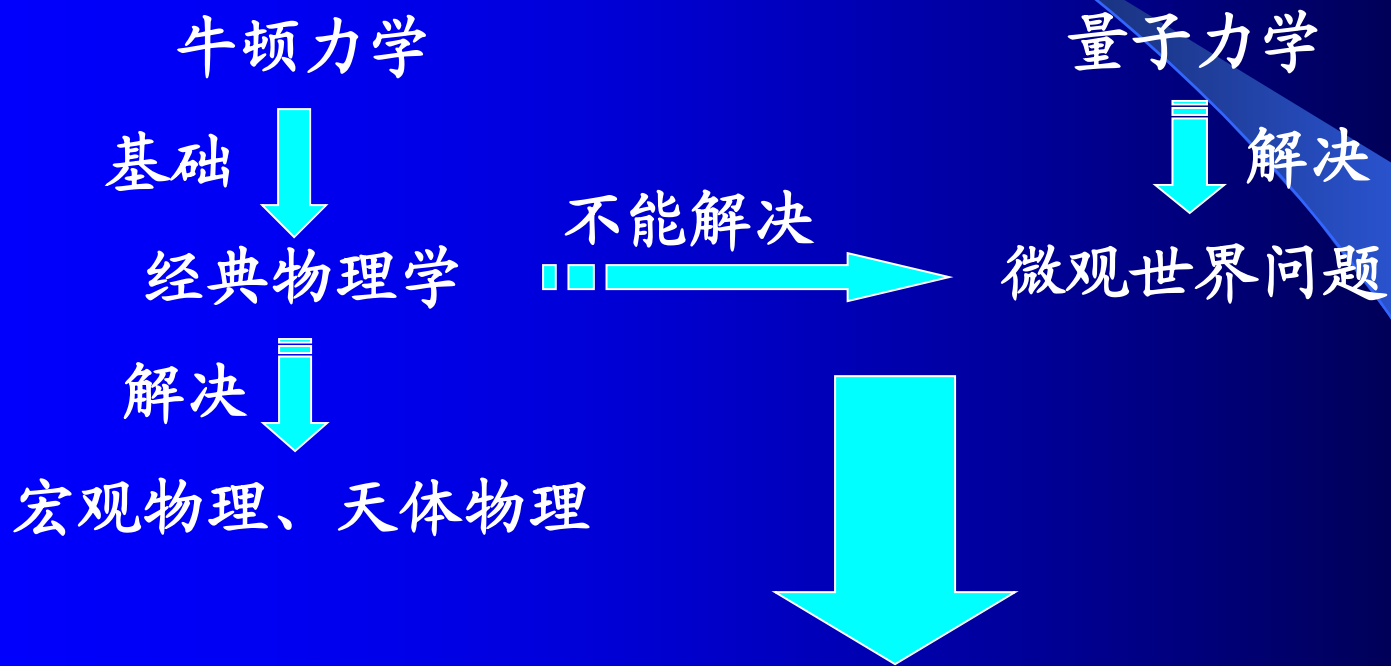


# 第二章 量子力学导论

## Introduction to Quantum Mechanics



# 如何学习量子力学

“……我想我可以相当有把握的说没有人理解量子力学”

——费曼

“夏虫不可语于冰，笃于时也；井蛙不可语于海，拘于虚也；曲士不可语于道，束于教也。”

——庄子



# 量子力学的发展简介

早期量子论



量子力学



相对论量子力学

普朗克能量量子化假说  
爱因斯坦光子假说  
康普顿效应  
玻尔的氢原子理论

德布罗意实物粒子波粒二象性  
薛定谔方程  
波恩的物质波统计解释  
海森伯的测不准关系

狄拉克把量子力学与狭义  
相对论相结合

## 2.1 量子力学原理 principles of quantum mechanics

### 2.1.1 能量子 energy quanta

问题:

黑体辐射 (普朗克, 1900年)



传统的经典物理学

与传统的经典物理学矛盾的结论:

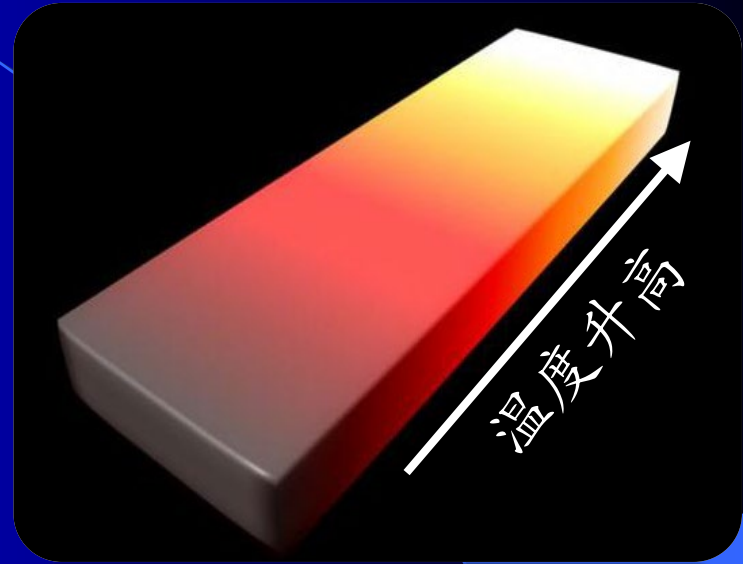
辐射能量以一份一份的形式 ( $h\nu$ ) 发射



普朗克常数  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

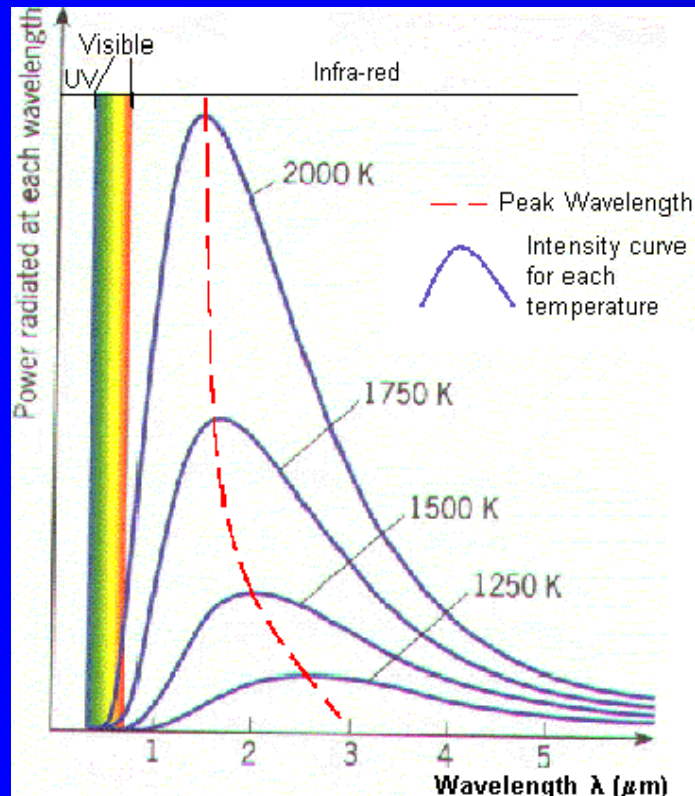
# 物体的热辐射

- 分子（含带电粒子）的热运动使物体辐射电磁波，这种与温度有关的辐射称为**热辐射**；
- 热辐射电磁波的**能量大小与频率分布**与温度有关；
- 物体在辐射电磁波的同时也吸收和反射电磁波。当辐射的能量等于吸收的能量时，热辐射过程达到热平衡，称为**平衡热辐射**，此时物体具有固定的温度。

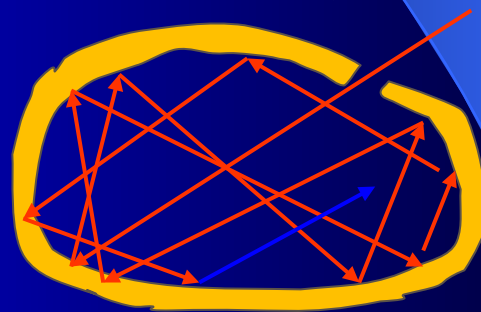


具体的热辐射与物体种类以及表面情况有关，十分复杂，研究热辐射的规律需要“理想的模型”。

# 黑体辐射问题



- **黑体**：能吸收射到其上的全部辐射的物体，这种物体就称为绝对黑体，简称黑体。
- 绝对黑体自然界不存在。在不透明材料构成的封闭空腔表面开小孔，该小孔能吸收各种频率的电磁波，可视为黑体表面。小孔发出的辐射就称为**黑体辐射**。
- 黑体的辐出度仅与波长和温度有关，与空腔形状、材料以及表面情况无关，反映了辐射本身的规律，因此是了解一般物体热辐射性质的基础。



