# 一维运动问题

# 一维自由粒子（$U$=0）的定态方程

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

即：$\psi''(x)+\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x)=0$ ，$p=\sqrt{2mE}$

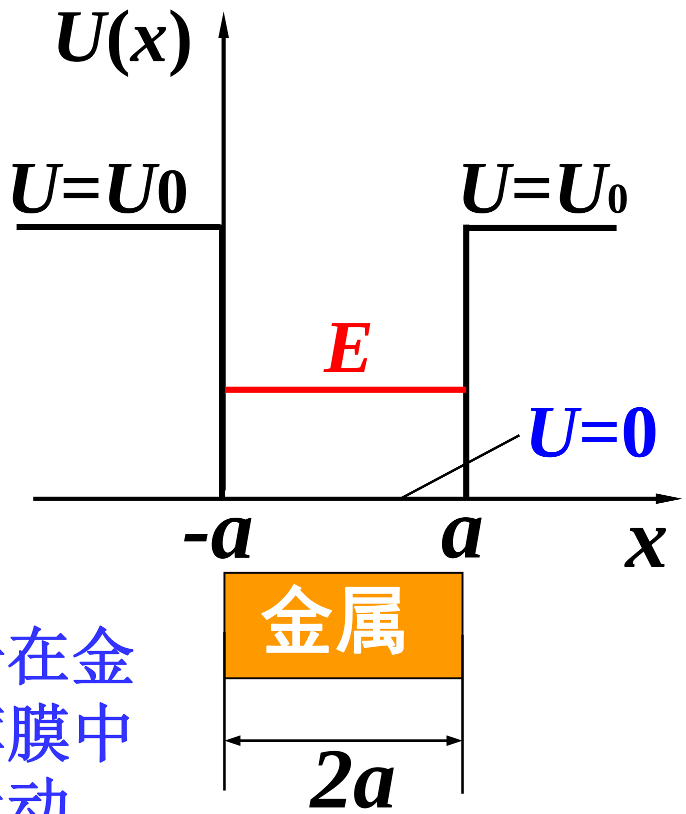
亥姆霍兹方程

$\Rightarrow \psi(x)=C_1e^{\frac{i}{\hbar}px}+C_2e^{-\frac{i}{\hbar}px}$

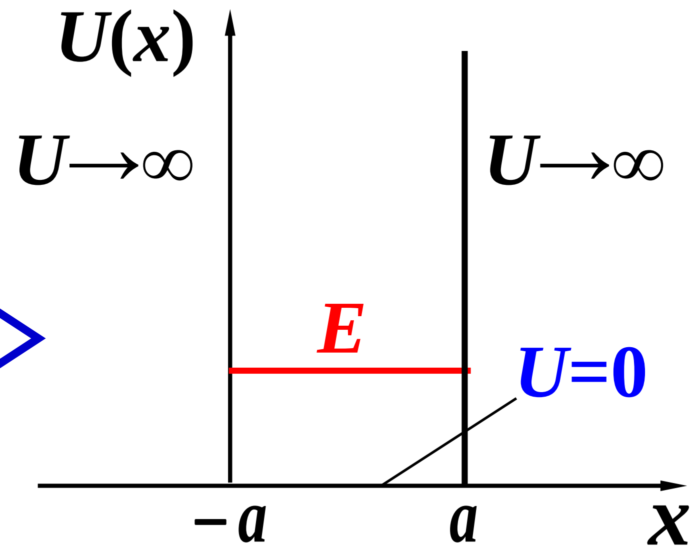
定态解：$\Psi(x,t)=C_1e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}+C_2e^{-\frac{i}{\hbar}(px+Et)}$

向右运动的平面波 $\longrightarrow$ 　　$\longleftarrow$ 向左运动的平面波

# 一维无限深方势阱




电子在金属薄膜中的运动




无限深方势阱

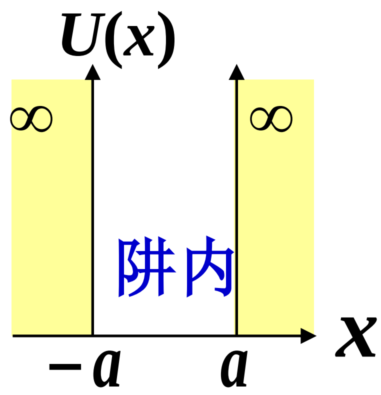
如果$E<<U_0$,则可近似认为$U_0$无限大-无限深势阱

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

# 定态薛定谔方程的形式：

势阱内 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2}=E\psi_1,\quad |x|<a$

势阱外 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2}+U_0\psi_2=E\psi_2,\quad |x|>a$




1、阱外 $|x|\geq a \rightarrow U(x)=\infty,\ \psi_2=0$

粒子被束缚在势阱内（束缚态 $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi_2(x)=0$）

2、阱内 $|x|<a \rightarrow U=0$

方程的形式类似于一维自由粒子

## 势阱内解的一般形式：

$$\psi(x)=c_1e^{\frac{i}{\hbar}px}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}px}, \quad p\equiv\sqrt{2mE}$$

$c_1$，$c_2$ 为待定常数，由波函数应满足的“单值、 有限、连续”条件决定。“单值、有限”已经满足，下面看连续条件：

$$\begin{cases}\psi(-a)=0 \Rightarrow c_1e^{-\frac{i}{\hbar}pa}+c_2e^{\frac{i}{\hbar}pa}=0\\ \psi(a)=0 \Rightarrow c_1e^{\frac{i}{\hbar}pa}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}pa}=0\end{cases}$$

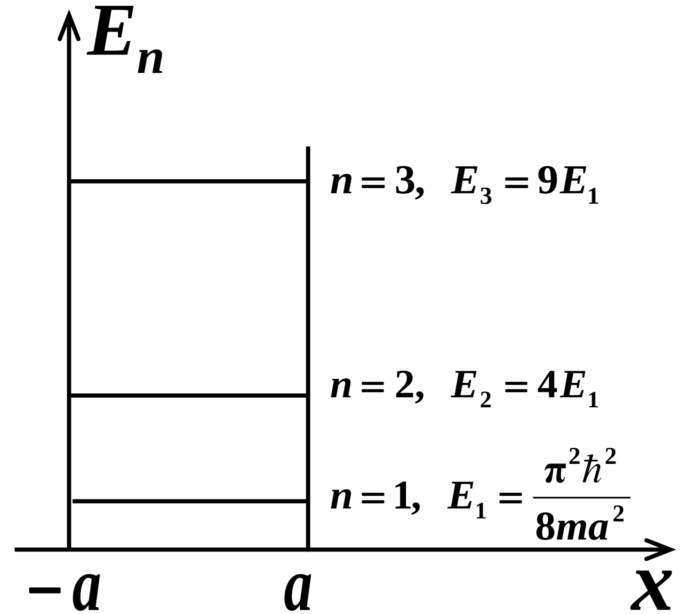
$$\begin{cases} c_1 e^{-\frac{i}{\hbar}pa} + c_2 e^{\frac{i}{\hbar}pa} = 0 \\ c_1 e^{\frac{i}{\hbar}pa} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}pa} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 / c_2 = -e^{\frac{2i}{\hbar}pa} \\ c_1 / c_2 = -e^{-\frac{2i}{\hbar}pa} \end{cases}$$

$$\Rightarrow e^{\frac{4i}{\hbar}pa} = 1 \text{ or } \frac{4i}{\hbar}pa = 2in\pi,\ n = 1,2,3..$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}, n = 1,2,3..$$

# 一维无限深势阱能量本征值：

$$\boxed{E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{8ma^2},\ n=1,2,3..}$$




【思考】为什么不取 $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$ ？

其中$n$称为量子数，$n$=1代表基态，取其它值代表激发态。这表明，一维无限深方势阱中运动粒子的能量是量子化的

●能级间隔 $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}(2n+1) \propto \dfrac{1}{ma^2}$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \xrightarrow[n>>1]{} \frac{2}{n} \propto \frac{1}{n}$$

$$\left.\begin{array}{l} a\uparrow \\ m\uparrow \end{array}\right\} \rightarrow \Delta E_n \downarrow, \quad n\uparrow \rightarrow \frac{\Delta E_n}{E_n} \downarrow$$

宏观情况(能级变化>>$\Delta E_n$)或量子数很大时($n$>>1)，可认为能量连续

● 最低能量（基态能量）$E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} > 0$ — 零点能

（真空不空！）

与经典粒子不同, 体现了粒子的波动性

从不确定关系也可以给出粗略的说明:

位置的不确定度: $\Delta x \approx a$ ,动量不确定度: $\Delta p = \sqrt{2mE} = \dfrac{\pi\hbar}{2a}$

