到了各种有效势。在第 3.1 和 3.3 小节中，我们发现甚至存在伴有离散谱解的无底势垒（例如，具有类孤子质量的 ZK 和 LK 排序）。一些作者探讨了无底势这一主题，并提出了处理这些结果的方法 [68–75]。如果我们假设自由位置依赖质量粒子在固体中模拟恒定质量粒子，那么可以将这些无底势垒视为晶体中原子核或离子无限深势阱之间出现的势垒。这是固体物理学中一个广为人知的问题 [76]。

我们还验证了，某些排序/质量配置因未显示任何可接受的解（既无束缚态，也无散射本征态）而被舍弃；这可作为在为给定物理系统寻找有效哈密顿量时的一项筛选标准。有趣的是，即使在 z 空间中，MM 仍使势保持平凡；这表明该映射会更接近原始映射。然而，其解却远非平凡。

在第 4节中，我们将该方法应用于一维双异质结构。我们考虑没有外势的情形，但在两个不同的普通常数质量值连接区域中，质量呈抛物线型变化 m_1 和 m_2。我们发现，这与普通量子力学中常数势之间发生跃迁的情形（例如有限势阱）相似；根据粒子能量值的不同，可以存在束缚态和散射态。我们解析地计算了能量本征态以及反射系数和透射系数。对于所选参数，

不同的排序呈现出非常相似的结果，如图 10 和图 11所示。反射系数和透射系数均呈现振荡行为：前者随能量增加而减小，并迅速收敛至零；后者则逐渐增大，并迅速收敛至 $\sqrt{m_2/m_1}$。

我们的结果表明，一旦通过实验获得某种给定材料的谱，就可以在刚才考察的各种方案中选择更合适的排列，用于建立特定材料或异质结构的模型。事实上，尽管外势为零，位置依赖质量本征函数并不是真正的自由态，而是固体样品中的一种有效波。这正是位置依赖质量的起源。根据所选的具体有效质量和算符排序，这些态可以表现得更为自由，也可以更加束缚。离散能量本征态可表示晶体中的有效束缚电子态，而连续本征态则可表示固体中的传导载流子。预计本研究将在固态结构的应用中发挥作用，尤其是在加入外势项之后。

Table 4: Table of the energy spectra and $\omega_{a,b}$ parameters for each ordering and mass profile (acronyms in parentheses next to the numerical values of $\omega_{a,b}$ denote the shapes of the effective potentials – EP: (IB) for infinite barriers, (FB) for finite barriers, (BB) for bottomless barriers, (IW) for infinite wells, (FW) for finite wells and (BW) for bottomless wells).

Ordering	**soliton-like**		**Reciprocal biquadratic**		**Reciprocal quadratic**		**Exponential**		**Parabolic**	
	$\omega_{a,b}$	**Energy spectrum (EP)**	$\omega_{a,b}$	**Energy spectrum (EP)**	$\omega_{a,b}$	**Energy spectrum (EP)**	$\omega_{a,b}$	**Energy spectrum (EP)**	$\omega_{a,b}$	**Energy spectrum (EP)**
BDD	$\frac{3}{4}$	Discrete, with minimum; (IW)	2	Discrete, with minimum; (IW)	$\frac{1}{4}$	Continuous, with minimum; (FB)	$\frac{3}{4}$	Discrete, with minimum; (IW)	$\frac{5}{16}$	Depends on $V(x)$ and $M(x)$ outside $\lvert x\rvert < \ell$; (IB)
GW	$-\frac{5}{4}$	*No spectrum*; (BB)	-4	*No spectrum*; (BB)	$\frac{1}{4}$	Continuous, with minimum; (FB)	$-\frac{5}{4}$	*No spectrum*; (BB)	$-\frac{7}{16}$	*No spectrum*; (BW)
ZK	$-\frac{1}{4}$	*No spectrum*; (BB)	0	Discrete, with minimum; $(cons = -1)$	$-\frac{3}{4}$	Continuous, with minimum and only one bound state; (FW)	$-\frac{1}{4}$	Discrete, with minimum; (BB)	$-\frac{3}{16}$	*No spectrum*; (BW)
LK	$-\frac{1}{4}$	*No spectrum*; (BB)	-1	*No spectrum*; (BB)	$\frac{1}{4}$	Continuous, with minimum; (FB)	$-\frac{1}{4}$	Discrete, with minimum; (BB)	$-\frac{1}{16}$	*No spectrum*; (BW)
MM	0	Discrete, with minimum; $(cons = 0)$	0	Discrete, with minimum; $(cons = 0)$	0	Continuous, with minimum; $(cons = 0)$	0	Discrete, with minimum; $(cons = 0)$	0	Only $\tilde{E} = 0$ is possible; still, it depends on $V(x)$ and $M(x)$ outside $\lvert x\rvert < \ell$; $(cons = 0)$