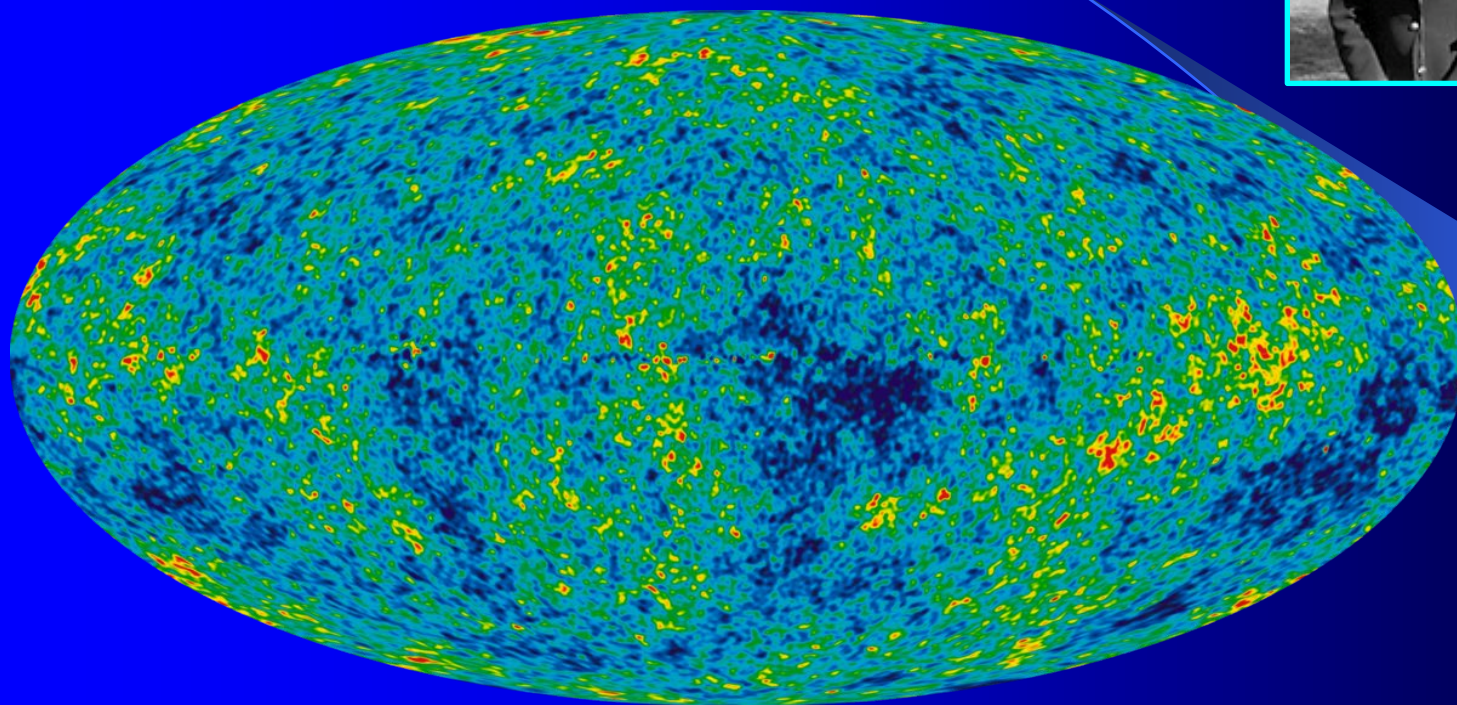
实验定律：

- 1) **斯特藩-玻尔兹曼定律**：总辐出度与温度的四次方成正比： $M(T)=\sigma T^4$
- 2) **维恩位移定律**：黑体辐射光谱的峰值频率与黑体温度成正比： $\nu=CT$

1911 诺贝尔物理学奖



# 宇宙微波背景辐射



宇宙微波背景辐射的最重要特征是具有黑体辐射谱，在0.3–75厘米波段，可以在地面上直接测到；宇宙微波背景的温度为 $2.72548 \pm 0.00057\text{K}$ 。辐射的峰值为60.2 GHz。宇宙微波背景辐射是大爆炸的产物。

# 经典物理学的解释

从理论上推导符合实验结果的黑体辐射表达式是当时物理学界的关注焦点：

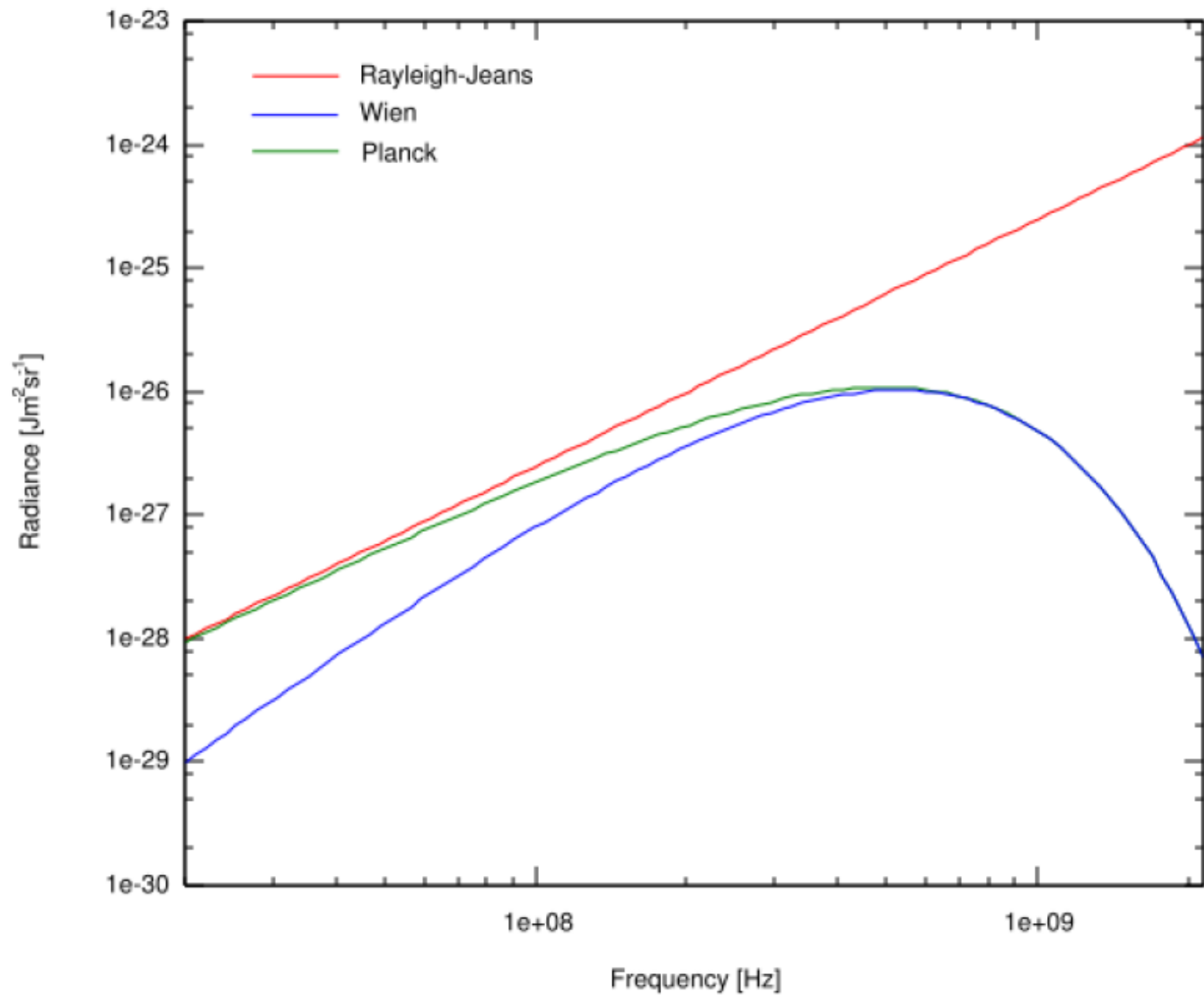
- Wien根据经典热力学得出半经验Wien公式。短波范围（高频）与实验吻合，长波（低频）则偏差较大。

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} e^{-h\nu / kT}$$

- Rayleigh和Jeans根据能量均分定理和电磁理论得出Rayleigh-Jeans公式。长波（低频）吻合，短波（高频）则偏差较大。短波极限时辐出度为无限大——“紫外灾难”。

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} kT$$





# Planck公式



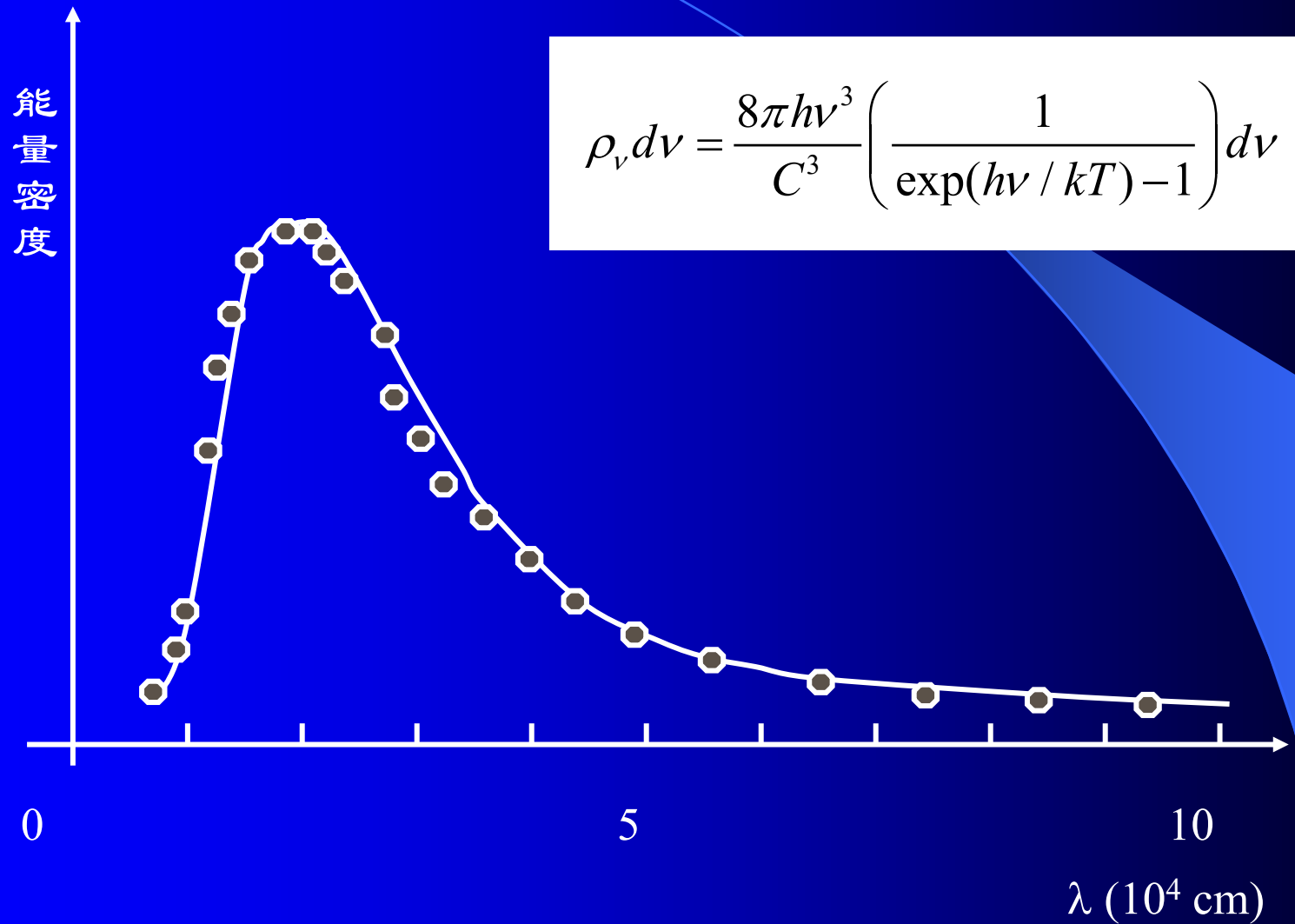
- 1900年Planck利用内插法将适用于短波的Wien公式和适用于长波的Rayleigh-Jeans公式衔接起来，于1900.12.14提出了新的公式：