检查不确定关系: $\Delta x \cdot \Delta p = \dfrac{\pi}{2}\hbar$

● 态的宇称是偶奇相间，基态为偶宇称

● 波函数的节点数为 $n-1$

零点数

# 势阱内粒子的波函数：

$$\psi_n(x)=c_1e^{\frac{i}{\hbar}p_nx}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}p_nx},\quad p_n\equiv\frac{\pi\hbar n}{2a}$$

$$\psi_n(x)=c_2\left(-e^{\frac{i}{\hbar}p_nx+in\pi}+e^{-\frac{i}{\hbar}p_nx}\right)$$

$$\psi_n(x)=c_2'\left(-e^{\frac{i}{\hbar}p_n(x+a)}+e^{-\frac{i}{\hbar}p_n(x+a)}\right)$$

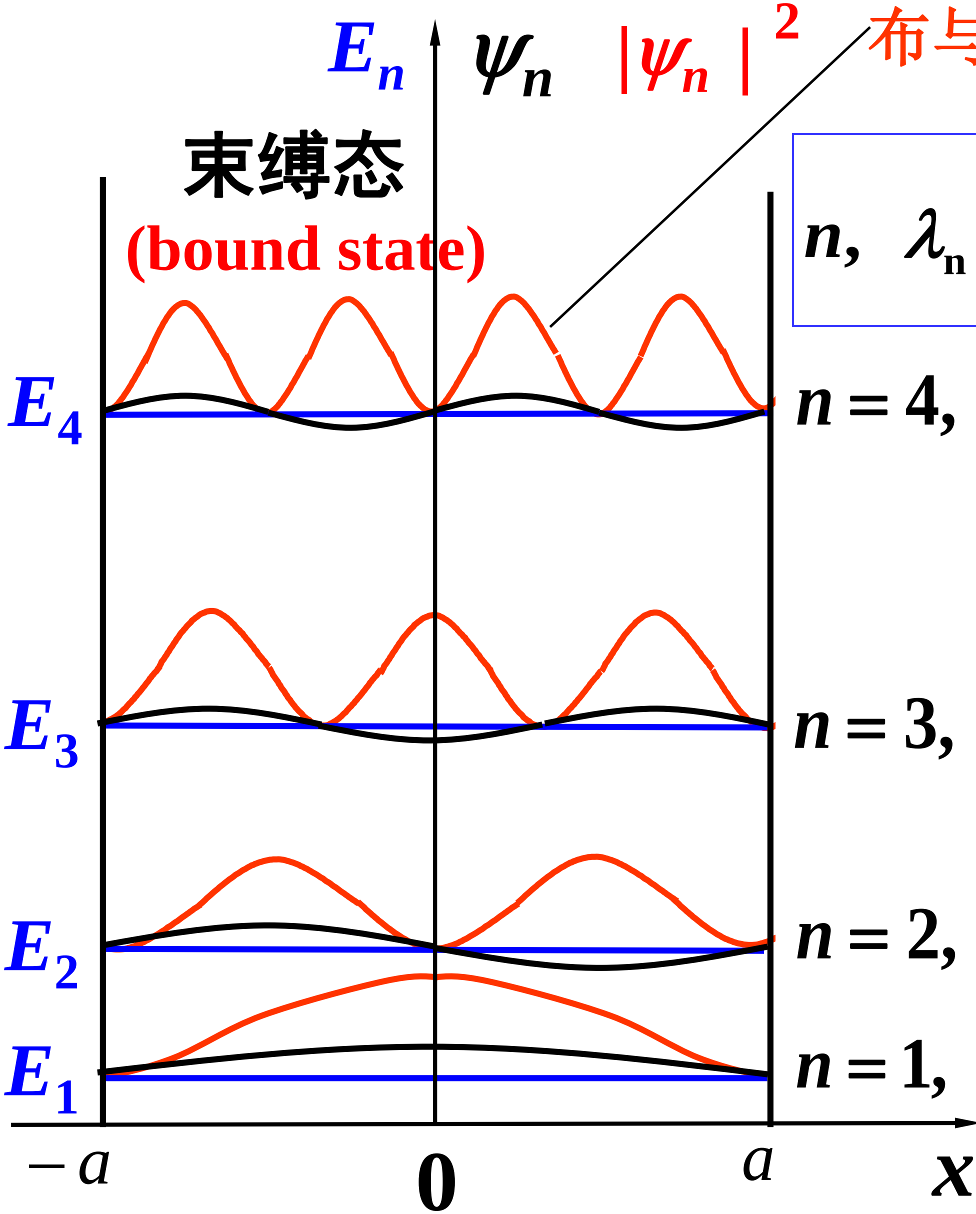
$$\boxed{e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta}$$

$$\psi_n(x)=\underbrace{A\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)}_{\text{驻波形式}}$$

归一化系数：$A=\frac{1}{\sqrt{a}}$

由 $\int_{-a}^{a}\psi_n^2(x)\mathrm{d}x=1$ 得到

势阱内粒子概率分布与经典情况不同




$$\boxed{n,\ \lambda_n=\frac{4a}{n},\ E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}}$$

$$n=4,\ \lambda_4=a,\quad E_4=\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

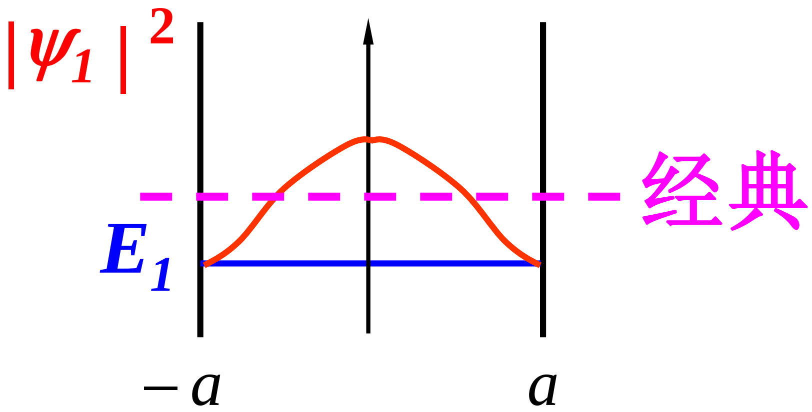
$$n=3,\ \lambda_3=\frac{4a}{3},\quad E_3=\frac{9\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

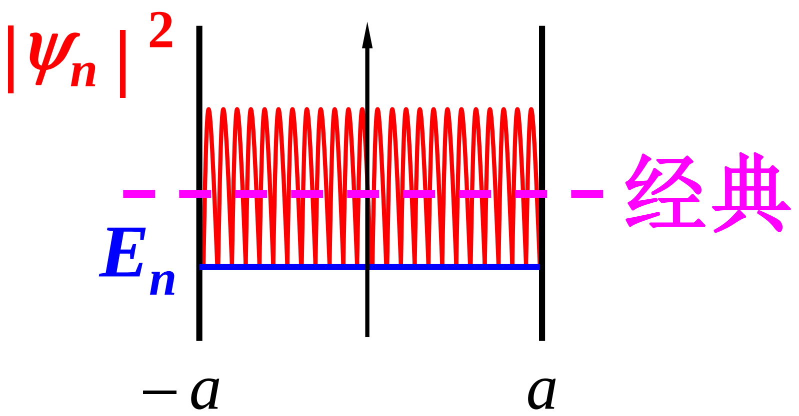
$$n=2,\ \lambda_2=2a,\quad E_2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$n=1,\ \lambda_1=4a,\quad E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

