

第十三周

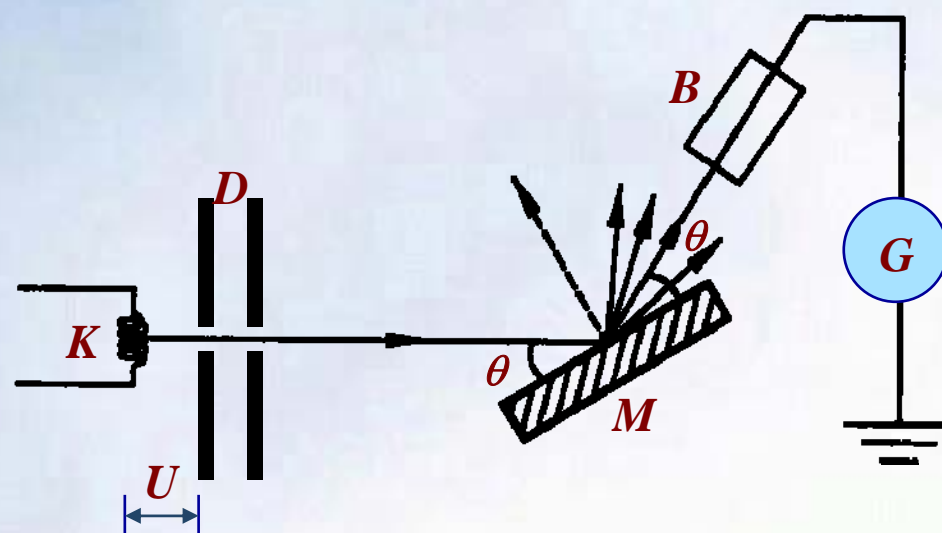
第25章 量子力学基础

§ 25. 1, § 25. 2, § 25. 3, § 25. 4,
§ 25. 5, § 25. 6(一般了解)

作业: P451 25-1, 25-4, 25-6,
* 25-7, 25-10, 25-11
* 25-15, 25-16,

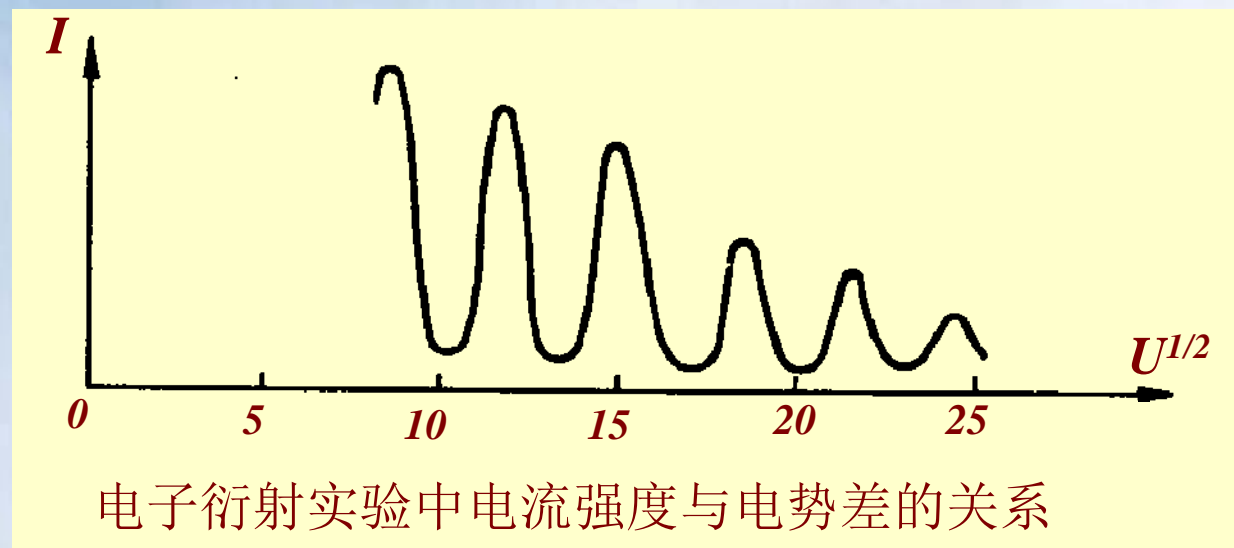
二、德布罗意波的实验验证

1926年，戴维孙、革末将电子枪射出的电子束投射到镍单晶体表面，得到电子衍射的实验现象，经计算证明德布罗意公式的正确性。



电子晶体衍射实验示意图

阴极K电子经 U 加速后，通过光阑 D 成为一束很细的平行电子射线。以掠射角 θ 角投射到镍单晶体 M 上，反射后经 B 收集。电流强度 I 由 G 测出，调节 U ，可得 $U \sim I$ 曲线：