$$I(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{C^2} \left( \frac{1}{\exp(h\nu / kT) - 1} \right) \quad I(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \left( \frac{1}{\exp(hc / \lambda kT) - 1} \right)$$

- 为了解释这一公式，Planck引入了“**能量子**”的概念来计算平均能量。假设黑体辐射空腔中“**谐振子**”的振动能量并不象经典理论所主张的那样和振幅平方成正比并呈连续变化，而是和振子的频率成正比并且只能是某一个最小能量 $\epsilon_0 = h\nu$ 的整数倍。再采用玻尔兹曼热力学统计方法推出黑体辐射的数学公式。
- 振子只能一份一份地按不连续方式辐射和吸收能量，每份能量都称为**能量子**。

**Planck公式标志着量子力学的诞生。**

# Planck公式

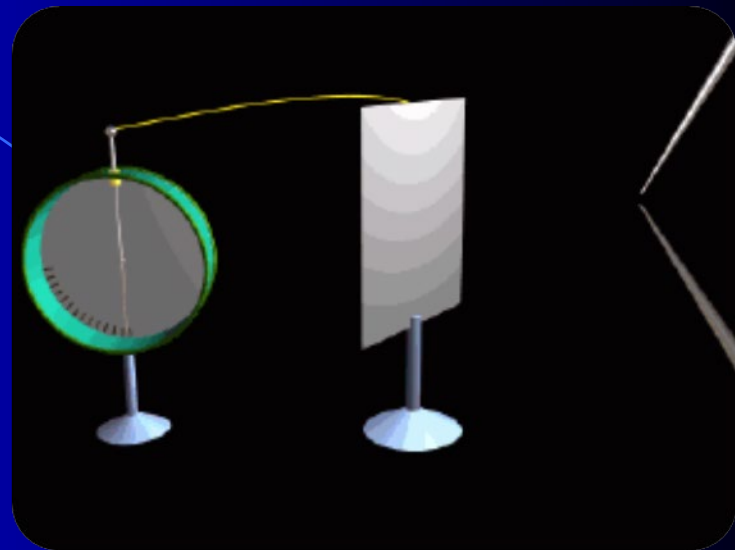


# 普朗克科学定律

“一个新的科学真理取得胜利并不是通过让它的反对者们信服并看到真理的光明，而是通过这些反对者们最终死去，熟悉它的新一代成长起来。”

# 光的粒子性：光电效应

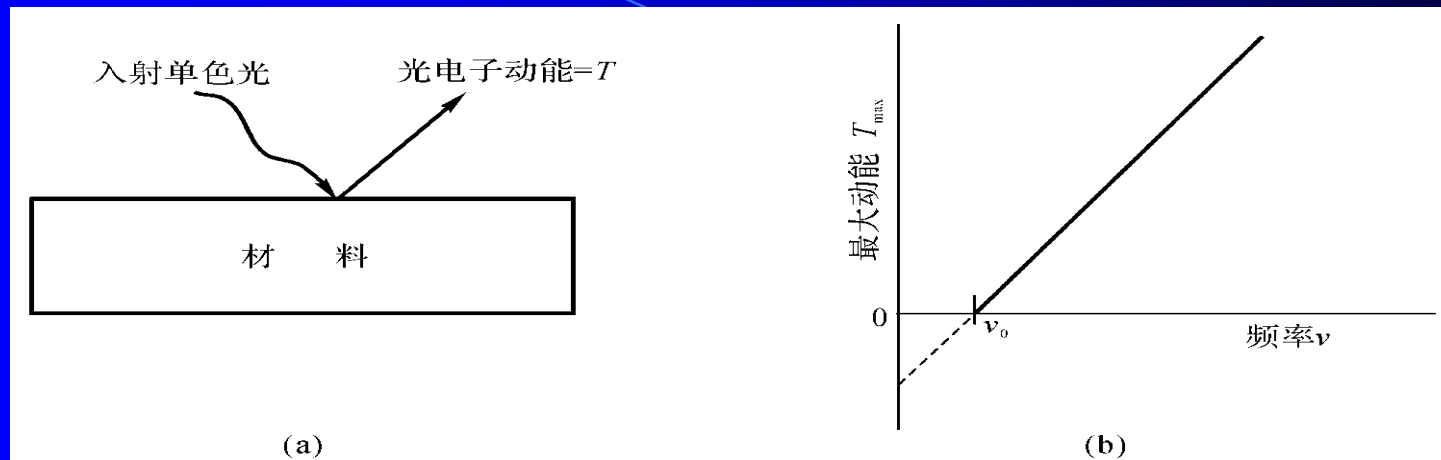
光照射到金属上，有电子从金属上逸出的现象。这种电子称之为**光电子**。试验发现光电效应有几个突出的特点：



1. 只有当光的频率大于某一定值 $\nu_0$ 时，才有光电子发射出来。若光频率小于该值时，则不论光强度多大，照射时间多长，都没有电子产生。光的这一频率 $\nu_0$ 称为临界频率；
2. 电子的能量只是与光的频率有关，与光强无关，光强只决定电子数目的多少；
3. 光束入射到电子发射的时间间隔非常短，无需能量积累，瞬时发射。



# 光电效应 photoelectric effect 实验（爱因斯坦，1905年）



光照射材料表面



电子逸出材料表面

普朗克常数  $\downarrow$  光子能量  $h\nu$



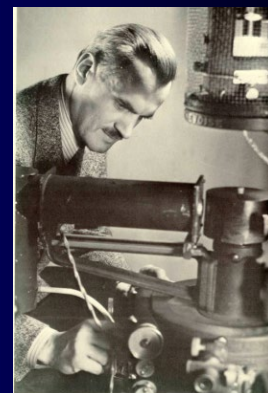
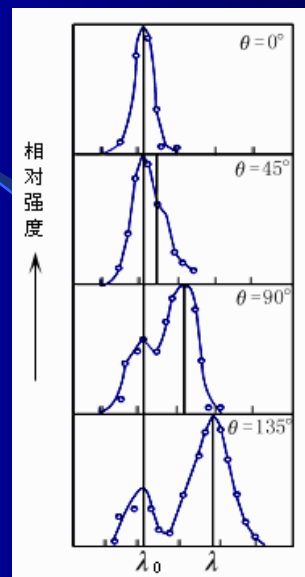
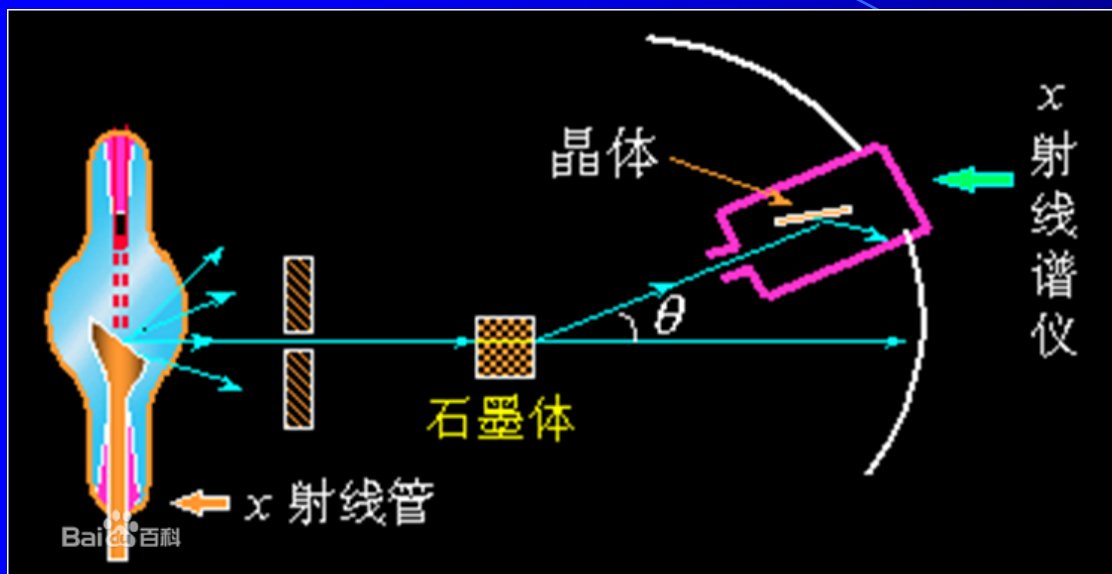
光电子的动能与入射光波长有关