$n$ 小时，势阱内粒子概率分布集中于原点附近

$n$ 很大时，势阱内粒子概率分布趋于均匀



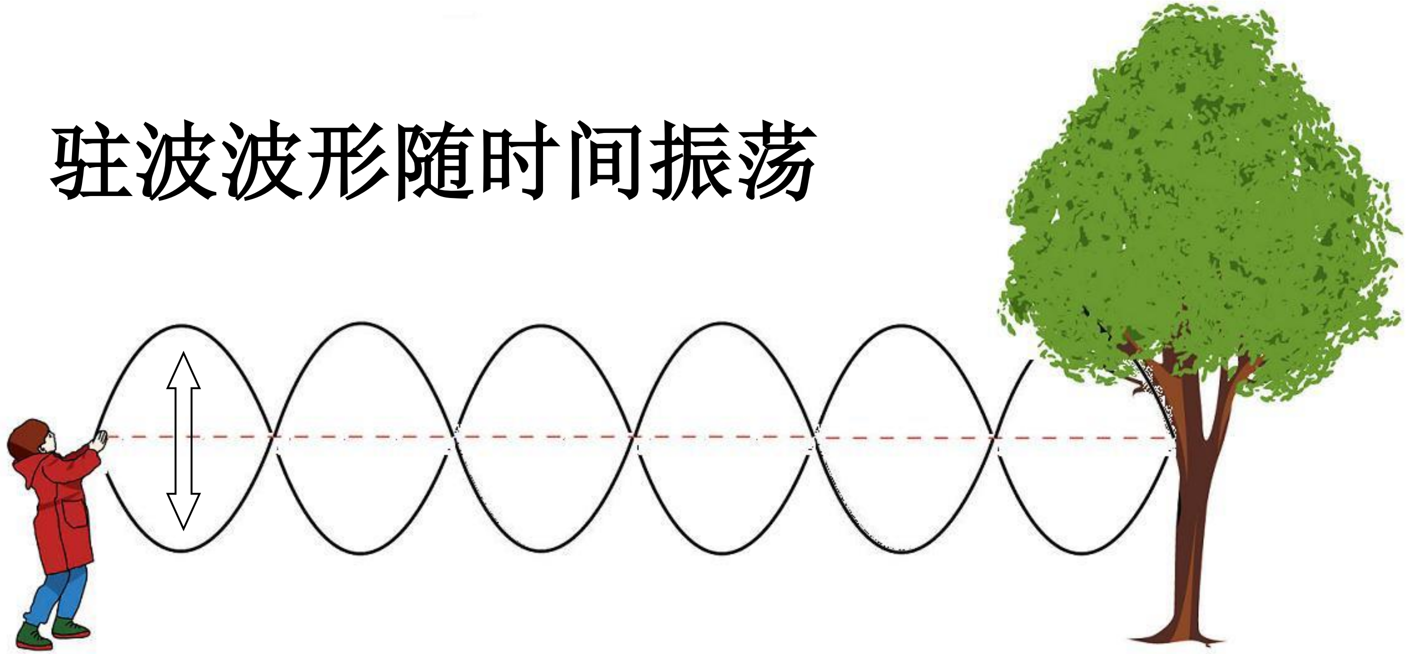




$n$ 小时，量子效应最强

量子 → 经典

玻尔对应原理

# 驻波波形随时间振荡



经典 ⇅ 量子

$$\Psi_n(x,t)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

振荡频率随能量增大而增加

## 由驻波的波长反推量子化的能量：

$$\lambda_n = \frac{4a}{n}$$

## ●波函数正交

$$\int \psi^*{}_m(x)\psi_n(x)dx = 0 \quad (\text{当}\, m \neq n\, \text{时})$$

波函数正交归一：

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = \delta_{mn},$$

**Kronecker delta**

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{if } m \neq n; \\ 1, & \text{if } m = n. \end{cases}$$

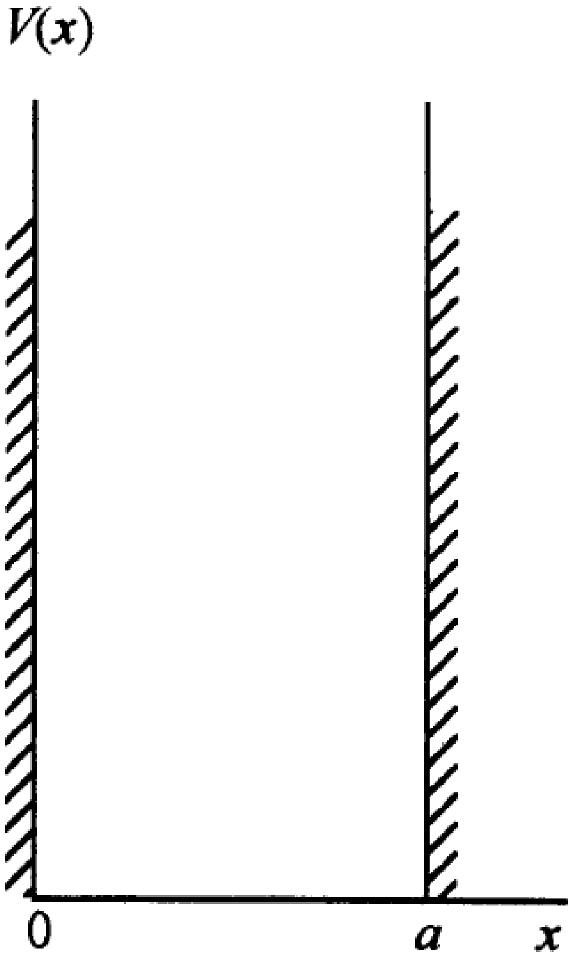
● 完备性

$$\Psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right]$$

**Fourier series**

$$c_m=\int_{-a}^{a}\psi_m(x)^{*}\,\Psi(x)\,dx$$

补充：

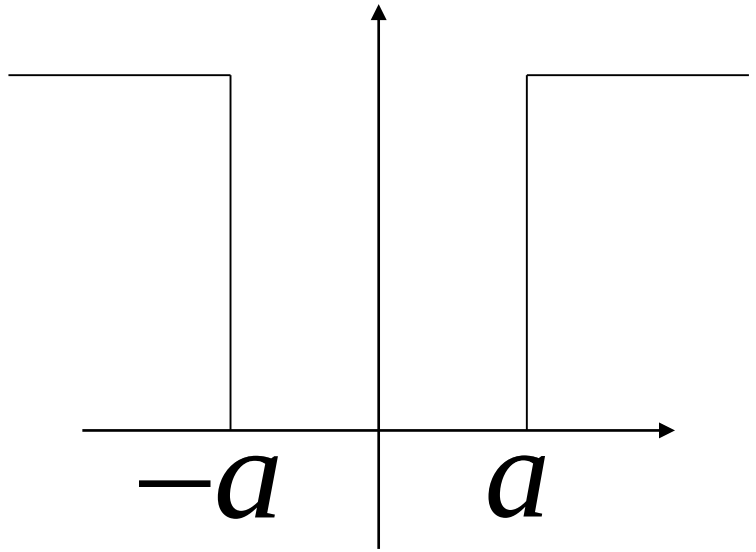



$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<a\\ \infty, & x<0,\quad x>a\end{cases}$$

求解更加简单（练习）

# 对称有限深方势阱

$$U(x)=\begin{cases}0, & -a<x<a\\ U_0(>0). & x<-a \text{ 或 } x>a\end{cases}$$




对于束缚态， $0<E<U_0$,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi(x)=0,\qquad (k=\sqrt{2\mu E}/\hbar,\ -a<x<a)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha^2\psi(x)=0.(\alpha=\sqrt{2\mu(U_0-E)}/\hbar,\ x<-a \text{ 或 } x>a)$$

**第二个方程的通解是：** $\psi(x)=C\mathrm{e}^{\alpha x}+D\mathrm{e}^{-\alpha x}.$

对$x < -a$, $x$可以$\to$ -∞,而此时$e^{-\alpha x} \to \infty$,应该舍弃.

同理对于$x > a$应该舍弃$e^{\alpha x}$.

$$\psi(x) = \begin{cases} C\,\mathrm{e}^{\alpha x}, & (x < -a) \\ A\cos kx + B\sin kx, & (-a < x < a) \\ D\,\mathrm{e}^{-\alpha x}. & (a < x) \end{cases}$$

（1）偶宇称解 $\psi(x) = \psi(-x)$

$$B = 0,\ C = D.$$

在$x = a$处$\psi$和$d\psi / dx$连续

$$\begin{cases} A\cos ka = D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \\ -kA\sin ka = -\alpha D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \end{cases}$$

$$k\tan ka = \alpha. \qquad \left( k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \alpha = \frac{\sqrt{2\mu(U_0 - E)}}{\hbar} \right)$$

(2) 奇宇称解 $\psi(x) = -\psi(-x)$

$$A = 0, C = -D.$$

$$\begin{cases} B\sin ka = D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \\ kB\cos ka = -\alpha D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \end{cases}$$