图中当电势差为特定值时，电流才有极大值。

与 X 射线相仿，只有当入射波的波长 λ 满足布拉格公式：

$$2d \sin \theta = k\lambda \quad (k = 1, 2, 3, \dots)$$

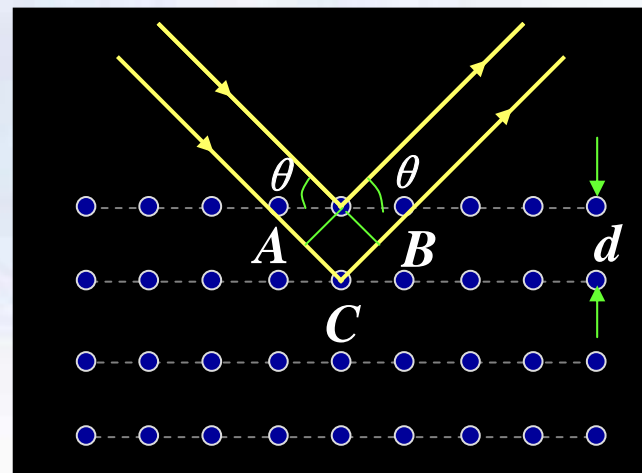
电子射线才能在反射方向出现强度的极大值。

按照德布罗意公式

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v}$$

电子经电场加速：

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 = eU$$



$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m_0}}$$

将此速度代入德布罗意公式：

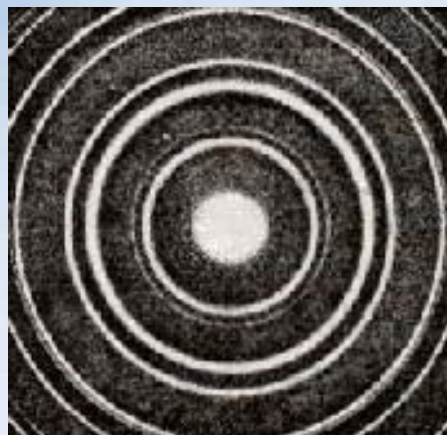
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2em_0}} \frac{1}{\sqrt{U}}$$

所以：

$$2d \sin \theta = k\lambda = k \frac{h}{\sqrt{2em_0}} \frac{1}{\sqrt{U}}$$

d ， θ 给定后，当电势差 U 满足上式时，电流强度 I 有极大值。由此计算所得的 U 与实验结果是相符的。说明德布罗意假设的正确性。

1927年，英国物理学家汤姆逊，使用电子束垂直穿过金属箔，在透射方向用照相底片接收，获得同心圆衍射图象。这进一步为电子具有波动性提供了有力证据。



电子束金属箔衍射

1931年鲁斯卡设计了第一台电子显微镜。

§ 20-2 不确定性关系

一、坐标和动量的不确定关系

在经典力学中，运动物体具有完全确定的位置、动量、能量和角动量。对于微观粒子，虽然分别确定其位置或动量在精确度上并不存在限制，但在实验中同时确定其位置和动量时，它们的精确度是有限的。

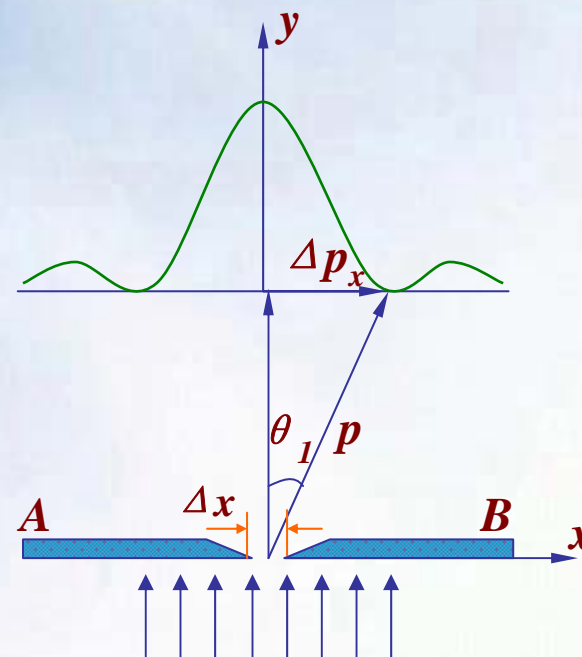
1927年海森伯提出微观粒子位置和动量两者不确定量之间的关系满足：

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad \hbar = h / 2\pi$$

下面以电子单缝衍射为例，说明此关系。

Δx 的不确定量为缝宽 d ，而动量的 x 分量 p_x 的不确定量？考虑出现在中央衍射主极大区域的电子， $\sin \theta_1 = \lambda/d$ （第一级暗纹）。电子通过狭缝时 p_x 在 $0 \sim p \sin \theta_1$ 之间，即 $\Delta p_x = p \sin \theta_1$ 。

应用德布罗意关系 $\lambda = h/p$ ， $d = \Delta x$ ，得：



$$\Delta p_x = p \sin \theta_1 = p \frac{\lambda}{\Delta x} = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{\Delta x} = \frac{h}{\Delta x}$$

若考虑次级衍射，则 Δp_x 更大，故得：

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

严格推导应为：

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar / 2, \quad \hbar = h / 2\pi$$