功函数  $h\nu_0$ ：使电子逸出材料表面所需的最小光子能量

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2} m v_{\max}^2$$

**光电效应说明了光子具有能量！**

# 光的粒子性——康普顿效应



1923年康普顿在做x射线通过物质的散射实验时，发现：

- 1 散射线中除原来X光的波长 $\lambda$ 外，增加了一个新的波长为 $\lambda'$ 的X光，且 $\lambda' > \lambda$ ；
- 2 波长增量  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ ，只与散射角有关，而与入射波长和散射物质都无关。

经典电动力学不能解释这种新波长的出现，经典力学认为电磁波通过物质时，物质中带电离离子做受迫振动，其频率等于入射频率，所以散射光频率等于入射光频率。

# 光量子概念解释康普顿效应

- 光子能量远大于束缚能，被碰电子可被看成“自由”电子，碰前“静止”；
- 光子与原子核外层电子碰撞，光子能量一部分传给电子，波长变长；并且碰撞过程中交换的能量和碰撞角度有关；
- 光子与原子核内层电子碰撞，能量几乎不变，波长不变；

能量守恒

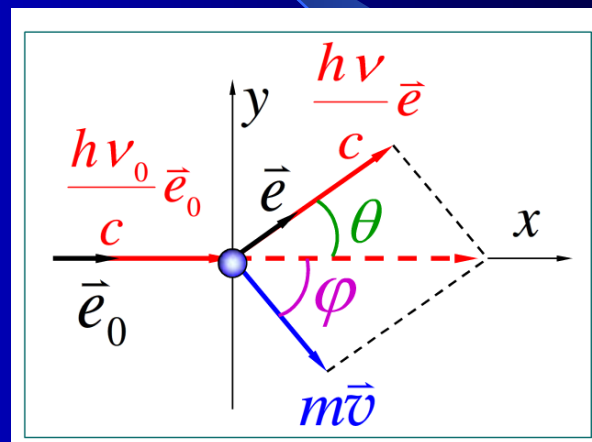
$$h\nu_0 + m_0c^2 = h\nu + mc^2$$

动量守恒

$$\frac{h\nu_0}{c} \vec{e}_0 = \frac{h\nu}{c} \vec{e} + m\vec{v}$$

反冲电子质量（质数关系）

$$m = m_0(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$$



$$P = mC = \frac{h\nu}{C^2} C = \frac{h\nu}{C} = \frac{h}{\lambda}$$

康普顿散射实验的物理意义：

- 支持了“光量子”的概念，进一步证实了  $E=h\nu$ ；
- 首次在实验上证实了光子具有动量；
- 验证了狭义相对论力学的正确性。

# 量子力学的发展简介

早期量子论



量子力学



相对论量子力学

普朗克能量量子化假说  
爱因斯坦光子假说  
康普顿效应  
玻尔的氢原子理论

德布罗意实物粒子波粒二象性  
薛定谔方程  
波恩的物质波统计解释  
海森伯的测不准关系

狄拉克把量子力学与狭义相对论相结合

## 2.1.2 波粒二象性 wave-particle duality

波具有粒子性的实验:

爱因斯坦光电效应  
光波实验

光子具有能量!

康普顿 (Compton) 效应  
X射线偏转实验

光子具有动量!



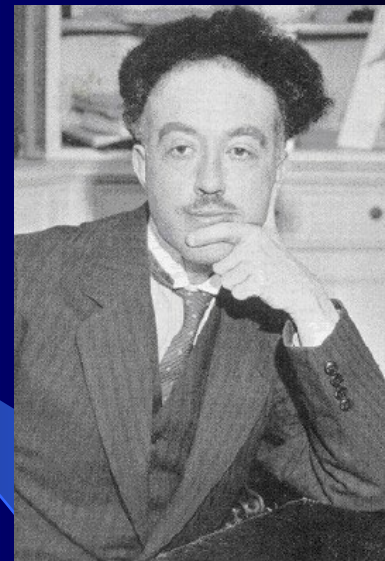
# 德布罗意关系

光波:

波动性: 波长 $\lambda$ 、频率 $\nu$

粒子性: 光量子 (光子) 能量与动量:

能量 $h\nu$  ( $\hbar\omega$ )、动量 $h/\lambda$  ( $\hbar k$ )

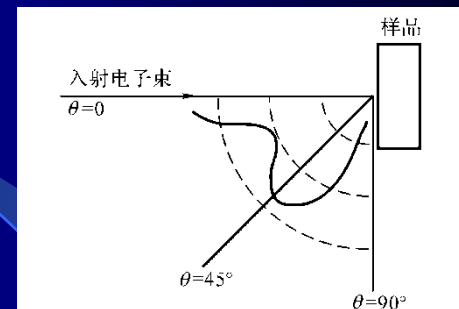
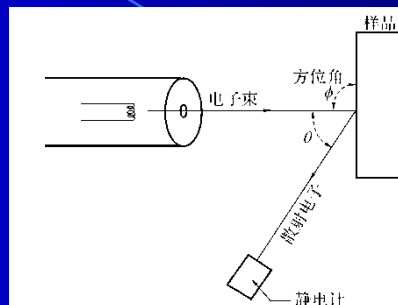
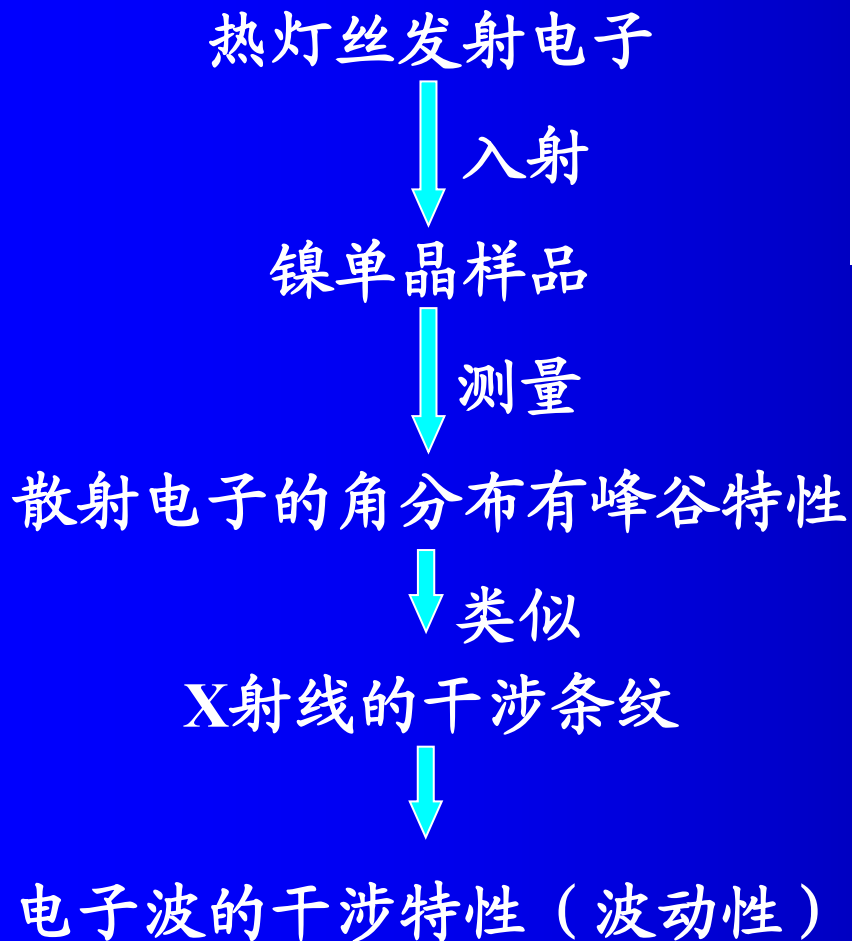


1924年, 德布罗意在光的波粒二象性的启发下, 提出了物质波的假设, 即实物粒子也应具有波动性。与一定能量 $E$ 和动量 $p$ 的实物粒子相联系的波的频率和波长分别为:

$$p = h / \lambda \quad E = h\nu$$

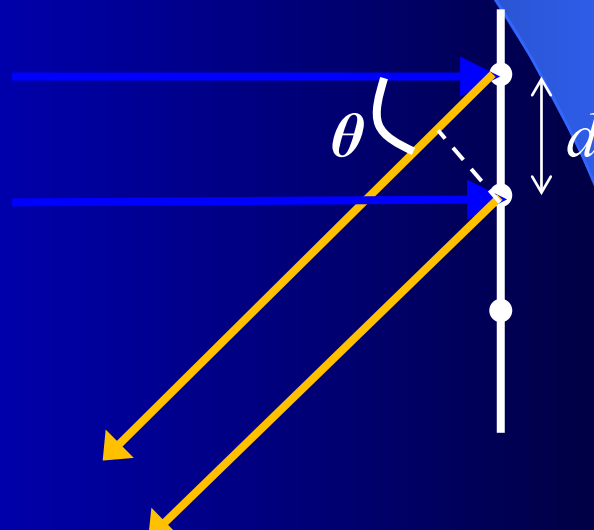
# 证实粒子具有波动性的实验（1927）

## Davisson-Germer电子波动性实验（1927）



电子波长:

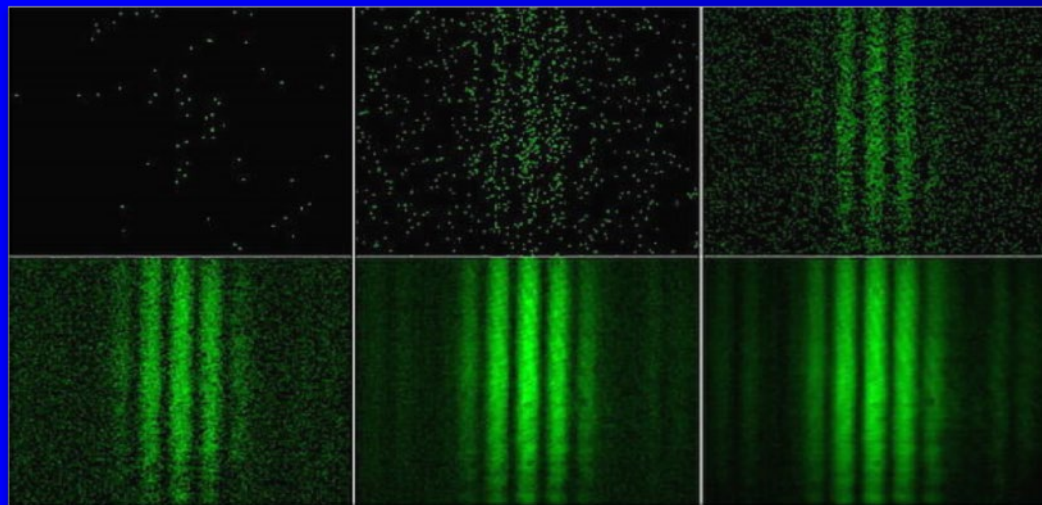
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}$$



散射增强条件:  $d \sin \theta = n \lambda$

# 关于波粒二象性的错误理解：

1. **波由粒子组成**：由大量粒子相互作用形成，如水波，声波等。



波动性与粒子流强度  
无关，单个粒子也存在  
波动性！

运用现代的单光子源和探测器技术进行的杨氏双缝干涉实验

2. **粒子由波组成**：粒子是“波包”。把波看成是粒子的某种实际结构，是三维空间中连续分布的某种物质波包。波包大小即粒子大小，波包的群速度是粒子的速度。

由于色散，波包会扩散消失，但粒子是稳定的。

## 2.1.3 测不准原理 the uncertainty principle

共轭物理量:

动量 $p$ 与位置 $x$ 、能量 $E$ 与时间 $t$ 、角动量 $P$ 与角度 $\phi$ 、.....

测不准量 $\Delta p$ 、 $\Delta x$ ； $\Delta E$ 、 $\Delta t$ ； $\Delta P$ 、 $\Delta \phi$

测不准原理（海森堡不确定关系）：

➤ 动量位置测不准原理：不可能同时绝对精确地确定动量和位置

$$\text{作用量: } \Delta p \Delta x \geq \hbar/2$$

其它共轭物理量测不准关系：

➤ 能量时间测不准关系（作用量）： $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$

➤ 角动量角度测不准关系（作用量）： $\Delta P \Delta \phi \geq \hbar/2$

$$\text{约化普朗克常数: } \hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

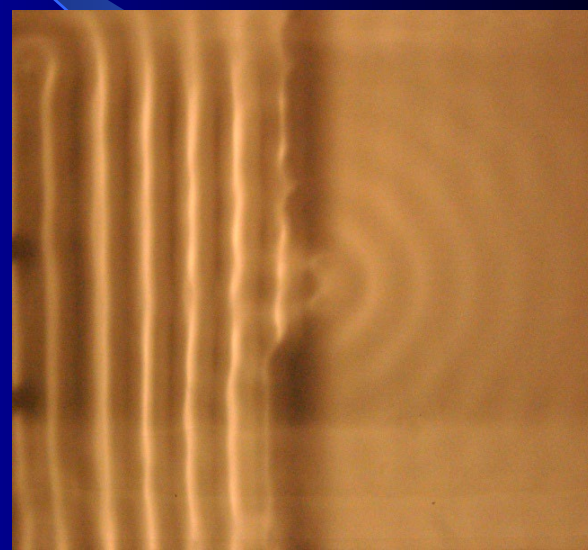
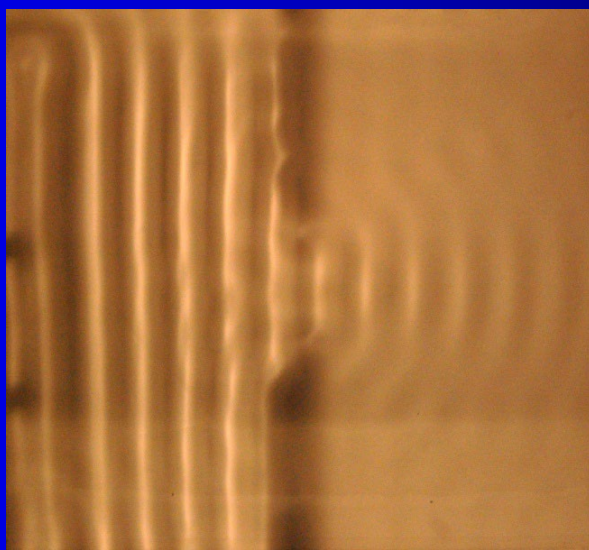
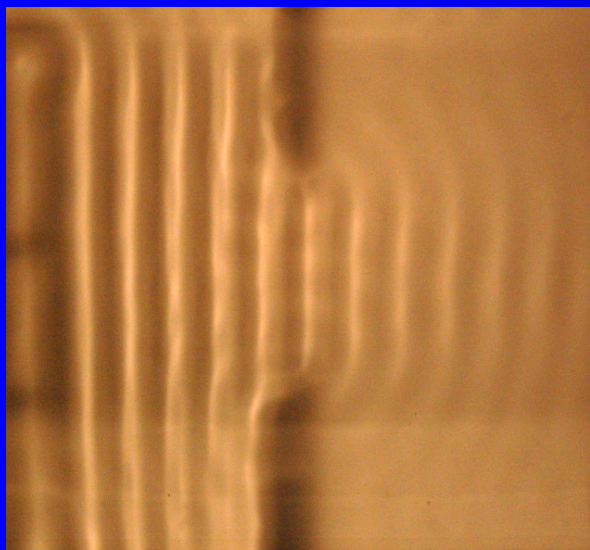
# 不确定性的含义

- 不论微观粒子处在何种状态，它的坐标和动量在客观上不能同时都具有确切数值，当然也就不能在同一个实验中将它俩同时都测准。这种不能同时测准是原则性的。就是说，不存在能同时测准微观粒子位置和动量的实验方案，也并非任何实验方案欠周到、实验技术欠精密所带来的实验误差。
- 不确定原理常会被解释为：粒子位置的测量必然的扰动了粒子的动量；反过来说也对，粒子动量的测量必然的扰乱了粒子的位置。换句话说，不确定原理是一种观察者效应。

不确定性关系的存在正是根源于微观粒子的波动性，或者更准确说，根源于微观粒子的波粒二象性。



# 狭缝的衍射



## 2.2 薛定谔波动方程 Schrödinger's wave equation

能量子:  $E = h\nu = \hbar\omega$ , 微观量子化

波粒二象性

量子波动性

薛定谔方程

测不准原理: 几率密度  $|\Psi(r, t)|^2$ 、波函数  $\Psi(r, t)$

### 2.2.1 波动方程 The Wave Equation

非相对论薛定谔方程 (1925):

位函数  $U$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r,t)+U(r)\Psi(r,t)=j\hbar\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}$$

一维情况



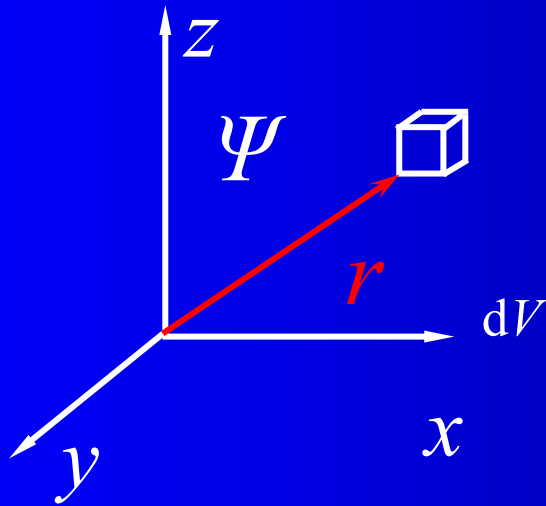
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x,t)=j\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

薛定谔其实不知道  $\Psi(r, t)$  到底是什么!



# 波恩对波函数物理意义的统计解释（1927）

- 波函数模的平方  $|\Psi(r, t)|^2$  代表  $t$  时刻在空间某点  $r$  处单位体积内发现粒子的几率(概率密度)。



在  $t$  时刻  $r$  点  $d\tau = dx dy dz$  体积内，找到由波函数  $\Psi(r, t)$  描写的粒子的几率是：

$$dW(r, t) = |\Psi(r, t)|^2 d\tau$$

- 波函数  $\Psi(r, t)$  是概率振幅，不可测量，可测量的是概率。
- 波函数包含了量子体系所有可知的信息：位置、动量、能量.....