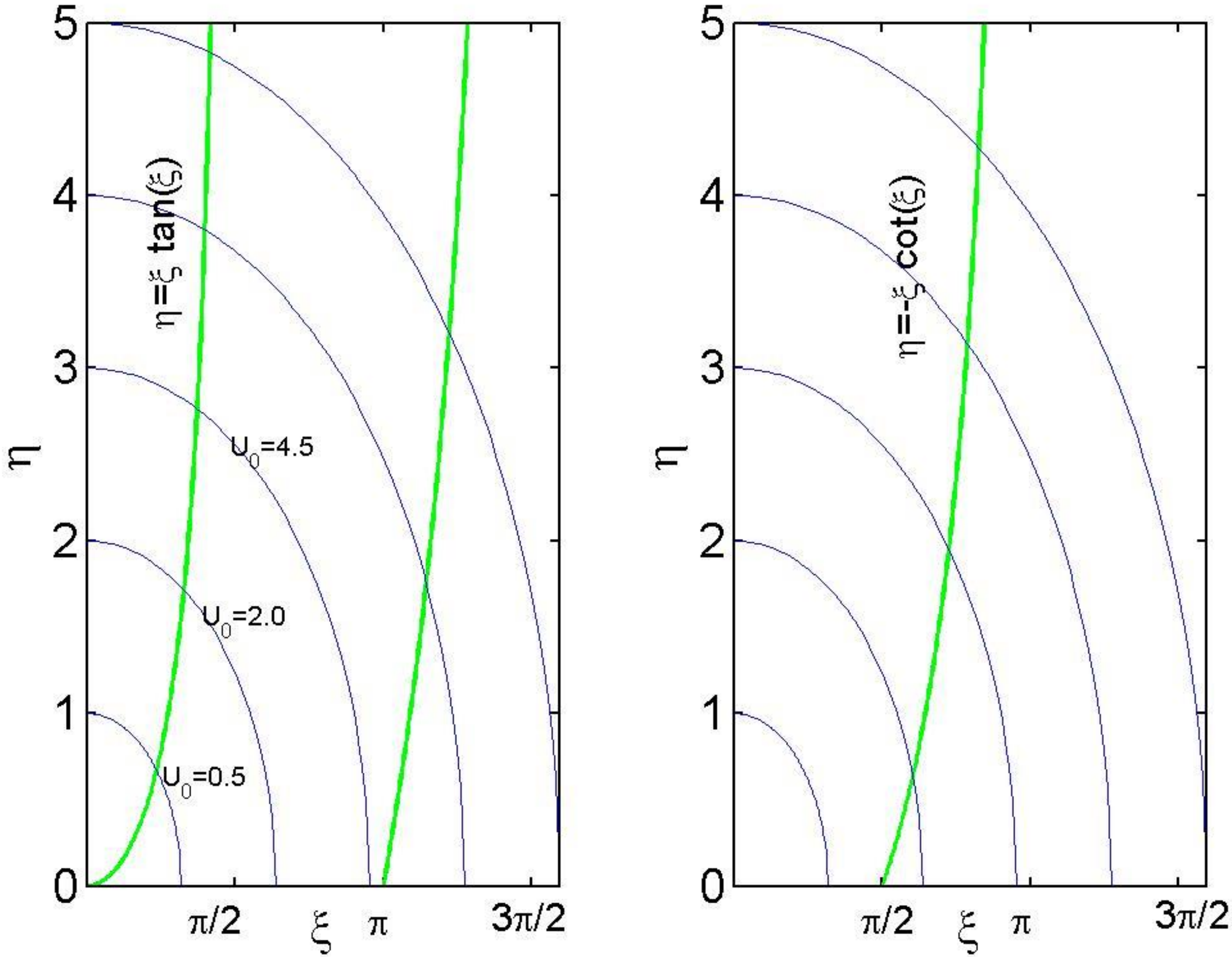
$$k\cot ka = -\alpha. \qquad \left( k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \alpha = \frac{\sqrt{2\mu(U_0 - E)}}{\hbar} \right)$$

采用图解法, 令

$$\xi = ka, \quad \eta = \alpha a. \qquad (\xi, \eta > 0),$$

则方程成为:

$$\begin{cases} \eta = \xi\tan\xi \text{ (even)} \quad \text{或} \quad \eta = -\xi\cot\xi \text{ (odd)}, \\ \xi^2 + \eta^2 = \dfrac{2\mu U_0 a^2}{\hbar^2}. \end{cases}$$




图解法

找出这两族曲线的交点，记交点的 $\xi$ 值为$\xi_1, \xi_{2,} \cdots$,则能级就是:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\xi_n^2.$$

**讨论:**

**(1**) 能级的宇称是偶奇相间，最低的能级是偶宇称

**(2)** $0 < \xi_1 < \frac{\pi}{2} < \xi_2 < \pi < \cdots$

所以每个能级都比无限深势阱的相应能级低一些

$U_0 \to \infty, \xi_n \to$ 无限深方势阱的能级

在 $|x| \geqslant a$ 处，由于 $e^{\pm \beta x}$ 的指数趋于±∞，所以波函数趋于0

**(3)** 不论势阱多浅或多窄，至少存在一个束缚态，并且宇称为偶

（4）对于偶宇称，当

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2\mu U_0 a^2}{\hbar^2}\geq\pi^2$$

才能出现第一个偶宇称的激发态

（5）对于奇宇称，只有当

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2\mu U_0 a^2}{\hbar^2}\geq\frac{\pi^2}{4}$$

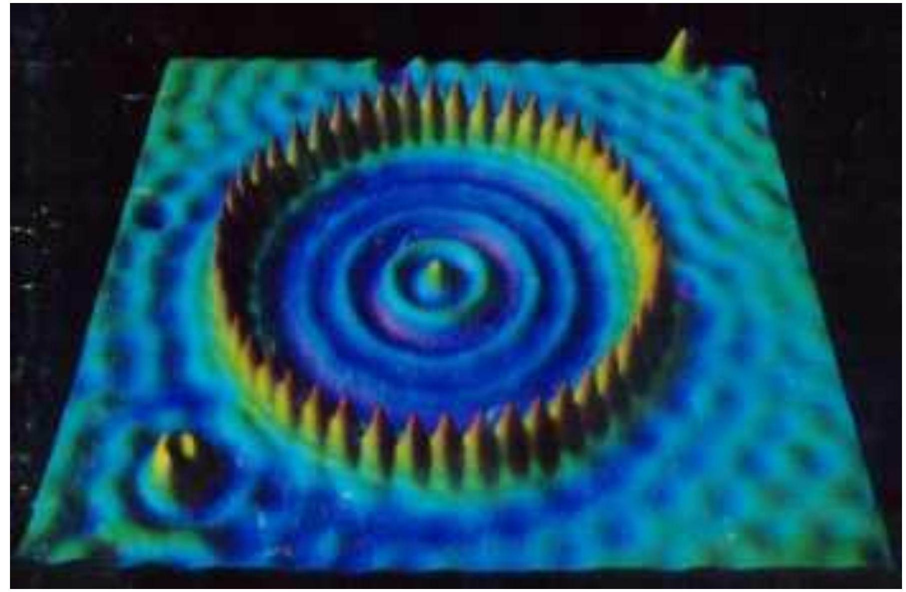
才能出现第一个奇宇称态

(6）在给定的势阱中，能级的个数是(练习)

$$\left[\sqrt{8\mu U_0 a^2/\hbar^2\pi^2}\right]$$

$[x]$代表$\geq x$而最接近$x$的正整数。

1993年美国科学家移动铁原子，铁原子距离0.9纳米



**“量子围栏”**

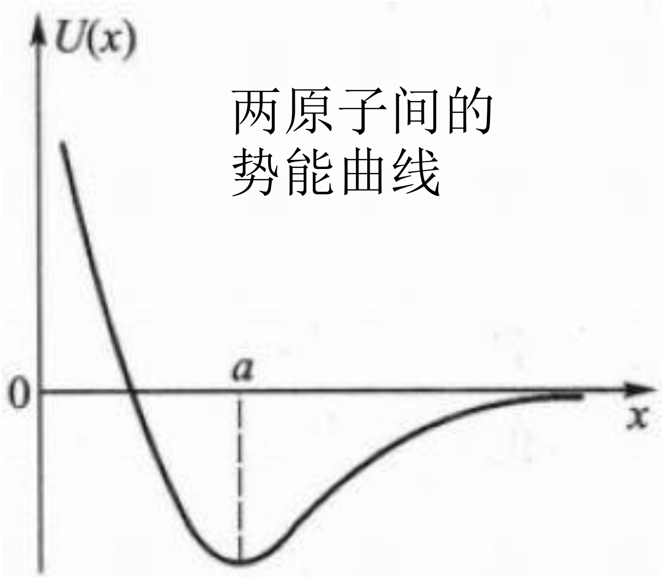
48个铁原子排列在铜表面 – 证明电子的波动性

# 线性谐振子

谐振子问题在量子力学中非常重要

辐射场问题可以看成是无穷多谐振子的集合（量子场论）；固体中的晶格振动；原子核的表面振动；等等

谐振子往往可以看成是各种复杂运动的初级近似



线性谐振子的势能函数是：

$$U(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2,\quad \omega:\text{谐振子的固有圆频率}$$

定态Schrödinger方程是：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{\mu^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi=0.$$

在方程中做如下的无量纲化变换：

$$\begin{cases}\xi=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}x\equiv\alpha x, & \left(\alpha=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}\right) \\ \lambda=\dfrac{2E}{\hbar\omega} & \end{cases}$$

检查量纲

得：
$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi(\xi)=0.$$

束缚态的解的要求：

$$\psi\left(x\right)\xrightarrow{|x|\to\infty}0$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi(\xi)=0.$$

$\xi\to\pm\infty$ 方程近似为： $$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}\approx\xi^2\psi$$

它有近似解： $\psi(\xi)\sim \mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$

$\boxed{\mathrm{e}^{+\xi^2/2}\text{ 应舍去}}$

再进行变换： $\psi(\xi)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}H(\xi)$

得**Hermite方程：** $$\frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}+(\lambda-1)H=0$$

# Hermitian多项式

可以用级数解法求$H(\xi)$，即令

$$H(\xi)=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\xi^k$$

代入方程中得

$$\sum_{k=2}^{\infty}k(k-1)c_k\xi^{k-2}-\sum_{k=0}^{\infty}(2k+1-\lambda)c_k\xi^k=0$$