不确定关系式表明，微观粒子的位置和动量不可能同时准确的确定。对位置的限制越小（单缝越窄， Δx 越小）、 x 越准确，则动量的不确定量 Δp_x 就越大（电子衍射现象就越显著）。

例题2:

设子弹的质量为0.01kg，枪口的直径为0.5cm，试求子弹射出枪口时横向速度的不确定量。

解：子弹位置的不确定量 $\Delta x = 0.5\text{cm}$ ，由于 $\Delta p_x = m\Delta v_x$ ，由不确定关系得子弹射出枪口时横向速度的不确定量：

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{2 \times 0.01 \times 0.5 \times 10^{-2}} = 1.05 \times 10^{-30} \text{ m/s}$$

与子弹每秒几百米的速度相比，此横向速度可忽略，即子弹速度是确定的。

例题3:

显像管中电子的速度一般为 $1 \times 10^7 \text{m/s}$ ，电子枪的枪口直径设为 0.01cm ，试求电子射出电子枪后横向速度的不确定量。

解：电子横向位置的不确定量 $\Delta x = 0.01 \text{cm}$ ，由不确定关系式得：

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 10^{-4}} = 0.58 \text{m/s}$$

由于 $\Delta v_x \ll v$ ，电子的速度是相当确定的，波动性不产生实际影响，此电子运动问题仍然属于经典力学问题。

例题4:

试求原子中电子速度的不确定量。取原子的线度约 10^{-10}m 。

解：原子中电子位置的不确定量 $\Delta r = 10^{-10}\text{m}$ ，由不确定关系式得：

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m\Delta r} = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 10^{-10}} = 5.8 \times 10^5 \text{ m/s}$$

由波尔理论可估算出氢原子中电子的轨道运动速度约为 10^6m/s 。速度的不确定量与速度本身大小基本相同，波动性十分显著。

二、能量和时间的不确定关系

海森伯不确定关系的另一个表达形式是能量和时间这对物理量的测量，两者的不确定关系：

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

用上述关系可以解释各原子激发态的能级宽度 ΔE 与它在激发态的平均寿命 Δt 之间的关系。原子在激发态的典型的平均寿命 $\Delta t=10^{-8}\text{s}$ ，则原子激发态的能级宽度：

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t} \approx 10^{-8} \text{ eV}$$

除基态外，原子在激发态平均寿命越长，能级宽度就越小。

§ 20-3 波函数及其统计解释

一、波函数的引入

由于物质具有波动性，为描述微观粒子的运动状态，薛定谔提出用一个函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 来描写物质波，称之为物质波的波函数。

在经典物理中，电磁波或机械波的表达式：

$$Y(x, t) = A \cos 2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})$$

写成复数形式：

$$Y(x, t) = A e^{-i2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})}$$

对于沿 x 轴方向运动的自由微观粒子，其动量 p 和能量 E 都恒定。由德布罗意关系： $\lambda = h/p$ ， $\nu = E/h$ 。类似于上式，微观粒子波函数可写为：

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-i2\pi(vt - \frac{x}{\lambda})} = \Psi_0 e^{-i2\pi(Et - px)/h}$$