# 薛定谔波动方程的推导

微观粒子具有波动性，对于最简单的一维平面波，其波函数为：

$$\psi(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)]$$



$$\omega = \frac{i}{\psi(x, t)} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, k^2 = -\frac{1}{\psi(x, t)} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}$$

从粒子的角度来看，粒子总能量是动能和势能之和

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U = \frac{p^2}{2m} + U$$

$$E = \hbar\omega = \hbar \frac{i}{\psi(x, t)} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

$$\frac{(\hbar k)^2}{2m} + U = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\frac{1}{\psi(x, t)} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right] + U$$

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

一维情况的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t)+U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t)=j\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

假定波函数为可分离变量:  $\Psi(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r})\varphi(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(\mathbf{r})}\nabla^2\psi(\mathbf{r})+U(\mathbf{r})=j\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt}=\text{const.}=E$$

正弦波形式:  $\varphi(t)=\exp(-j\frac{E}{\hbar}t)=\exp(-j\omega t)$

定态薛定谔方程 (与时间无关):

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r})+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r})=0$$

粒子能量:  $E=\hbar\omega$



## 2.2.2 波动方程的物理意义 physical meaning of the wave equation

定态薛定谔方程:  $\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0$



粒子（物质）的波动方程  
粒子的波动性

波函数:  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\varphi(t) = \psi(\mathbf{r})\exp(-j\omega t)$

粒子能量:  $E = \hbar\omega$   $\longrightarrow$  能量量子化

粒子在某时刻、某位置出现的几率密度为:

$\Psi(\mathbf{r}, t)\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$   $\longrightarrow$  测不准原理



粒子的几率密度只与位置有关，而与时间无关

## 2.2.3 边界条件 boundary conditions

- 某存在的粒子肯定会在空间中某个位置出现

↓ 几率密度  $|\Psi(r, t)|^2$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) dxdydz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{r})|^2 dxdydz = 1 \quad \longrightarrow \text{归一化}$$

- $\psi(\mathbf{r})$  有限、单值、连续  $\longrightarrow$  几率密度

- $\nabla \psi(\mathbf{r})$  有限、单值、连续  $\longrightarrow$  动量

- $\nabla^2 \psi(\mathbf{r})$  有限  $\longrightarrow$  能量

## 2.3 薛定谔波动方程的应用实例

### 2.3.1 自由空间中电子 electrons in free space

定态薛定谔方程

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0$$

一维情况

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \right) + U(x) = E$$

自由空间,  $U(x) = \text{const.} < E$

$$U(x) = 0$$

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

通过最简单例子，引出量子力学的基本概念、基本特性

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



$$\psi(x) = A \exp\left[j\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right] + B \exp\left[-j\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right]$$

加上时间项

$$\varphi(t) = \exp(-j\frac{E}{\hbar}t) = \exp(-j\omega t)$$



$$\Psi(x,t) = A \exp\left[\frac{j}{\hbar}(\sqrt{2mE}x - Et)\right] + B \exp\left[-\frac{j}{\hbar}(\sqrt{2mE}x + Et)\right]$$



行波解的波函数，正 $x$ 方向和负 $x$ 方向的行波叠加

$$\Psi(x,t) = A \exp\left[\frac{j}{\hbar}(\sqrt{2mE}x - Et)\right] + B \exp\left[-\frac{j}{\hbar}(\sqrt{2mE}x + Et)\right]$$

圆频率:  $\omega = E/\hbar$  考虑一个沿正x方向

波数:  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  行进的粒子

$$\Psi(x,t) = A \exp[j(kx - \omega t)] \rightarrow \text{平面波}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 = \text{const.}$$

沿正x方向任意点的几率密度相同

给定动量的粒子, 无法确定粒子的位置 (测不准原理)

粒子圆频率:  $\omega = E/\hbar$

粒子能量:  $E = \hbar\omega$

能量是一份一份的, 能量量子化

$$\Psi(x,t) = A \exp[j(kx - \omega t)]$$

粒子运动基本特性: 动量、能量

波传播基本特性: (角)频率、波矢

粒子波数:  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

粒子动量:  $p = \sqrt{2mE} = \hbar k$

粒子动量:  $p = \hbar k$

波数:  $k = 2\pi/\lambda$

扩充成三维

粒子动量 (矢量)  
与波矢之间的关系

$$p = h/\lambda$$

德布罗意波长 de Broglie wavelength  
与动量的关系



# 测不准原理



给定粒子动量的反问题

定位（给点位置）的粒子，无法确定粒子的动量

某粒子的波函数的动量差很小，为  $\hbar dk$

相应的能量差也很小，为  $\hbar d\omega$ ：

$$\Psi_1(x,t) = \sin(kx - \omega t)$$

$$\Psi_2(x,t) = \sin[(k + dk)x - (\omega + d\omega)t]$$

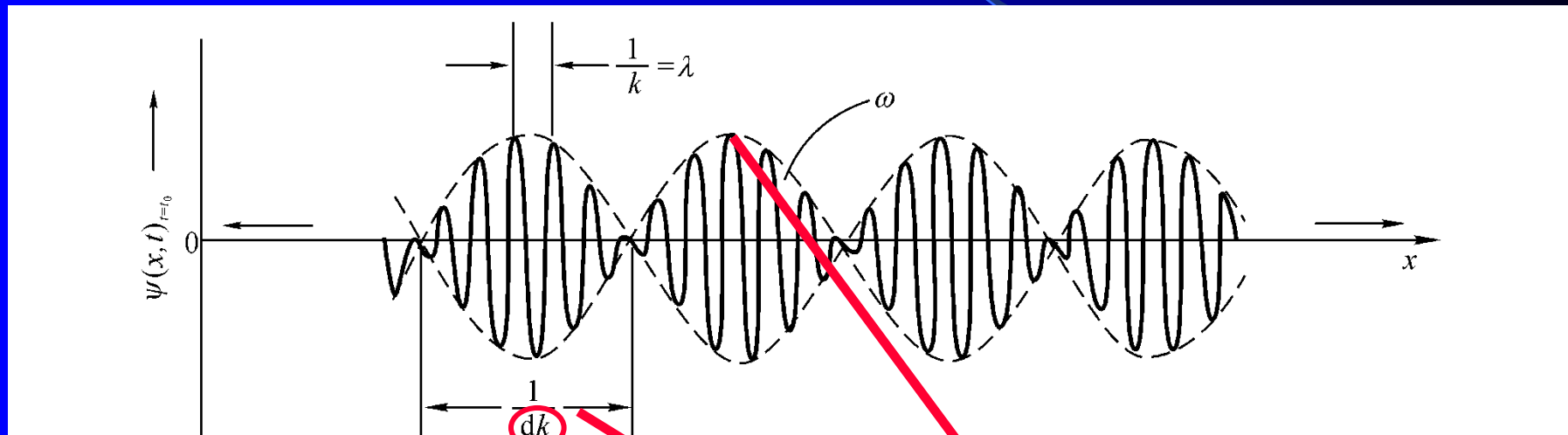
$$\Psi(x,t) = \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)$$

$$\approx 2\cos\{0.5[(dk)x - (d\omega)t]\}\sin(kx - \omega t)$$



波函数为调幅的正弦波

$$\Psi(x,t) \approx 2\cos\{0.5[(dk)x - (d\omega)t]\}\sin(kx - \omega t)$$



动量差增加，调幅周期变小

不同 $k$ 值数目增多

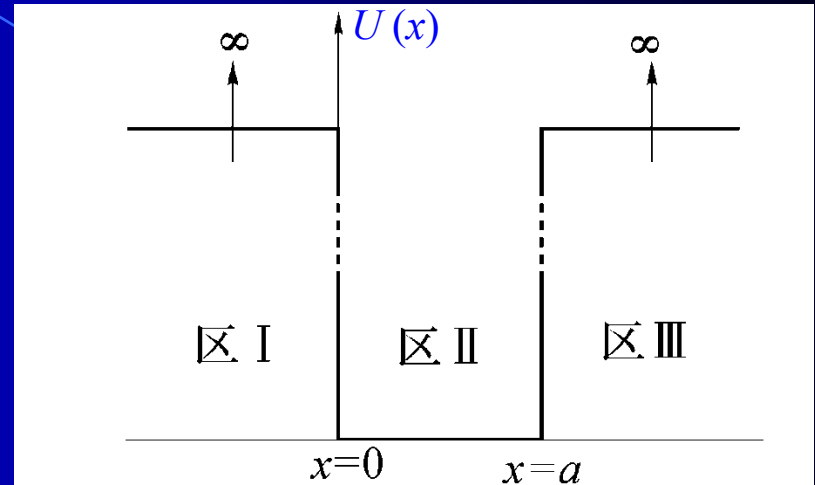
动量的确定性下降、位置的确定性上升 → 测不准原理

## 2.3.2 无限深势阱（一维） the infinite potential well

一维定态薛定谔方程

time-independent Schroedinger's wave equation:

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



区 I、区 III:

$$U(x) \rightarrow \infty$$

$$\psi(x) = 0$$

区 II:

$$U(x) = 0$$

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

$$k = \sqrt{2mE} / \hbar$$

$$\psi(x) = A_1 \cos(kx) + A_2 \sin(kx)$$

可以用指数函数表示通解，  
也可以用正弦、余弦表示

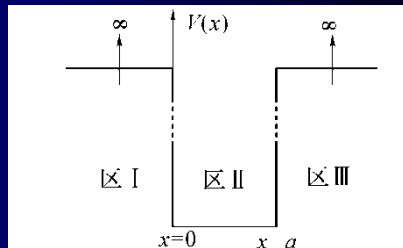
三个未知数

区II:

$$\psi(x) = A_1 \cos(kx) + A_2 \sin(kx)$$

区I、区III:

$$\psi(x) = 0$$



边界条件

$$\psi(x=0)=0 \Rightarrow A_1=0$$

$$\psi(x=a)=0 \Rightarrow k=n\pi/a, \quad n=1, 2, 3, \dots$$

$$\psi(x) = A_2 \sin(n\pi x/a), \quad n=1, 2, 3, \dots$$

归一化条件

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow A_2 = \sqrt{a/2}$$

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a), \quad n=1, 2, 3, \dots$$

$$|\psi(x)|^2 = (2/a) \sin^2(n\pi x/a), \quad n=1, 2, 3, \dots$$

几率密度分布

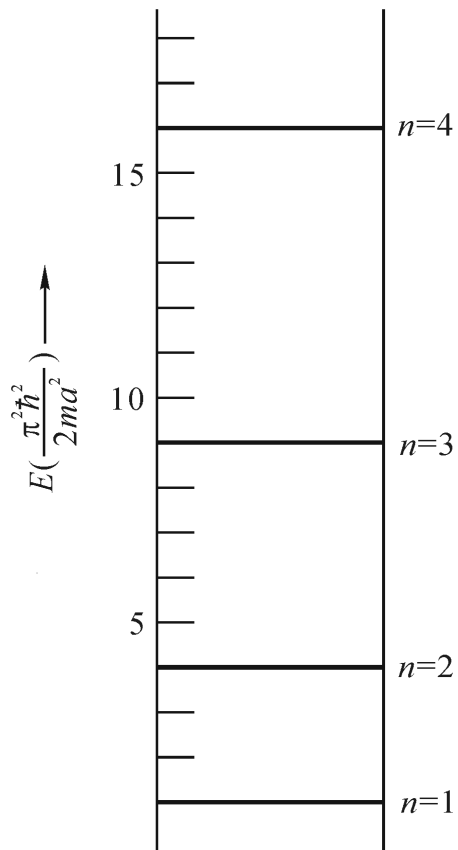
$$k = \sqrt{2mE} / \hbar$$

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

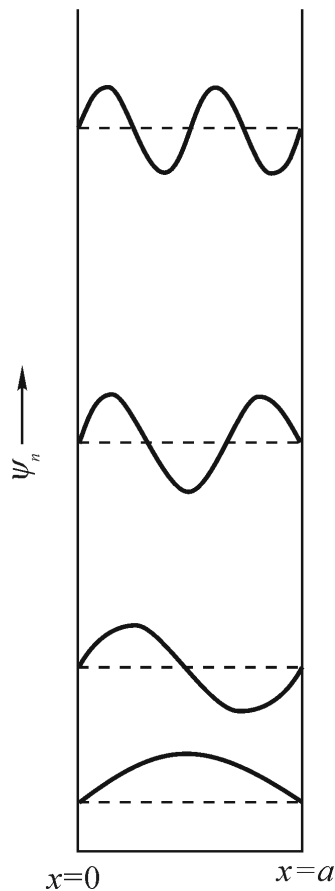
分立能级 (量子化)

# 分立能级 (量子化)

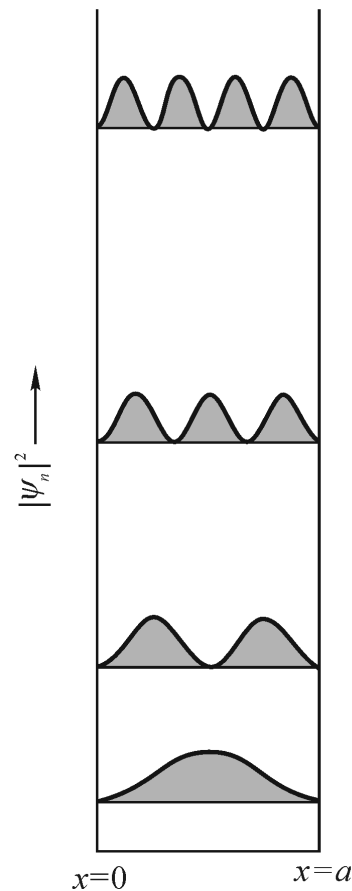
# 几率密度分布



(a)



(b)



(c)

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

波函数分布

$$|\psi(x)|^2 = (2/a) \sin^2(n\pi x/a)$$

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$$

## 2.3.3 阶跃位函数 the step potential function

一维定态薛定谔方程:

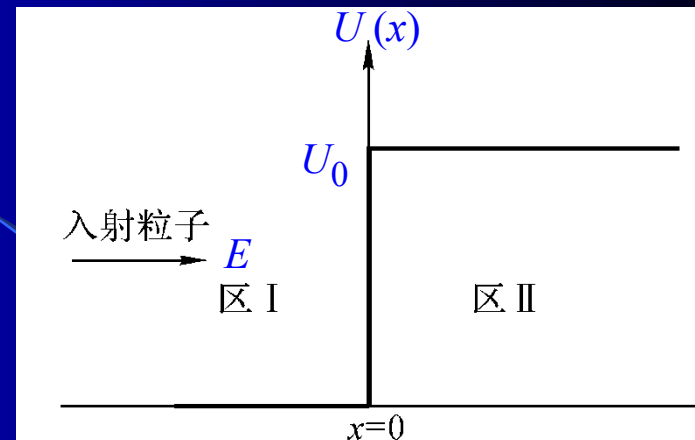
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi(x) = 0$$

区 I:

$$U(x) = 0$$

区 II:

$$U(x) = U_0$$



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

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi(x) = 0$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar > 0$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar > 0$$

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1x) + B_1 \exp(-jk_1x)$$

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(-k_2x) + B_2 \exp(k_2x)$$

入射行波

反射行波

$$x \rightarrow \infty, \quad \psi_2(x) \neq \infty \Rightarrow B_2 = 0$$

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(-k_2x)$$

透射衰减波



入射行波    反射行波

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1 x) + B_1 \exp(-jk_1 x)$$

透射衰减波

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(-k_2 x)$$

边界条件 ( $x=0$ ):

$\psi(x)$  连续

$\frac{d\psi(x)}{dx}$  连续

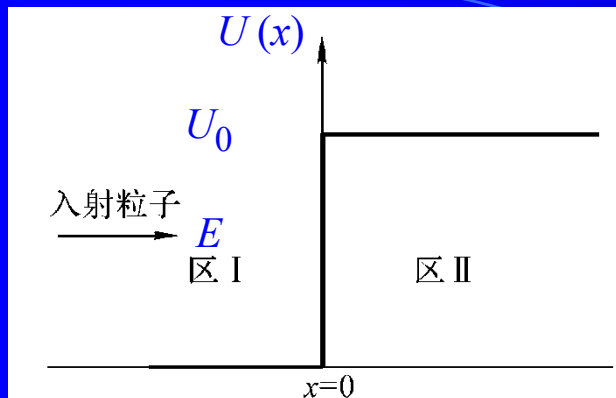
$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

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

$$A_1 + B_1 = A_2$$

$$jk_1 A_1 - jk_1 B_1 = -k_2 A_2$$

$$B_1 = \frac{k_2 + jk_1}{jk_1 - k_2} A_1, \quad A_2 = \frac{2jk_1}{jk_1 - k_2} A_1$$



区I:  $U = 0$

粒子总能量 = 动能

$$k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar = \sqrt{2m \frac{1}{2} m v_1^2} / \hbar = m v_1 / \hbar$$

粒子速度:

$$v_i = \hbar k_1 / m$$

入射波



反射波



$$v_r = \hbar k_1 / m$$

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1 x) + B_1 \exp(-jk_1 x)$$

粒子几率密度:

$$A_1 A_1^*$$

$$B_1 B_1^*$$

粒子流:

$$I_i = v_i A_1 A_1^*$$

$$I_r = v_r B_1 B_1^*$$

反射粒子流:  $I_r = v_r B_1 B_1^*$

入射粒子流:  $I_i = v_i A_1 A_1^*$

反射率 (系数):  $R = I_r / I_i = (v_r B_1 B_1^*) / (v_i A_1 A_1^*)$

$$v_r = v_i = v_1 = \hbar k_1 / m$$

$$R = I_r / I_i = (B_1 B_1^*) / (A_1 A_1^*)$$

$$B_1 = \frac{k_2 + jk_1}{jk_1 - k_2} A_1$$

透射衰减波:

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(-k_2 x)$$

$$A_2 = \frac{2jk_1}{jk_1 - k_2} A_1 \neq 0$$

反射率:

$$R = \left( \frac{k_2 + jk_1}{jk_1 - k_2} \right) \left( \frac{k_2 + jk_1}{jk_1 - k_2} \right)^* = 1$$

?

反射率为1、透射几率不等于0  
如何解释?

$$R = 1$$



所有的入射粒子都被势垒反射  
粒子没有穿过势垒  
粒子没有被势垒吸收



?

粒子是否进入过势垒?