系数$\{c_k\}$必须满足递推公式

$$c_{k+2}=\frac{2k+1-\lambda}{(k+1)(k+2)}c_k,\quad (k=0,1,2,3,\cdots)$$

可以证明：如果 $H(\xi)$ 是真无穷级数，

也就是 $k \to \infty$ 时 $c_k \neq 0$，

那么在 $x \to \pm\infty$ 的时候 $H(\xi)$ 就 $\to \mathrm{e}^{\xi^2}$ ，

仍然使 $\psi(\xi)$ 发散

能够避免这种情形出现的唯一出路是级数“中止”或“退化”为多项式，而这就要求

$\lambda$ 只能取一些特殊的值

设要求$H(\xi)$是$\xi$的$n$次多项式，则必须让

那么$c_n \neq 0$而$c_{n+2}$要$=0$，而且只能出现奇数或偶数幂

所以 $$\lambda = 2n+1, \quad n = 0,1,2,3,\cdots$$

首先得到了能量本征值：

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,3,\cdots$$

其次，$H(\xi)$的方程化为： $$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0.$$

而不难验证下面的函数正满足以上的方程：

$$H_n(\xi) = (-1)^n \mathrm{e}^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \mathrm{e}^{-\xi^2}.$$

**注:**严格的数学推导请见曾谨言书附录或数理方法

它称为$n$次Hermitian多项式。头三个Hermitian多项式是：

$$H_0(\xi) = 1,$$
$$H_1(\xi) = 2\xi,$$
$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2.$$

## 线性谐振子的能级和波函数

能级是： $$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

对应的波函数是：

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}. \quad \left(\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)$$

$N_n$ 是归一化常数， $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 \, dx = 1$

利用Hermitian多项式的正交性质：

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) \exp\left(-\xi^2\right) d\xi = \sqrt{\pi}\, 2^n n! \delta_{mn}$$

则归一化常数为： $N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\, 2^n n!}}.$

最低几个能级的波函数为：

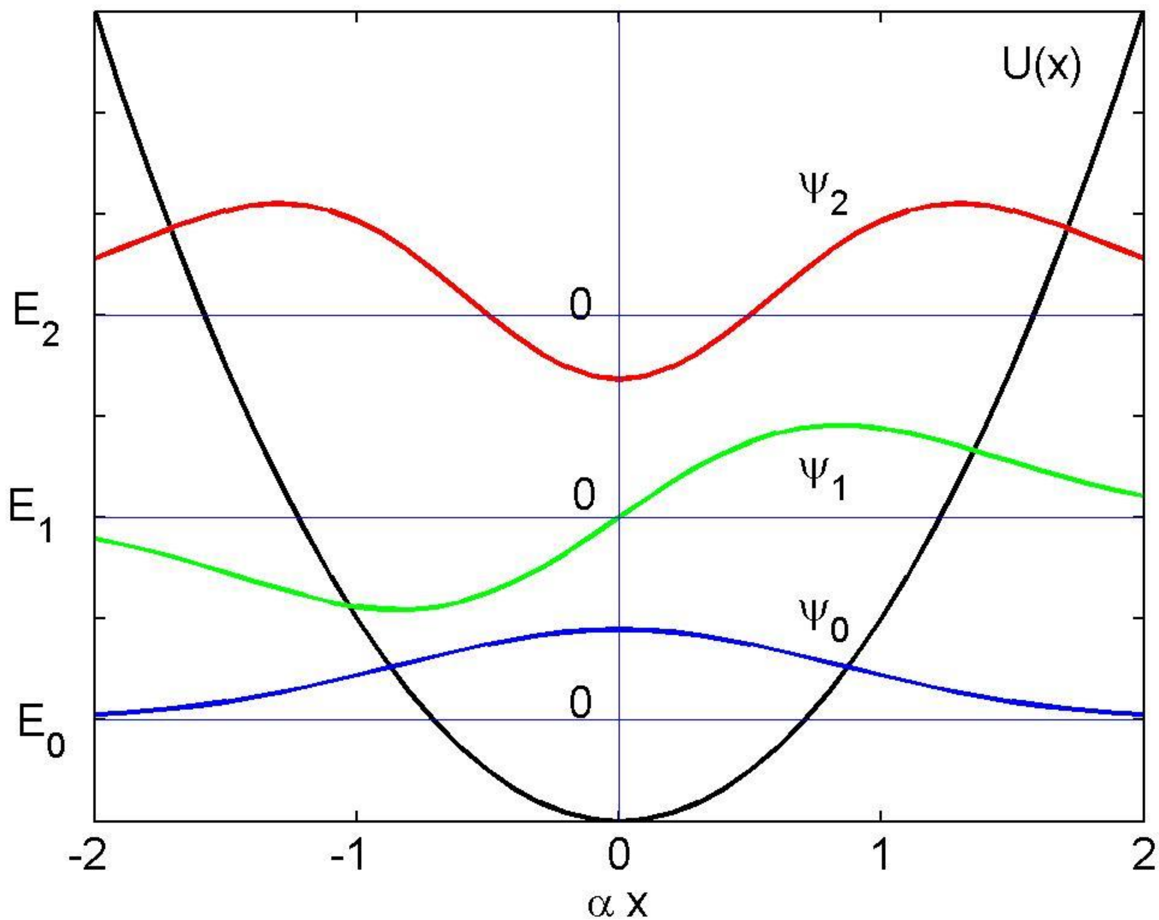
$$\psi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)$$

$$\psi_1(x)=\frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha x\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)$$

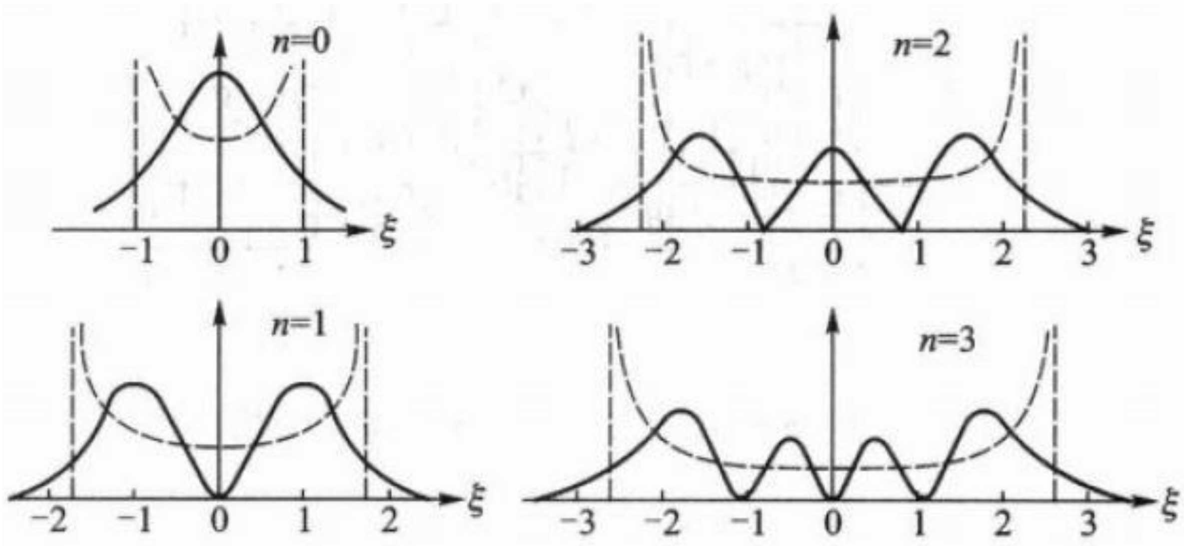
$$\psi_2(x)=\frac{\sqrt{\alpha/2}}{\pi^{1/4}}\left(2\alpha^2x^2-1\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)$$

n的奇偶性决定了谐振子波函数的奇偶性，即宇称的奇偶

$$\psi_n(-x)=(-1)^n\psi_n(x)$$




粒子具有一定的概率处在经典允许区之外




实线(虚线)表示谐振子在量子(经典)情况下的概率密度分布.经典情况:

$$\xi = a\sin(\omega t+\delta)$$

$$v=\dot{\xi}=a\omega\cos(\omega t+\delta)=a\omega\left(1-\frac{\xi^2}{a^2}\right)^{1/2}$$