此式即为描述一维自由粒子物质波的波函数。

二、波函数的统计解释

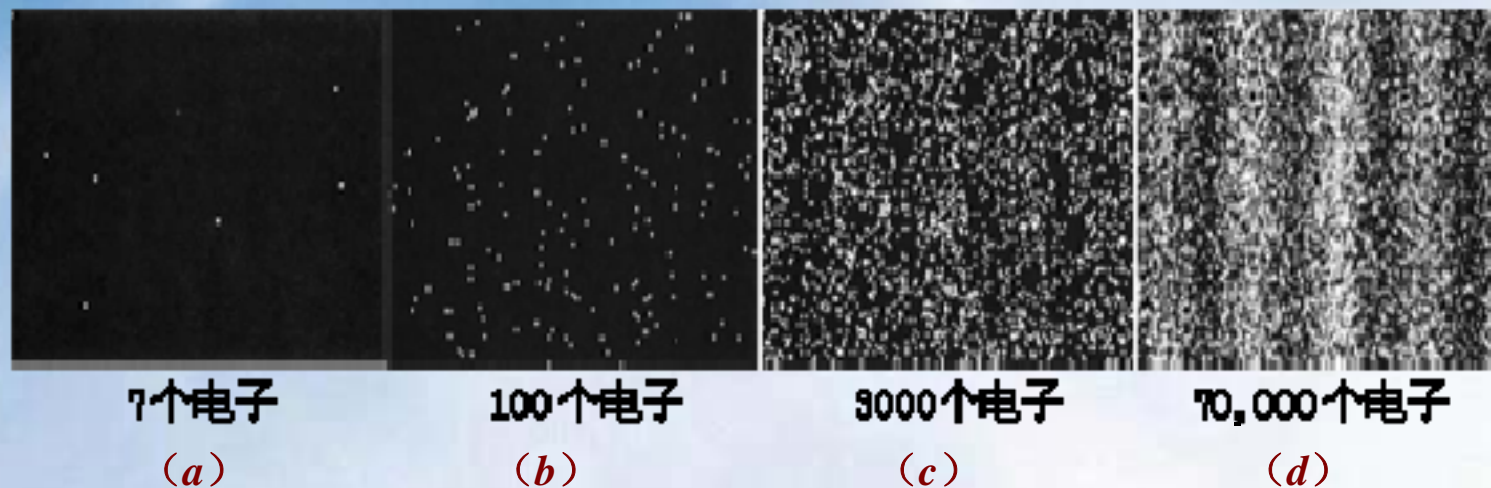
用光波与物质波比较来阐明波函数的物理意义：

从波动学的观点：光衍射图样亮处，振幅的平方大，暗处振幅平方小。

从微观粒子的观点：衍射图样亮处，单位时间内到达该处的光子数多。相当于光子到达该处的概率大。说明光子在某处出现的概率与光波振幅的平方成正比。

电子的衍射与光的衍射类似：对电子来说，在某一时刻，空间某一地点，粒子出现的概率正比于该时刻、该地点的波函数振幅的平方。这便是玻恩提出的波函数的统计解释。

下图(a) (b) (c) (d)分别为 $N=7$ 、 $N=100$ 、 $N=3000$ 、 $N=70000$ 个电子形成的双缝干涉图样。



电子的双缝干涉图样

波函数振幅的平方可用波函数 $\Psi(x,t)$ 与它的共轭复数 $\Psi^*(x,t)$ 的乘积或其模的平方 $|\Psi(x,t)|^2$ 表示。

t 时刻，在空间某处 (x, y, z) 附近的无限小体积元 dV 内粒子出现的概率为：

$$\begin{aligned} dW(x, y, z, t) &= |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV \\ &= \Psi(x, y, z, t) \Psi^*(x, y, z, t) dV \end{aligned}$$

$|\Psi(x, y, z, t)|^2$ 称为在 (x, y, z) 处的概率密度。

$\Psi(x, y, z, t)$ 作为概率波的波函数需满足以下要求：

(1) $\Psi(x, y, z, t)$ 是单值函数，即粒子在空间某点出现的概率不能是多值。

(2) $\Psi(x, y, z, t)$ 是连续函数。波函数在空间的一阶偏导也连续。

(3) $\Psi(x, y, z, t)$ 是有限函数。

(4) 归一化条件：

$$\iiint \Psi \Psi^* dx dy dz = 1$$

§ 20-4 薛定谔方程

1926年奥地利物理学家薛定谔(Erwin Schrödinger)提出一个描述低速运动的微观粒子所遵循的方程，称为薛定谔方程。

薛定谔，奥地利人，是量子力学的重要奠基人之一，同时在固体的比热、统计热力学、原子光谱及镭的放射性等方面的研究都有很大成就。

薛定谔对分子生物学的发展也做过工作。由于他的影响，不少物理学家参与了生物学的研究工作，使物理学和生物学相结合，形成了现代分子生物学的最显著的特点之一。

薛定谔对量子理论的发展贡献卓著，因而于1933年同英国物理学家狄拉克共获诺贝尔物理奖。



薛定谔 1887–1961

一维空间运动的自由粒子的波函数为：

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-i(Et - px)/\hbar}$$

上式对时间 t 和 x 做一阶及二阶偏导：

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad (2)$$

自由粒子的能量和动量的非相对论关系为：

$$E = p^2 / 2m$$

将①②两式联立：

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

此式即为一维运动的自由粒子波函数所满足的微分方程。

若粒子在势场 $U(\mathbf{x},t)$ 中运动，粒子的总能量与动量的关系为：

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x,t)$$

代入①②两式，可得：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right] \Psi(x, t)$$

粒子在三维空间运动，上式可推广为：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

上式为势场中运动的微观粒子所满足的微分方程，称为薛定谔方程。以上介绍的是薛定谔方程建立的思路，并非推导。薛定谔方程是量子力学的基本方程，其正确性只能由实验检验。

二、定态薛定谔方程

一般来说，只要知道粒子质量和它在势场中的势能函数 U 的具体形式，就可写出薛定谔方程。只有当方程中的总能量 E 为某些特定值时方程才有解。这些 E 值称为能量的**本征值**，相应的波函数称为**本征解**或**本征函数**。

当势能 U 与时间无关，而只是坐标的函数时，可将波函数分离变量：

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

将上式对 x 和 t 求偏导：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{d \psi}{d x} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{d x^2} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \end{array} \right.$$

将上述结果代入薛定谔方程，得：

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi(x) = 0$$

此式称为一维定态薛定谔方程。推广到三维为：

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = 0$$

粒子处在定态时的一个重要特征是，它在各处出现的概率不随时间变化：

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \left| \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \right|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$$