致谢

作者谨此感谢教育部国家教育发展基金（FNDE）提供的PET奖学金。

参考文献

[1] G. H. Wannier，“绝缘晶体中电子激发能级的结构”，*Phys. Rev.*，第52卷，第3期，第191页，1937年。[2] J. C. Slater，“受扰周期晶格中的电子”，*Phys.Rev.*，第76卷，第11期，第1592页，1949年。[3] J. M. Luttinger和W. Kohn，“受扰周期场中电子和空穴的运动”，*Phys. Rev.*，第97卷，第4期，第869页，1955年。[4] D. J. BenDaniel和C. B. Duke，“空间电荷效应对电子隧穿的影响”，*Phys. Rev.*，第152卷，第2期，第683页，1966年。[5] T. Gora和F. Williams，“梯度混合半导体中电子态与输运理论”，*Phys. Rev.*，第177卷，第3期，第1179页，1969年。[6] J. R. Shewell，“关于量子力学算符的构造”，*Am. J. Phys.*，第27卷，第1期，第16–21页，1959年。[7] O. von Roos，“半导体理论中的位置依赖有效质量”，*Phys. Rev. B*，第27卷，第12期，第7547页，1983年。[8] J. Thomsen、G. T. Einevoll和P. C. Hemmer，“有效质量理论中的算符排序”，*Phys.Rev.B*，第39卷，第17期，第12783页，1989年。[9] J.-M. Lévy-Leblond，“位置依赖有效质量与伽利略不变性”，*Phys. Rev.A*，第52卷，第3期，第1845页，1995年。[10] L. Chetouani、L. Dekar和T. F. Hammann，“通过路径积分求解具有位置依赖质量系统的格林函数”，*Phys. Rev. A*，第52卷，第1期，第82页，1995年。[11] M. S. Cunha和H. R. Christiansen，“位置依赖质量薛定谔问题的解析结果”，*Commun. Theor. Phys.*，第60卷，第6期，第642页，2013年。[12] H. R. Christiansen和M. S. Cunha，“一类新型双曲势中位置依赖质量量子力学的解”，数学物理杂志，第54卷，第12期，第122108页，2013年。