$$w(\xi)\propto\frac{1}{v}\propto\left(1-\frac{\xi^2}{a^2}\right)^{-1/2}$$

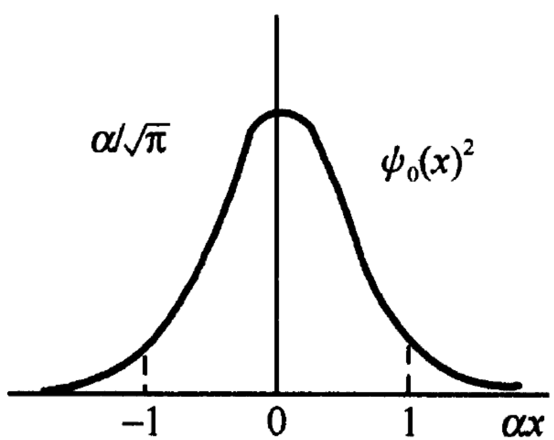
对于基态能量，按照经典力学，粒子将被限制在

$$|\alpha x| \leq 1$$

的范围内　　在$|\alpha x|=1$处，势能为 $U=\frac{1}{2}\hbar\omega$

则此时粒子的动能为0。

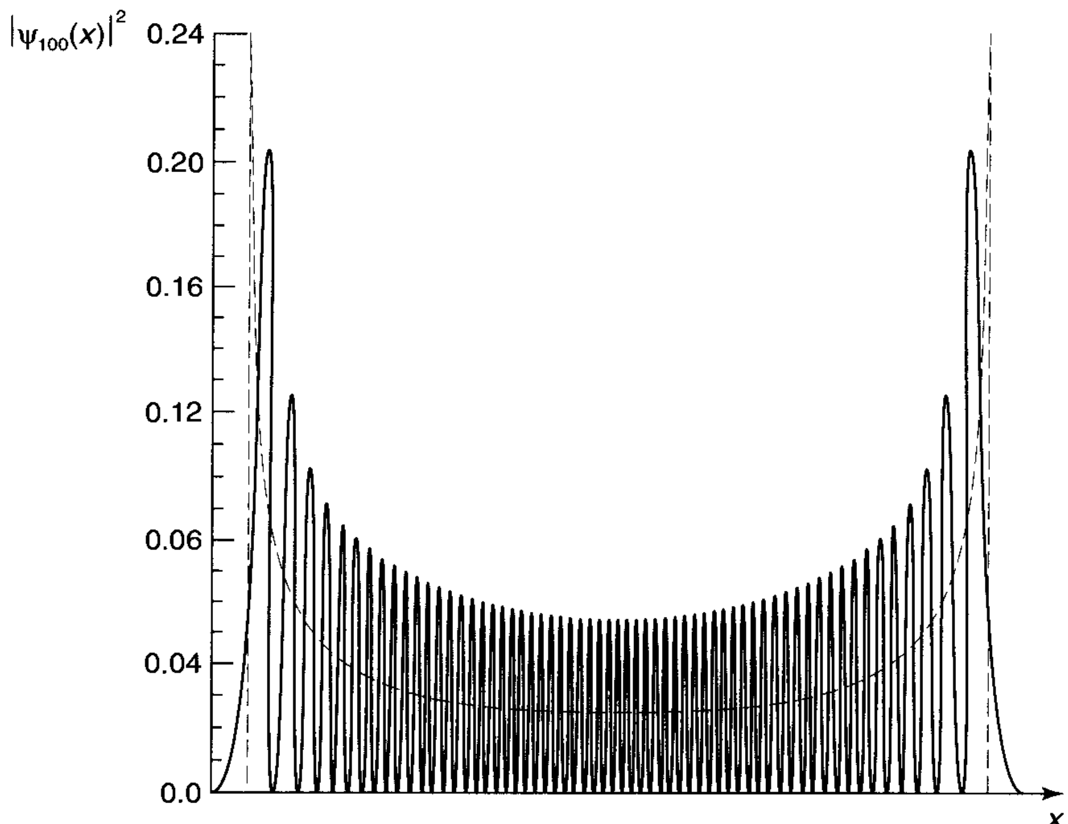
但是按照量子力学的计算，粒子则有一定的概率出现在经典允许区之外。对于基态，这一概率为：




$$\frac{\int_1^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi}{\int_0^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi} = 16\%$$

这是一种量子效应，在基态表现得最为明显。随着能量的增加（即n的增加），谐振子的位置概率分布将逐渐趋于经典谐振子的概率分布

对应原理（Bohr）：**在大量子数极限下，量子理论趋近于经典理论**




**n=100**

讨论：

(1)n较大时能谱连续： $$\frac{\Delta E_n}{E_n} \equiv \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{1}{n+1/2} \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$$

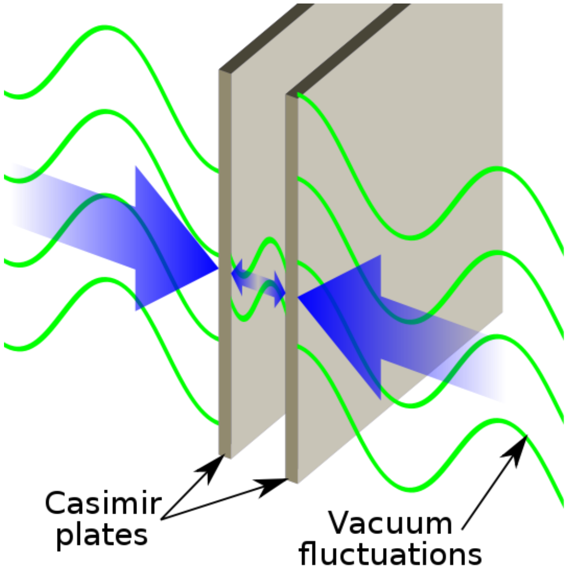
(2)n较小时，量子效应明显。比如在n=0时，量子力学告诉我们粒子在ξ=0处出现几率最大，但在经典力学中，粒子在此处速度极大，出现几率最小

(3)n较大时，出现几率趋于经典分布。练习：证明对应于量子态n的经典运动振幅为

练习:证明对应于量子态n的经典运动振幅为 $a = \sqrt{2n+1}$

(4)在ξ>a的经典力学粒子不能达到的区域，量子世界中仍有分布 – 不确定性原理，隧道效应

(5)同势阱问题一样，振子基态能量(零点能)不为0（$E_0=\hbar\omega/2$）。零点能的实验解释：Casimir效应




(6) 由于谐振子势有空间反射不变性，所以有确定的宇称。能级的宇称偶奇相间，基态是偶宇称

(7) $\Psi_n(x)$ 有n个节点

# 一维散射问题

为简单可以假设

$$U(+\infty)=U(-\infty)=0, \qquad E>0.$$

所以这时的量子状态是非束缚态，也就是散射态

在$x\to\pm\infty$时$U=0$,

$$\psi''+k^2\psi=0, \quad \left(k=\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}\right)$$

$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$和$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$的线性组合.

$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 是正向行波，$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$是反向行波

实际情况是：粒子从一边入射，被势场散射而分成了反射和透射两个部分。这给方程提出了一定的定解条件

下面以左方入射为例，边界条件是：

$$x \to -\infty,\ \psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \quad \text{(入射加反射)}$$

$$x \to +\infty,\ \psi(x) = C\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}. \quad \text{(只有透射)}$$

在 $\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 时，粒子的几率流密度是：

$$J = \frac{i\hbar}{2\mu}\left(\psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx}\right)$$

$$= |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} = |A|^2 v,$$

$v = \hbar k / \mu = p / \mu$ 是粒子的经典速度。在上面的边界条件下，

入射几率流密度是 $J_I = |A|^2 v,$

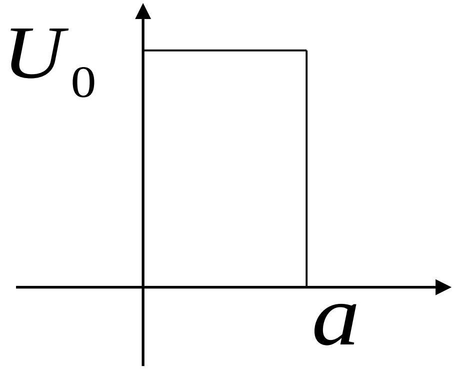
反射几率流密度是 $J_R = |B|^2 v,$

透射几率流密度是 $J_D = |C|^2 v,$

由此定义： **反射系数** $$R = \frac{J_R}{J_I} = \frac{|B|^2}{|A|^2},$$

**透射系数** $$D = \frac{J_D}{J_I} = \frac{|C|^2}{|A|^2}.$$

## 方势垒的穿透




方势垒是：

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

定态薛定谔方程可写为（先考虑E>$U_0$）

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}E\psi=0, \quad (x<0, x>a) \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi=0, \quad (0<x<a) \end{cases}$$

参考一维势阱问题的解,本问题的解就容易得到:

$$\psi_1 = Ae^{ik_1x}+A'e^{-ik_1x}$$

$$\psi_2 = Be^{ik_2x}+B'e^{-ik_2x}$$

$$\psi_3 = Ce^{ik_1x}+\cancel{C'e^{-ik_1x}}$$

其中用到了简写(**先假设E>$U_0$**):

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

表达式中第一项(第二项)代表从左向右(从右向左)传播的平面波.在x>a的区域只有向右的透射波,所以C’=0.