由定态薛定谔方程求得的波函数必须满足单值、有限、连续三个标准条件，其解才有意义。

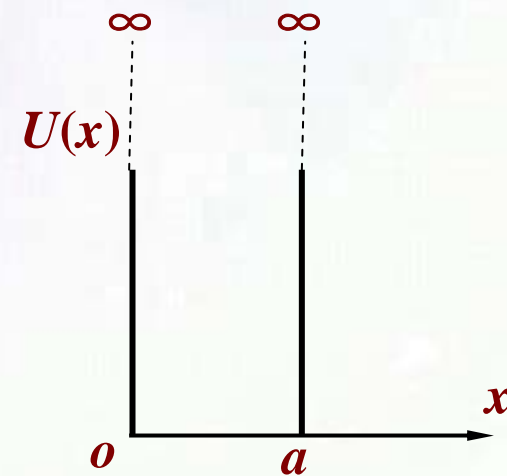
§ 20-5 一维无限深势阱中的粒子

势阱：金属中的电子、原子中的电子、原子核中的质子和中子等粒子，其运动有一共同特点，它们都在保守力场的作用下，被限制在一定的范围内，即处于束缚态。为使计算简化，提出一个理想的势阱模型：

无限深势阱。

一维无限深势阱的势能分布为：

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$$



在阱外 ($x \leq 0$ 和 $x \geq a$)，定态薛定谔方程为：

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - \infty]\psi(x) = 0$$

对于 E 为有限值的粒子，要使方程成立，唯有 $\psi(x)=0$ 。

在阱内 ($0 < x < a$)，定态薛定谔方程为：

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

令：
$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

定态薛定谔方程可改写为：

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$$

此方程的通解为：

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

由于粒子只能在势阱中，且必须满足连续条件，则在势阱壁上由：

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(a) = 0$$

由 $\psi(0) = 0$ 得: $B=0$

由 $\psi(a) = 0$ 得: $\sin ka=0$, 即:

$$ka = n\pi, \text{或 } k = n\pi / a \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

代入通解, 得薛定谔方程的解为:

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a}$$

由归一化条件:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = \int_0^a [A \sin \frac{n\pi x}{a}]^2 dx = 1$$