[13] H. R. Christiansen和M. S. Cunha，“一类新型分子哈密顿量中位置依赖质量粒子的能量本征函数”，数学物理杂志，第55卷，第9期，第092102页，2014年。[14] B. G. da Costa、I. S. Gomez和M. Portesi，“具有位置依赖有效质量系统的κ形变量子与经典力学”，数学物理杂志，第61卷，第8期，第082105页，2020年。[15] C.-L. Ho和P. Roy，“具有位置依赖质量的广义狄拉克振子”，*EPL-Europhys. Lett.*，第124卷，第6期，第60003页，2019年。[16] A. G. M. Schmidt和A. L. de Jesus，“电荷-磁单极子系统与位置依赖质量系统之间的映射”，数学物理杂志，第59卷，第10期，第102101页，2018年。[17] G. Bastard、J. K. Furdyna和J. Mycielski，“梯度混合半导体中的朗道能级和回旋共振”，*Phys. Rev. B*，第12卷，第10期，第4356页，1975年。[18] P. Harrison和A. Valavanis，量子阱、量子线与量子点——半导体纳米结构的理论与计算物理学。纽约：John Wiley & Sons，第 4 版，2016 年。[19] L. Serra 和 E. Lipparini，“ 未极化量子点的自旋响应 ”，*EPL-Europhys. Lett.*，第40卷，第6期，第667页，1997年。[20] M. G. Burt，“将有效质量近似应用于微结构的合理性”，*J. Phys.-Condens. Mat.*，第4卷，第32期，第6651页，1992年。[21] A. D. Alhaidari，“具有位置依赖有效质量的非相对论波动方程的解”，*Phys. Rev. A*，第66卷，第4期，第042116页，2002年。[22] A. D. Alhaidari，“具有位置依赖质量系统的非相对论格林函数”，*Int. J. Theor. Phys.*，第42卷，第12期，第2999–3009页，2003年。[23] J. Yu和S.-H. Dong，“具有空间依赖质量的薛定谔方程的可精确求解势”，*Phys. Lett. A*，第325卷，第3-4期，第194–198页，2004年。[24] S.-H. Dong和M. Lozada-Cassou，“具有硬核势的位置依赖质量薛定谔方程的精确解”，*Phys.Lett.A*，第337卷，第4-6期，第313–320页，2005年。[25] O. Mustafa和S. H. Mazharimousavi，“通过位置依赖质量赝动量算符重新审视排序歧义”，*Int. J. Theor. Phys.*，第46卷，第7期，第1786–1796页，2007年。

[26] J. R. F. Lima, M. Vieira, C. Furtado, F. Moraes, and C. Filgueiras, 《又一种位置依赖质量量子模型》，数学物理杂志，第 53 卷，第 7 期，072101 页，2012 年。[27] R. A. El-Nabulsi, 《研究半导体、有机异质结构和晶体杂质材料中位置依赖质量的一种广义自洽方法》，物理学*E*：低维系统与纳米结构，第 124 卷，114295 页，2020 年。[28] R. A. El-Nabulsi, 《位置依赖质量薛定谔方程的新方法及其在量子点和半导体中的意义》，*J. Phys. Chem. Sol.*，第 140 卷，109384 页，2020 年。[29] M. Barranco, M. Pi, S. M. Gatica, E. S. Hernández, and J. Navarro, 《混合 ^{4}He-^{3}He液滴的结构与能量学》，*Phys. Rev. B*，第 56 卷，第 14 期，8997 页，1997 年。[30] M. R. Geller and W. Kohn, 《组分渐变晶体中的电子量子力学》，物理评论快报，第 70 卷，第 20 期，3103 页，1993 年。[31] F. A. de Saavedra, J. Boronat, A. Polls, and A. Fabrocini, 《液态 ^{3}He中单个 ^{4}He原子的有效质量》，*Phys. Rev. B*，第 50 卷，第 6 期，4248 页，1994 年。[32] M. Willatzen and B. Lassen, 《一般纳米线结构中的Ben Daniel–Duke模型》，*J.Phys.-Condens. Mat.*，第 19 卷，第 13 期，136217 页，2007 年。[33] A. J. Peter and K. Navaneethakrishnan, 《具有位置依赖质量和乘积型分形几何的低维系统中的量子动力学》，物理学*E*：低维系统与纳米结构，第 40 卷，2747–2751 页，2008 年。[34] R. A. El-Nabulsi, 《晶格微结构中位置依赖质量粒子的动力学》，物理学*E*：低维系统与纳米结构，第 127 卷，114525 页，2020 年。[35]H. R. Christiansen and R. Lima, 《具有圆柱对称性和位置依赖质量载流子的量子异质结构的三维束缚态》，*http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4140065*，2023 年。[36] G. Bastard, 《包络函数近似下的超晶格能带结构》，*Phys.Rev.B*，第 24 卷，第 10 期，5693 页，1981 年。[37] Q.-G. Zhu and H. Kroemer, 《两种不同半导体突变异质结处有效质量波函数的界面连接规则》，*Phys. Rev. B*，第 27 卷，第 6 期，3519 页，1983 年。