利用波函数及其导数在边界处的连续性,得出波函数中各系数的关系式:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0)\ \Rightarrow\ A+A'=B+B'$$

$$\psi_1'(0)=\psi_2'(0)\ \Rightarrow\ k_1A-k_1A'=k_2B-k_2B'$$

$$\psi_2(a)=\psi_3(a)\ \Rightarrow\ Be^{ik_2a}+B'e^{-ik_2a}=Ce^{ik_1a}$$

$$\psi_2'(a)=\psi_3'(a)\ \Rightarrow\ k_2Be^{ik_2a}-k_2B'e^{-ik_2a}=k_1Ce^{ik_1a}$$

解这一组方程,把A’,C表达为A的函数:

$$A'=\frac{2i(k_1^2-k_2^2)\sin k_2a}{(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}-(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}}A$$

$$C=\frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}}A$$

计算入射波(A项),反射波(A’项)和透射波(C项)的概率流密度得:

$$J_{in}=\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2,\quad J_R=-\frac{\hbar k_1}{m}|A'|^2,\quad J_D=\frac{\hbar k_1}{m}|C|^2$$

接着可以得到粒子的反射系数和透射系数:

$$R\equiv\left|\frac{J_R}{J_{in}}\right|=\left|\frac{A'}{A}\right|^2=\frac{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2 k_2a}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2 k_2a+4k_1^2k_2^2}$$

$$D\equiv\left|\frac{J_D}{J_{in}}\right|=\left|\frac{C}{A}\right|^2=\frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2 k_2a+4k_1^2k_2^2}$$

很容易看出R+D=1,这是粒子流守恒的必然结果

以上讨论的是E>$U_0$的情形,没有什么与经典力学不同的结果.下面讨论E<$U_0$的情形,在经典情况下,根据能量守恒,粒子没有足够的动能穿过势垒,量子情况下如何?

E<$U_0$情形下,$k_2$是虚数,令 $k_2 = ik_3$ ,则

$$D = \frac{4k_1^2 k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2)^2 \sinh^2 k_3 a + 4k_1^2 k_3^2} > 0$$

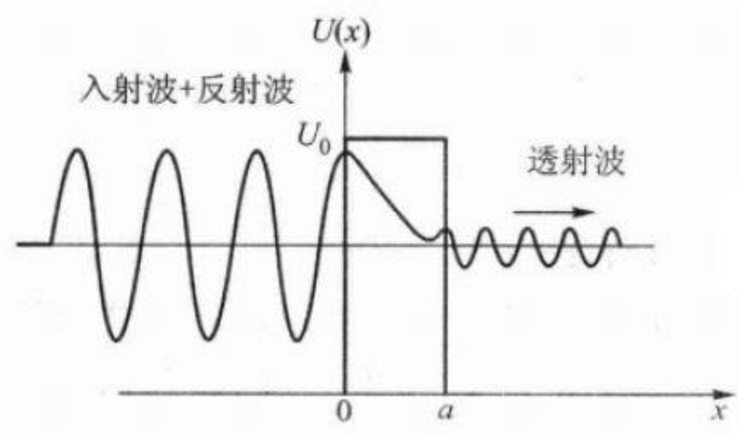
双曲正弦函数:

$$\sinh x \equiv \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

当$U_0$很大时时，$k_3a$>>1，透射系数可近似为:

$$D = D_0(k_1, k_3)e^{-2k_3 a}$$

$$= D_0(k_1, k_3)e^{-\frac{2}{\hbar}a\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$




E<$U_0$时D>0 → 量子隧道效应

以电子的隧道效应为例,计算透射系数数量级。从$m_e$=0.511 MeV/$c^2$, ħc=1973 eV·Å, $U_0$-E=5 eV, 对应不同势垒宽度的透射系数的数量级为：

| a(Å) | 1.0 | 2.0 | 5.0 | 10.0 |
|---|---|---|---|---|
| D | 0.101 | $1.02\text{x}10^{-2}$ | $1.06\text{x}10^{-5}$ | $1.12\text{x}10^{-10}$ |

理解量子隧道效应 – 在势垒内部,根据总能量守恒,粒子的动能将变为负数:

$$E_{kin} = E - U_0 < 0$$

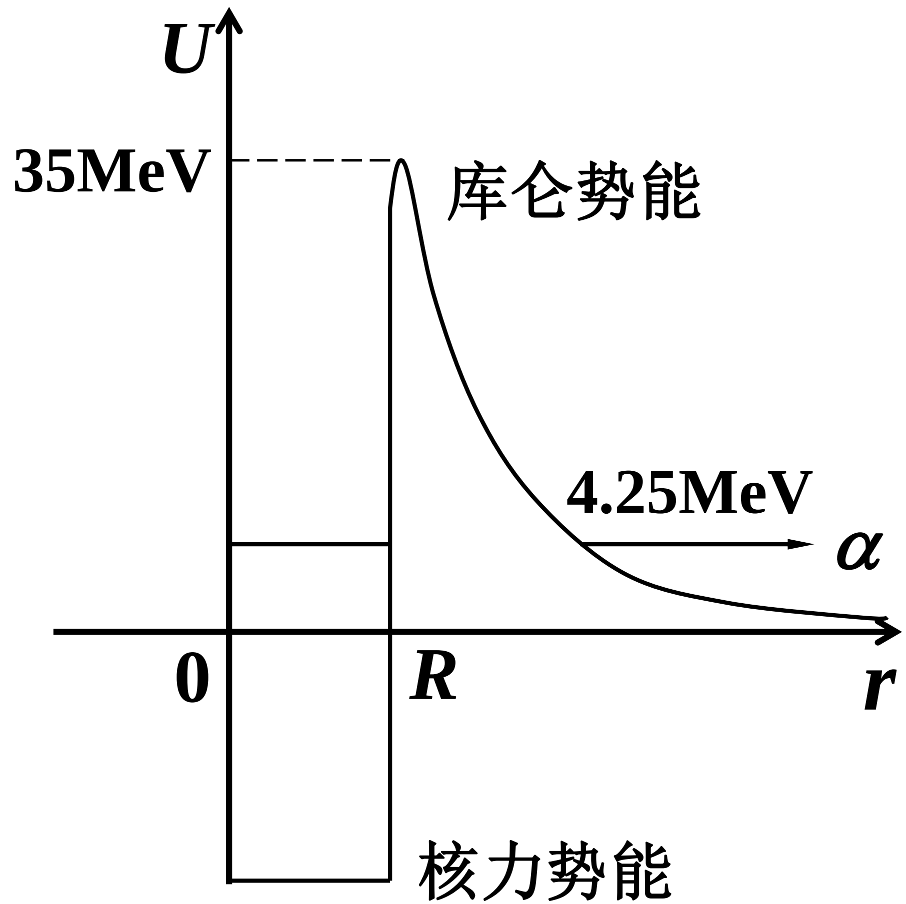
这在经典力学中是不可能的。在量子力学里，粒子动能与势能不能同时具有确定值。而且，力学量的平绝值是一个全域的积分平均，在某个局域内讨论是没有意义的。一旦讨论限制在某一局域(势垒内部)，粒子动量就在某一范围内不确定.

重原子核α衰变中的隧道效应：

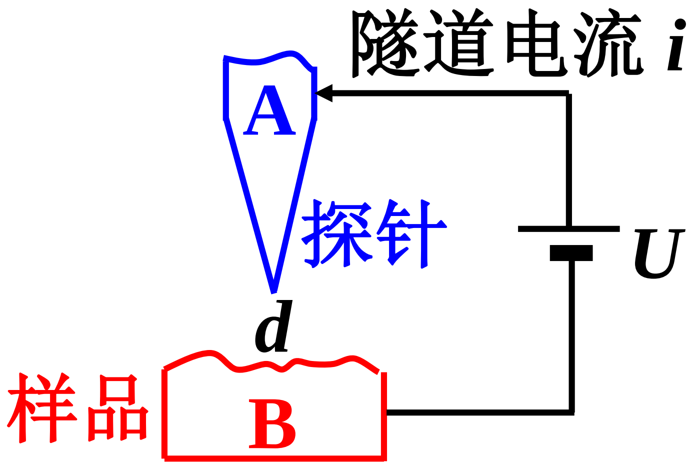
$$^{238}\mathrm{U} \rightarrow {}^{234}\mathrm{Th} + {}^{4}\mathrm{He}$$