由此得：

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

定态波函数为：

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

一维无限深势阱中粒子的运动特征：

1. 能量的量子化

由 $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ 和 $k = n\pi/a$ 可解得：

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

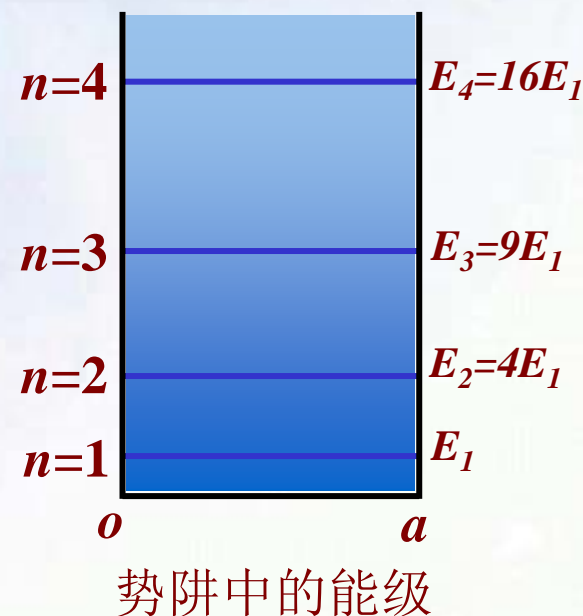
n 称为量子数。

势阱中粒子的能量只能取一系列分立的值。在量子力学中，能量的量子化是薛定谔方程的必然结果。

2.粒子的最小能量

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

此能量称为零点能。零点能是一切量子系统特有的现象，即使绝对零度，运动也依然存在。



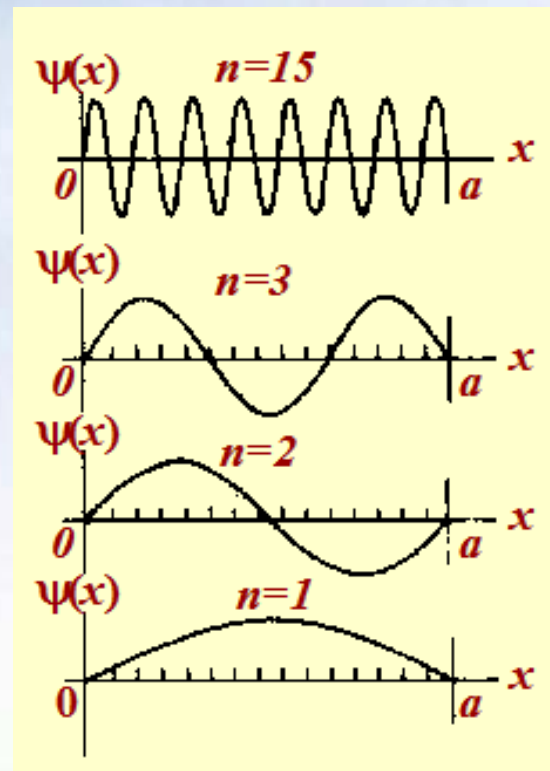
3.粒子在势阱的不同位置中出现的概率

对无限深势阱，定态薛定谔方程的解有驻波形式，驻波的波长：

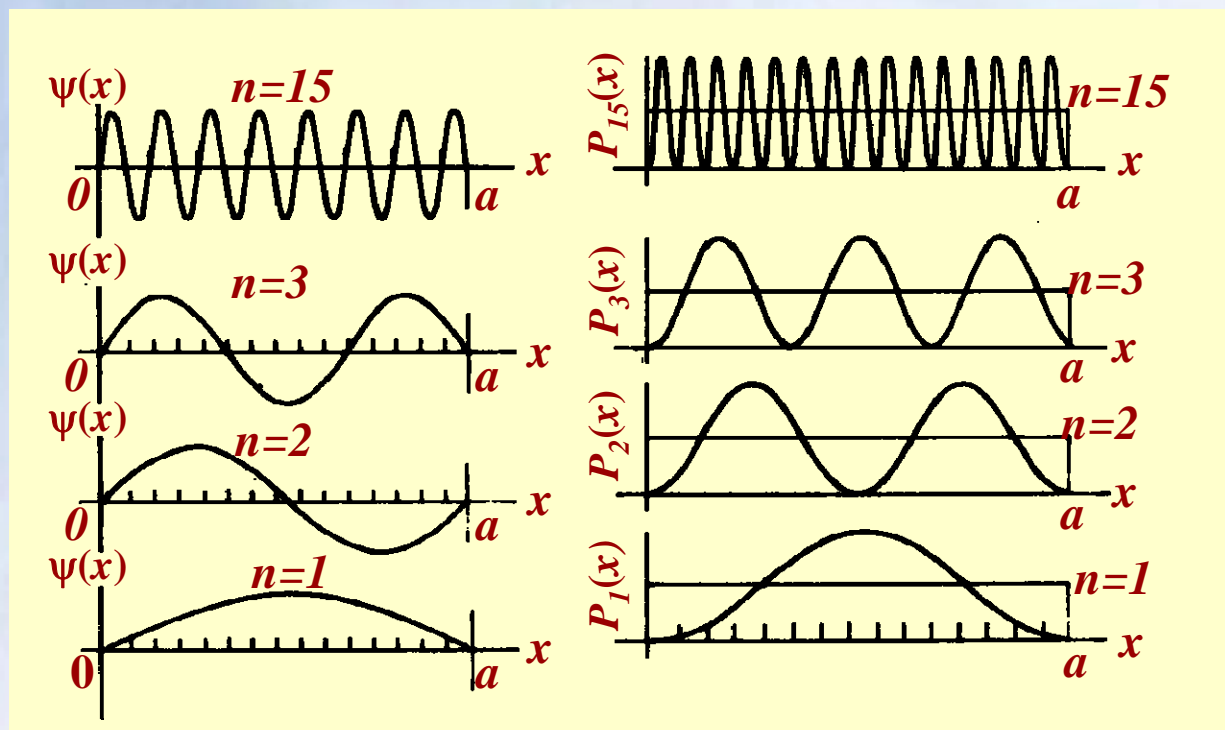
$$\lambda_n = \frac{2a}{n}$$

与两端固定的弦线上的驻波相似。粒子的概率密度：

$$P(x) = |\psi(x)|^2$$



按经典物理，粒子在势阱内出现的概率应处处相同；但按量子力学结论，粒子出现的概率在势阱内有一定分布。但当 n 趋于无限大时， $P(x)$ 振荡过密，实验只观测到 $P(x)$ 均匀分布，这时经典和量子力学的结果趋同。



例题5:

设想一电子在无限深势阱中运动，如果势阱宽度分别为 $1.0 \times 10^{-2}\text{m}$ 和 10^{-10}m ，试讨论这两种情况下相邻能级的能量差。

解：根据势阱的能级公式：

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$$

得到两相邻能级的能量差：

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n + 1) \frac{h^2}{8ma^2}$$

当 $a=0.01\text{m}$ 时:

$$E_n = \frac{(6.63 \times 10^{-34})^2}{8 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (10^{-2})^2} n^2 = 3.77 \times 10^{-15} n^2 (\text{eV})$$

$$\Delta E = (2n + 1) 3.77 \times 10^{-15} (\text{eV})$$

此能级间隔非常小，可把电子能量看成连续的。

当 $a=10^{-10}\text{m}$ 时:

$$E_n = 3.77 \times n^2 (\text{eV})$$

$$\Delta E = (2n + 1) 3.77 (\text{eV})$$

此时，电子的能量量子化已明显地表现出来了。

当 $n \gg 1$ 时，能级的相对间隔近似为：

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2n \frac{h^2}{8ma^2}}{n^2 \frac{h^2}{8ma^2}} = \frac{2}{n}$$

$\frac{\Delta E_n}{E_n}$ 随 n 的增加反比地减小。当 $n \rightarrow \infty$ 时，

ΔE_n 比 E_n 要小得多，可认为能量是连续的。

$n \rightarrow \infty$ 时，量子物理将趋于经典物理。

例题6:

求一维无限深势阱中粒子概率密度最大值的位置。

解：一维无限深势阱中粒子概率密度为：

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

将上式对 x 求一次导数，并令其为零：

$$\frac{d|\psi_n(x)|^2}{dx} = \frac{4n\pi}{a^2} \sin \frac{n\pi}{a} x \cos \frac{n\pi}{a} x = 0$$