[38] G. Bastard, 《应用于半导体异质结构的波动力学》。Les Editions de Physique, 1988 年。[39] I. Galbraith and G. Duggan, 《GaAs/(Al,Ga)As异质结的包络函数匹配条件》, *Phys. Rev. B*, 第 38 卷, 第 14 期, 10057 页, 1988 年。[40] S. Y. Ren and Y.-C. Chang, 《一维半无限晶体中的表面态/模》, *Ann. Phys.*, 第 325 卷, 第 5 期, 937–947 页, 2010 年。[41] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, 《量子力学》, 第 1 卷。John Wiley & Sons, 1977 年。[42] L. Dekar, L. Chetouani, and T. F. Hammann, 《具有光滑位置依赖质量的薛定谔方程的精确可解形式》, 数学物理杂志, 第 39 卷, 第 5 期, 2551–2563 页, 1998 年。[43] L. Dekar, L. Chetouani, and T. F. Hammann, 《光滑势能和质量阶跃的波函数》, *Phys. Rev. A*, 第 59 卷, 第 1 期, 107 页, 1999 年。[44] A. R. Plastino, A. Rigo, M. Casas, F. Garcias, and A. Plastino, 《位置依赖有效质量量子系统的超对称方法》, *Phys.Rev.A*, 第 60 卷, 第 6 期, 4318 页, 1999 年。[45] B. Gönül, B. Gönül, D. Tutcu, and O. Özer, 《位置依赖有效质量精确可解系统的超对称方法》, *Mod.Phys. Lett. A*, 第 17 卷, 第 31 期, 2057–2066 页, 2002 年。[46] S. Karthiga, V. C. Ruby, and M. Senthilvelan, 《位置依赖质量系统的综合超对称方法》, *Phys. Lett. A*, 第 382 卷, 第 25 期, 1645–1650 页, 2018 年。[47] B. Roy and P. Roy, 《有效质量薛定谔方程的李代数方法》, *J.Phys. A-Math. Gen.*, 第 35 卷, 第 17 期, 3961 页, 2002 年。[48] J.-P. Gazeau, V. Hussin, J. Moran, and K. Zelaya, 《可变质量受限系统的量子与半经典方面》, *Journal of Physics A:Mathematical andGeneral*, 第 53 卷, 505306 页, 2020 年。[49] J.-P. Gazeau, V. Hussin, J. Moran, and K. Zelaya, 《双模压缩态量子化与半经典图像》, *Annals of Physics*, 第 441 卷, 168888 页, 2020 年。[50] H. Rajbongshi, 《位置依赖质量薛定谔方程的精确解析解》, *Indian J. Phys.*, 第 92 卷, 第 3 期, 357–367 页, 2018 年。

[51] L. Jiang、L.-Z. Yi 和 C.-S. Jia，“含位置依赖质量的某些厄米势和非厄米势的薛定谔方程的精确解”，*Phys. Lett. A*，第 345 卷，第 4–6 期，第 279–286 页，2005 年。[52] O. Mustafa 和 S. H. Mazharimousavi，“具有位置依赖质量的非厄米 d维哈密顿量及其 η-赝厄米性生成元”，*Czech.J. Phys.*，第 56 卷，第 9 期，第 967–975 页，2006 年。[53] C. M. Bender，“$\mathcal{PT}$对称量子理论”，载于 *Journal of Physics: Conference Series*，第 631 卷，第 012002 页，IOP Publishing，2015 年。[54] R. El-Ganainy、M. Khajavikhan、D. N. Christodoulides 和 S. K. Ozdemir，“非厄米光学的黎明”，*Communication Physics*，第 2 卷，第 37 页，2019 年。[55] T. L. Li 和 K. J. Kuhn，“ 基于 GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$ 量子阱修正轮廓的带阶比对有效质量哈密顿量的依赖性”，*Phys. Rev. B*，第 47 卷，第 19 期，第 12760 页，1993 年。[56] R. A. Morrow 和 K. R. Brownstein，“突变异质结的模型有效质量哈密顿量及相关波函数匹配条件”，*Phys.Rev. B*，第 30 卷，第 2 期，第 678 页，1984 年。[57] P. Csavinszky 和 A. M. Elabsy，“突变异质结的模型有效质量哈密顿量及相关波函数匹配条件的数值研究”，*Semicond.Sci. Tech.*，第 3 卷，第 10 期，第 1010 页，1988 年。[58] A. de Souza Dutra 和 C. A. S. Almeida，“具有空间依赖有效质量的势的精确可解性”，*Phys. Lett. A*，第 275 卷，第 1–2 期，第 25–30 页，2000 年。[59] W. N. Bailey，广义超几何级数。Cambridge Tracts in Mathematics 第 32 号，Hafner Publishing Co Ltd，新版，1973 年。[60] P. M. Mathews 和 M. Lakshmanan，“具有速度依赖相互作用的一个量子力学可解的非多项式拉格朗日量”，*Il Nuovo Cimento A (1965-1970)*，第 26 卷，第 3 期，第 299–316 页，1975 年。[61] P. M. Mathews 和 M. Lakshmanan，“论一种独特的非线性振子”，*Quarterlyof AppliedMathematics*，第 32 卷，第 2 期，第 215–218 页，1974 年。[62] S. C. y Cruz、J. Negro 和 L. M. Nieto，“经典和量子位置依赖质量谐振子”，*Phys. Lett. A*，第 369 卷，第 5–6 期，第 400–406 页，2007 年。