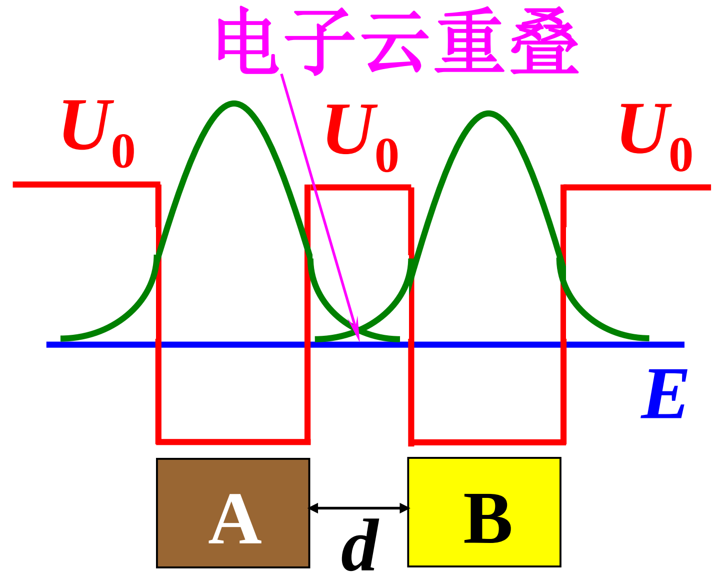
$$E_\alpha = 4.25\,\mathrm{MeV}$$

α粒子与剩余核子之间既有库仑力(排斥力)，又有核力(吸引力)。库伦力是长程力，核力是短程力。



## 扫描隧道显微镜(STM):



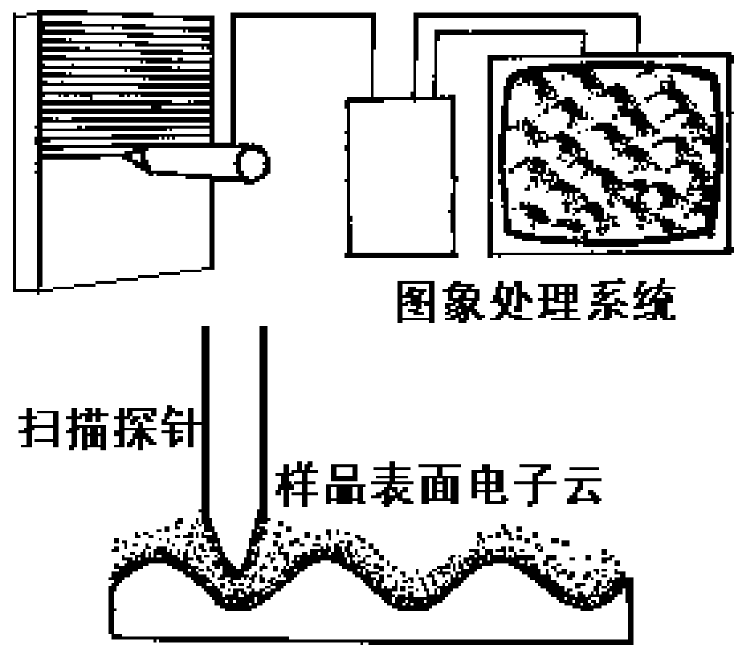




$$i \propto U e^{-A\sqrt{\phi}\, d}$$

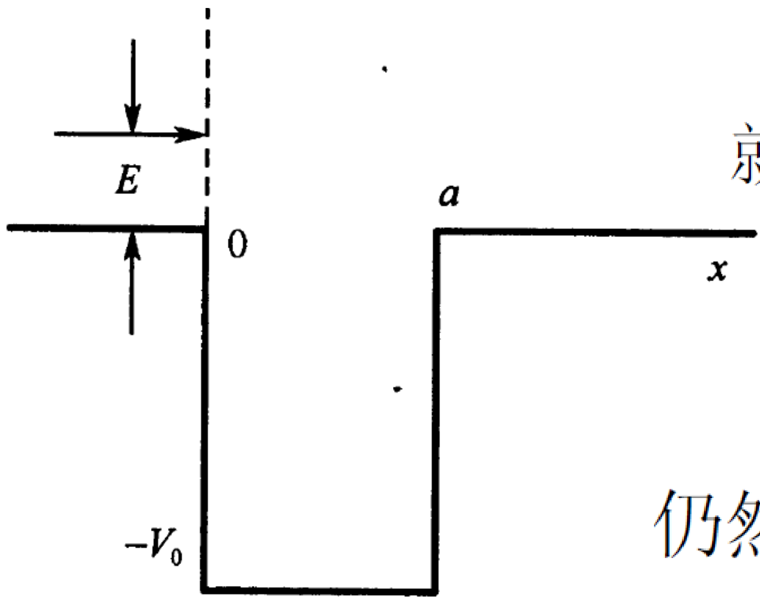
$A$ — 常量

$\phi$ — 样品表面平均势垒高度（~ eV）

$d$ ~ 1nm（ 10Å ）



# 方势阱的共振隧穿




如果把方势垒改成方势阱，

就要把前面的$V_0$变为$-V_0$ $(V_0>0)$

整个实轴都是经典允许区

不存在势垒的隧穿，

仍然发现了波动的特征，即共振现象

对于势阱情况下的透射系数，**(练习)**

$$T=\frac{4k^2k'^2}{(k^2-k'^2)^2\sin^2 k'a+4k^2k'^2},\qquad k'=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$$

当 $k'a = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$

有 $\sin k'a = 0, \qquad T = 1$

共振透射，共振能量的位置：

$$E = -V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

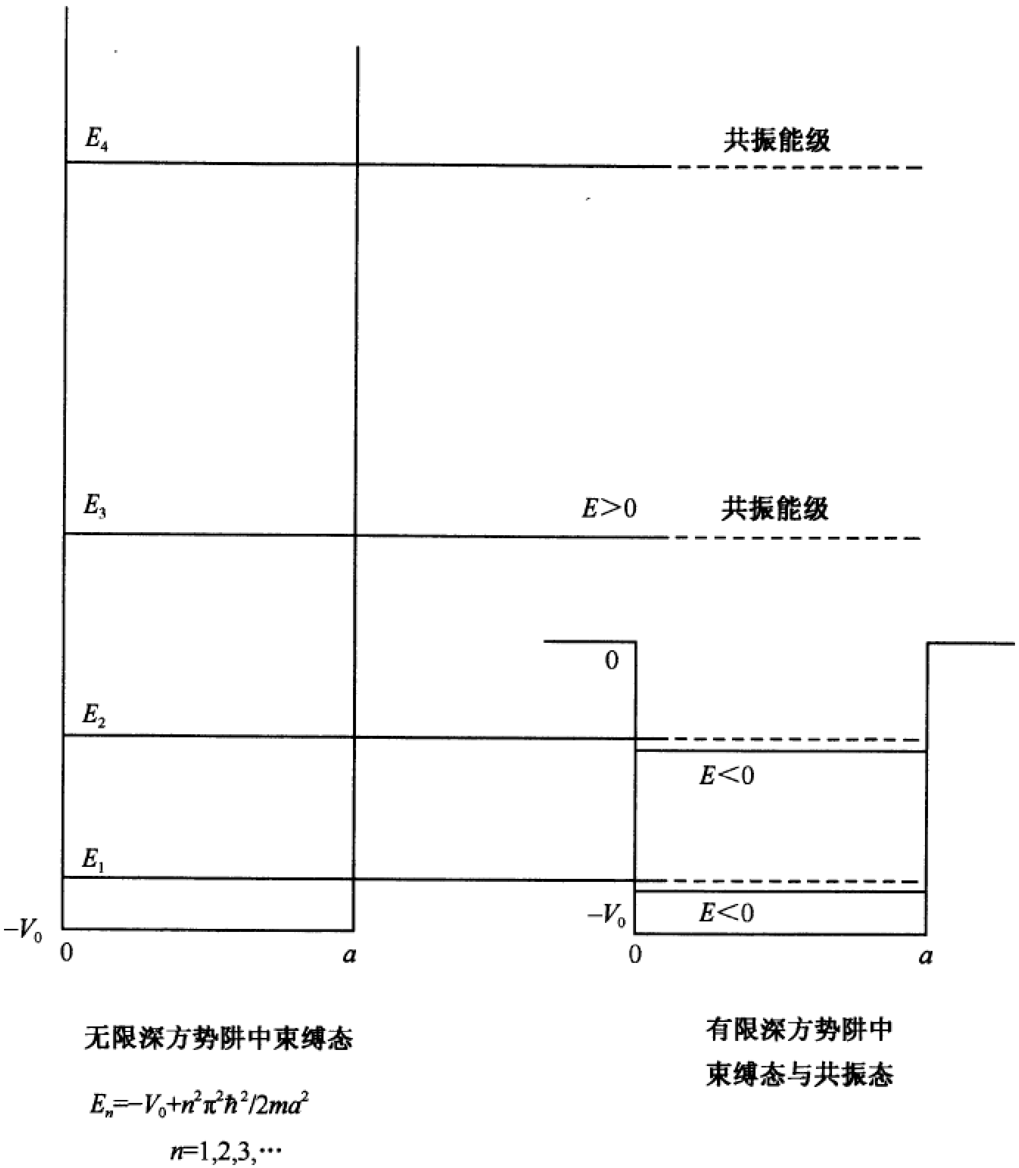
以 $-V_0$ 为势能起点宽度为 $a$ 的无限深势阱中的能级表达式

在这里透射系数出现极大值和
在无限深势阱中形成束缚态的物理原因是相同的

在势阱的两个壁上的反射回波在阱内产生了共振

此时势阱的宽度正好是半波长的整数倍

$$k' = 2\pi / \lambda' \qquad n\lambda' = 2a$$




能量较大时
的共振能级

能量较小时
的束缚态

当入射粒子的能量恰好与势阱内的“虚”能级相重合时，就会发生共振透射

# 三维散射问题初探

关于三维散射问题。在三维情形下，如果

$$U(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} 0, \quad E > 0,$$

那么粒子就处在非束缚态。仍然可以假设粒子从某个方向以平面波的形式入射（有确定的动量），但是现在散射粒子可能向任何方向出射

问题就是找到粒子向不同的方向散射的几率各有多大，这个几率分布称为散射的角分布。这里需要采用的技术要比一维情形复杂