$|\psi_n(x)|^2$ 的最大值不应为零，故 $\sin \frac{n\pi}{a} x \neq 0$ 。

只有: $\cos \frac{n\pi}{a} x = 0, \quad 0 < x < a$

于是: $\frac{n\pi}{a} x = (2N+1) \frac{\pi}{2}$

由此解得最大值的位置为:

$$x = (2N+1) \frac{a}{2n} \quad N = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

例如:

$n = 1, N = 0$ 最大值位置: $x = \frac{1}{2}a$

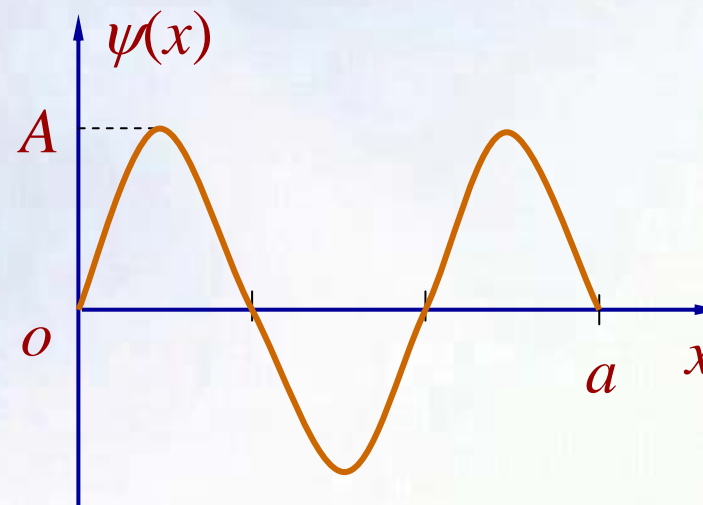
$n = 2, N = 0, 1,$ 最大值位置: $x = \frac{1}{4}a, \frac{3}{4}a$

$n = 3, N = 0, 1, 2,$ 最大值位置: $x = \frac{1}{6}a, \frac{3}{6}a, \frac{5}{6}a$

例题7:

粒子在宽为 a 的一维无限深势阱中运动，其某一能态的波函数如图所示。求常数 A 及粒子出现的概率密度为极大值的位置。

解：由题意可知，其概率密度 $|\psi(x)|^2$ 的分布曲线如下图所示：



由图可知，此波函数的表达式为：(空间周期为 $2a/3$)

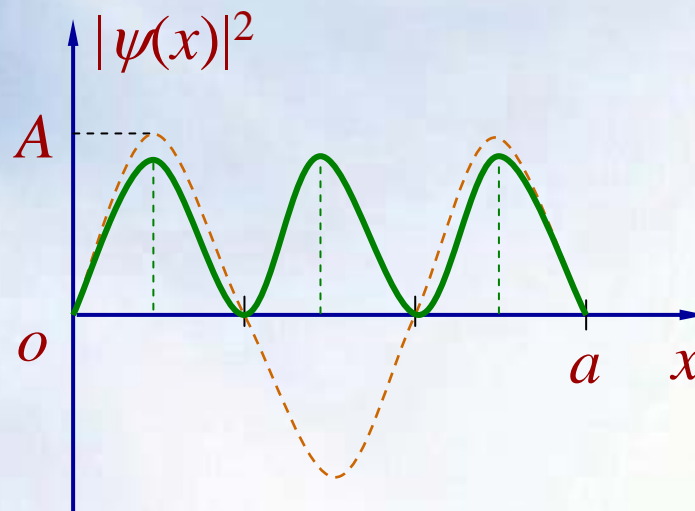
$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

其中A可由归一化条件求得：

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

即：

$$\int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx = 1$$



得: $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$, 而概率密度,

$$|\psi(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) = \frac{1}{a} \left[1 - \cos\left(\frac{6\pi x}{a}\right)\right]$$

当: $\frac{6\pi x}{a} = (2k+1)\pi$, $x = \frac{a}{6}(2k+1)$ 时,

$|\psi(x)|^2$ 有极大值。由于 $0 < x < a$, 所以

$x = \frac{a}{6}, \frac{a}{2}, \frac{5a}{6}$ 处概率密度为极大值。

例题8:

一粒子沿 x 方向运动，其波函数为：

$$\varphi(x) = C \frac{1}{1+ix} (-\infty < x < \infty)$$

试求：(1)归一化常数 C ；(2)发现粒子概率密度最大的位置；(3)在 $x=0$ 到 $x=1$ 之间粒子出现的概率。

解 (1) 由归一化条件

$$\int_V |\varphi|^2 dV = 1$$

因为粒子运动是一维的，有

$$\int_{-\infty}^{\infty} C^2 \left| \frac{1}{1+ix} \right|^2 dx = 1$$

$$\text{即: } \int_{-\infty}^{\infty} C^2 \frac{1}{1+x^2} dx = C^2 \cdot [\arctan x]_{-\infty}^{\infty} = C^2 \cdot \pi = 1$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