[63] S. Karthiga、V. Chithiika Ruby、M. Senthilvelan 和 M. Lakshmanan，“一般有序位置依赖质量系统的量子可解性：Mathews-Lakshmanan 振子”，数学物理杂志，第 58 卷，第 10 期，第 102110 页，2017 年。[64] B. Midya、B. Roy 和 T. Tanaka，“位置依赖质量对 B 型和 X_2 $\mathcal{N}$重超对称性动力学破缺的影响”，物理学杂志 *A*：数学与理论，第 45 卷，第 20 期，第 205303 页，2012 年。[65] J. P. G. Nascimento 和 I. Guedes，“位置依赖质量的经典振子”，巴西物理教学杂志，第 36 卷，第 4 期，第 01–06 页，2014 年。[66] A. G. M. Schmidt，“具有位置依赖质量的薛定谔方程的波包复现”，*Phys. Lett. A*，第 353 卷，第 6 期，第 459–462 页，2006 年。[67] D. Kulikov，“位置依赖质量薛定谔方程的比较定理”，国际学术研究通报，2012 年，第 461452 页，2012 年。[68] T. Vachaspati，“无底势中的束缚态”，物理评论 *A*，第 66 卷，第 1 期，第 014104 页，2002 年。[69] A. Sous 和 M. El-Kawni，“具有从下方无界势的一般本征值问题”，国际现代物理学杂志 *A*，第 24 卷，第 22 期，第 4169–4176 页，2009 年。[70] A. Demić、V. Milanović、J. Radovanović 和 M. Musić，“无下界势的 WKB 方法”，现代物理快报 *B*，第 30 卷，第 03 期，第 1650003 页，2016 年。[71] Z. Ahmed、D. Ghosh、S. Kumar 和 N. Turumella，“开放势阱和无底势垒的可解模型：一维指数势”，欧洲物理学杂志，第 39 卷，第 2 期，第 025404 页，2018 年。[72] M. Hu、K. Guo、Q. Yu 和 Z. Zhang，“利用短程无底指数势阱研究三次谐波产生”，超晶格与微结构，第 122 卷，第 538–547 页，2018 年。[73] Z. Ahmed、S. Kumar、D. Ghosh 和 T. Goswami，“一维连续谱中的束缚态（BIC）的可解模型”，物理学文献，第 94 卷，第 10 期，第 105214 页，2019 年。[74] H.-T. Cho 和 C.-L. Ho，“一种具有全透射模的新型准精确可解模型”，物理学杂志 *A*：数学与理论，第 41 卷，第 17 期，第 172002 页，2008 年。[75] H.-T. Cho 和 C.-L. Ho，“具有从下方无界对称势的哈密顿算符的自伴扩张”，物理学杂志 *A*：数学与理论，第 41 卷，第 25 期，第 255308 页，2008 年。

[76] C. Cohen-Tannoudji、B. Diu 和 F. Laloë，量子力学，第 2 卷。John Wiley and Sons，1978 年。