$$(2) \text{ 概率密度 } |\varphi(x)|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{1+ix} \right|^2 = \frac{1}{(1+x^2)\pi}$$

$$\text{所以 } \frac{d|\varphi(x)|^2}{dx} = -\frac{1}{\pi} \frac{2x}{(1+x^2)^2}$$

令：上式为零，得 $x=0$

因此，发现粒子概率密度最大的位置为 $x=0$ 处。

(3) 在区间 $[0, 1]$ 内粒子出现的概率

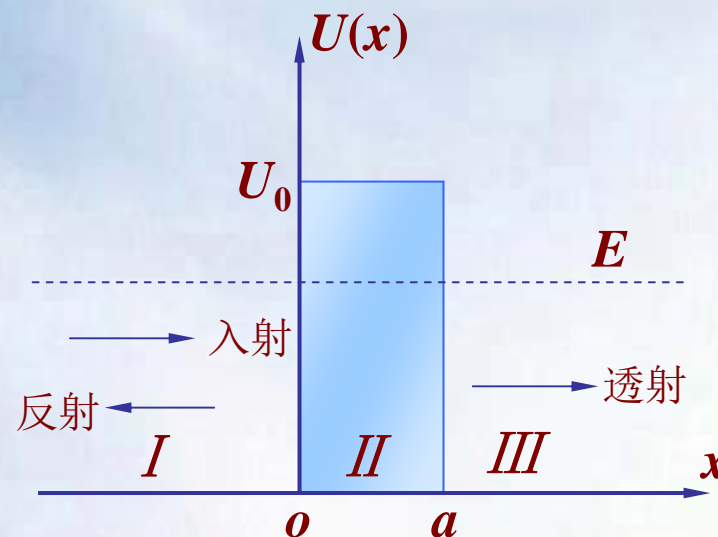
$$\begin{aligned} W &= \int_0^1 |\varphi(x)|^2 dx = \int_0^1 \frac{1}{(1+x^2)\pi} dx \\ &= \frac{1}{\pi} (\arctan 1 - \arctan 0) = \frac{1}{4} = 25\% \end{aligned}$$

§ 20-6 势垒 隧道效应 *

一、势垒和隧道效应

一粒子在下图所示的势场中运动，势能分布为：

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x < 0, x > a \end{cases}$$



这种势能分布称为**势垒**。

当粒子的能量 $E > U_0$ 时，无论是经典还是量子理论，粒子都可以穿过区域II到达III。当粒子的能量 $E < U_0$ 时，从经典理论看，粒子不可能

进入II区。但从量子力学分析，
粒子仍可以穿过II区到达III区。

设粒子质量 m ，有一定的能量 E ，从区域I向II运动，因 U_0 与时间无关，所以是定态问题：
在区域I，设波函数为 $\psi_1(x)$ ，薛定谔方程为：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = E\psi_1(x)$$

在区域II，设波函数为 $\psi_2(x)$ ，薛定谔方程为：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + U_0\psi_2(x) = E\psi_2(x)$$

在区域III，设波函数为 $\psi_3(x)$ ，薛定谔方程为：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} = E\psi_3(x)$$

考虑 $E < U_0$ 的情况，令：

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

这样定义的 k_1 、 k_2 为实数，代入方程：

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0 \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 = 0 \quad \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_1^2\psi_3 = 0$$

上述方程的解为：

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2(x) = B_1 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$

$$\psi_3(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}$$

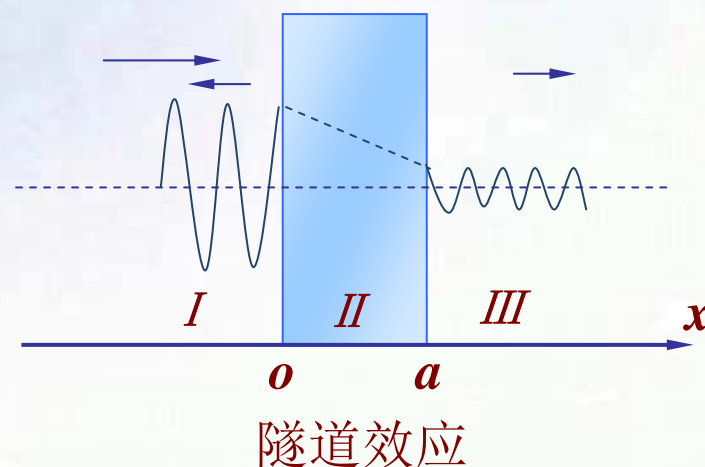
以上一、三式中，第一项表示沿 x 正向传播的平面波，第二项表示沿 x 负向传播的反射波。粒子在III区不会有反射，故 $C_2=0$ ，再由波函数的单值、连续的条件，有：

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a), \quad \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a}$$

求解结果是五个常数都不为零，可见粒子可能穿透比其动能更高的势垒，此现象称为**隧道效应**。

通常用贯穿系数表示粒子穿透势垒的概率，定义为透射波与入射波的“强度”之比：



$$T = \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2} \propto e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}a} = e^{-2k_2 a}$$