透射波:  $\psi_2(x) = A_2 \exp(-k_2 x)$

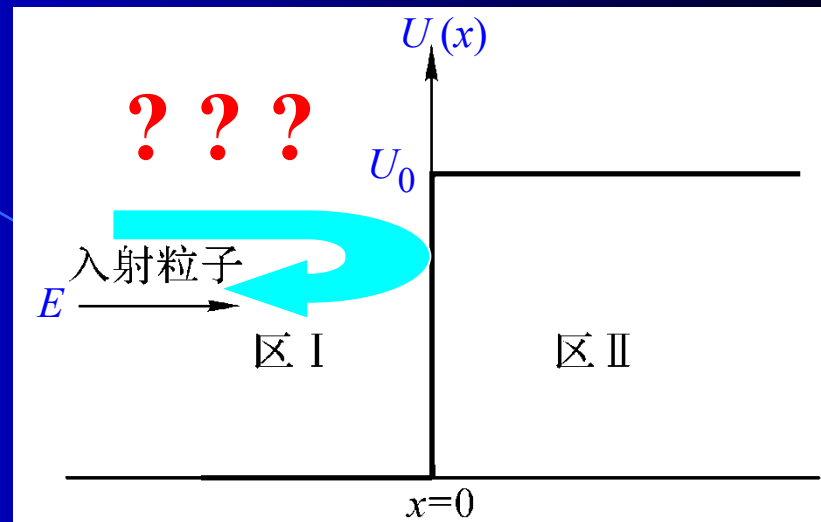
$$A_2 = \frac{2jk_1}{jk_1 - k_2} A_1$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar > 0$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar > 0$$

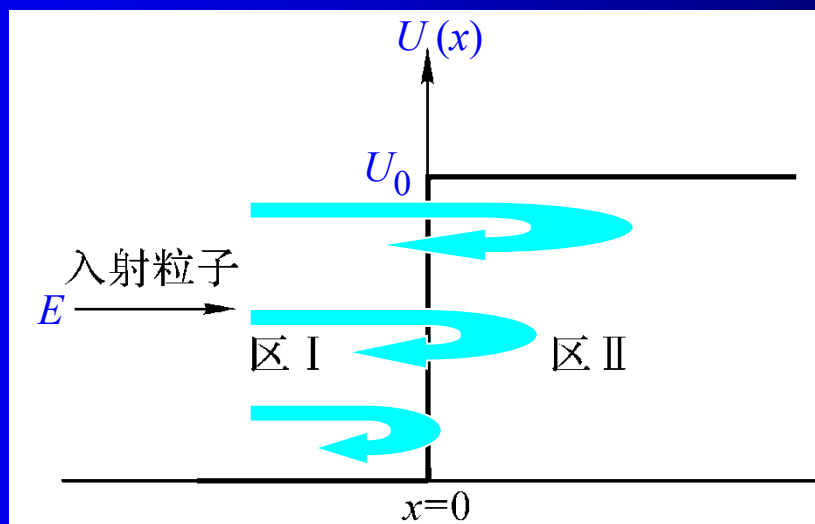
进入区II的粒子几率密度:

$$\psi_2(x)\psi_2^*(x) = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} A_1 A_1^* \exp(-2k_2 x) = \frac{4E}{U_0} A_1 A_1^* \exp(-2k_2 x) \neq 0$$



???

粒子能渗入区II，但随着深度的增加，几率密度急剧下降，最终被散射回区I



## 2.3.4 势垒 the potential barrier

区 I:  $U = 0$

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1x) + B_1 \exp(-jk_1x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar > 0$$

区 II:  $U = U_0$

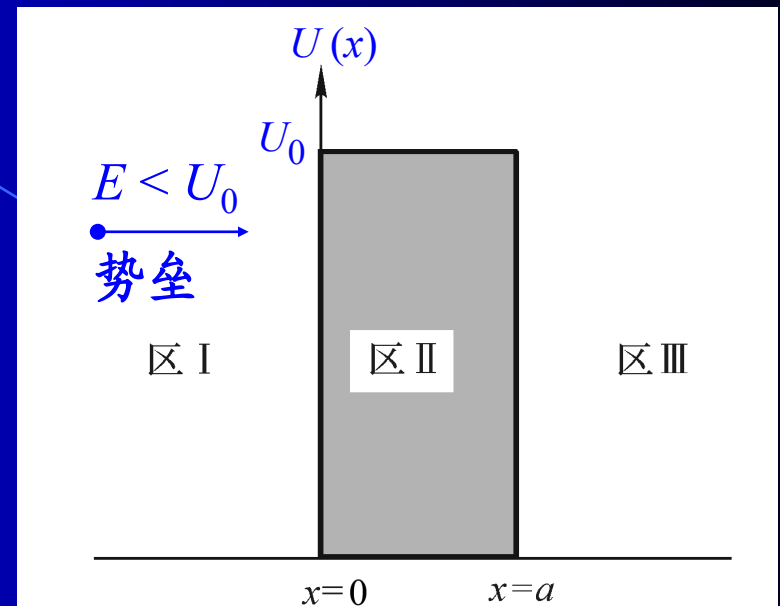
$$\psi_2(x) = A_2 \exp(k_2x) + B_2 \exp(-k_2x)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar > 0$$

区 III:  $U = 0$

$$\psi_3(x) = A_3 \exp(jk_3x) + B_3 \exp(-jk_3x)$$

$$k_3 = k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar > 0$$



粒子进入区 III 后,  $U = 0$   
无任何势垒, 无反射

$$B_3 = 0$$

$$\psi_3(x) = A_3 \exp(jk_1x)$$



# 连续边界条件

$$x = 0: \quad \psi_1(0) = \psi_2(0)$$

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

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

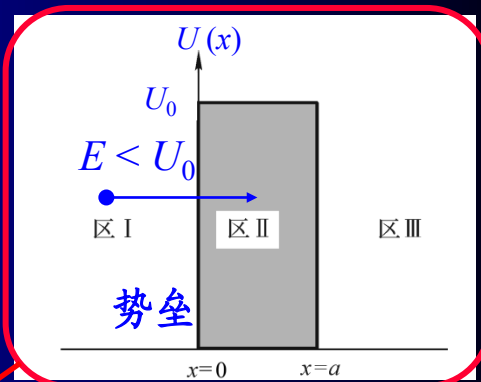
$$jk_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2)$$

$$x = a: \quad \psi_2(a) = \psi_3(a)$$

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

$$A_2 \exp(k_2 a) + B_2 \exp(-k_2 a) = A_3 \exp(jk_1 a)$$

$$k_2[A_2 \exp(k_2 a) - B_2 \exp(-k_2 a)] = jk_1 A_3 \exp(jk_1 a)$$



Ⅰ:  $U = 0$

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1 x) + B_1 \exp(-jk_1 x)$$

Ⅱ:  $U = U_0$

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(k_2 x) + B_2 \exp(-k_2 x)$$

Ⅲ:  $U = 0$

$$\psi_3(x) = A_3 \exp(jk_1 x)$$

求解出:

$$B_1 = f_1(A_1, k_1, k_2, a)$$

$$B_2 = f_2(A_1, k_1, k_2, a)$$

$$A_2 = f_3(A_1, k_1, k_2, a)$$

$$A_3 = f_4(A_1, k_1, k_2, a)$$

$$A_1 = f_a(A_3, k_1, k_2, a)$$

$$A_2 = f_b(A_3, k_1, k_2, a)$$

$$B_1 = f_c(A_3, k_1, k_2, a)$$

$$B_2 = f_d(A_3, k_1, k_2, a)$$

再求解出: 

$$\psi_1(x), \quad \psi_2(x), \quad \psi_3(x)$$

$$A_1 = \frac{A_3}{4} \left( 1 + j \frac{k_2}{k_1} \right) \left( 1 - j \frac{k_1}{k_2} \right) \exp[(jk_1 + k_2)a] + \frac{A_3}{4} \left( 1 - j \frac{k_2}{k_1} \right) \left( 1 + j \frac{k_1}{k_2} \right) \exp[(jk_1 - k_2)a]$$

$$\approx (A_3/4)(1 + jk_2/k_1)(1 - jk_1/k_2) \exp[(jk_1 + k_2)a] \quad \exp(-k_2a) \ll \exp(k_2a)$$

$$B_1 = \frac{A_3}{4} \left( 1 - j \frac{k_2}{k_1} \right) \left( 1 - j \frac{k_1}{k_2} \right) \exp[(jk_1 + k_2)a] + \frac{A_3}{4} \left( 1 + j \frac{k_2}{k_1} \right) \left( 1 + j \frac{k_1}{k_2} \right) \exp[(jk_1 - k_2)a]$$

$$\approx (A_3/4)(1 - jk_2/k_1)(1 - jk_1/k_2) \exp[(jk_1 + k_2)a]$$

$$A_2 = \frac{A_3}{2} \left( 1 + j \frac{k_1}{k_2} \right) \exp[(jk_1 - k_2)a]$$

$$B_2 = \frac{A_3}{2} \left( 1 - j \frac{k_1}{k_2} \right) \exp[(jk_1 + k_2)a]$$

$$k_3 = k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar \quad \longrightarrow \quad v_t = v_i = \hbar k_1 / m$$



透射率:  $T = I_t / I_i = (v_t A_3 A_3^*) / (v_i A_1 A_1^*) = (A_3 A_3^*) / (A_1 A_1^*)$

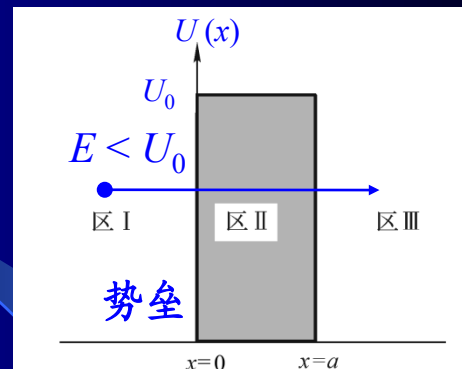
$$A_1 \approx (A_3/4)(1 + jk_2/k_1)(1 - jk_1/k_2)\exp[(jk_1 + k_2)a]$$

透射率:

$$T = (A_3 A_3^*) / (A_1 A_1^*)$$

$$\approx \frac{16\exp(-2k_2a)}{\left[1 + (k_2/k_1)^2\right] \left[1 + (k_1/k_2)^2\right]}$$

$$= 16 \left( \frac{E}{U_0} \right) \left( 1 - \frac{E}{U_0} \right) \exp(-2k_2a)$$



$$v_r = v_i = \hbar k_1 / m$$

透射率大于0

反射率:  $R = I_r / I_i = (v_r B_1 B_1^*) / (v_i A_1 A_1^*) = (B_1 B_1^*) / (A_1 A_1^*) = 1 - T$

反射率  $R < 1$ , 透射率  $T > 0$ : 有粒子进入区III, 即贯穿势垒

隧道效应

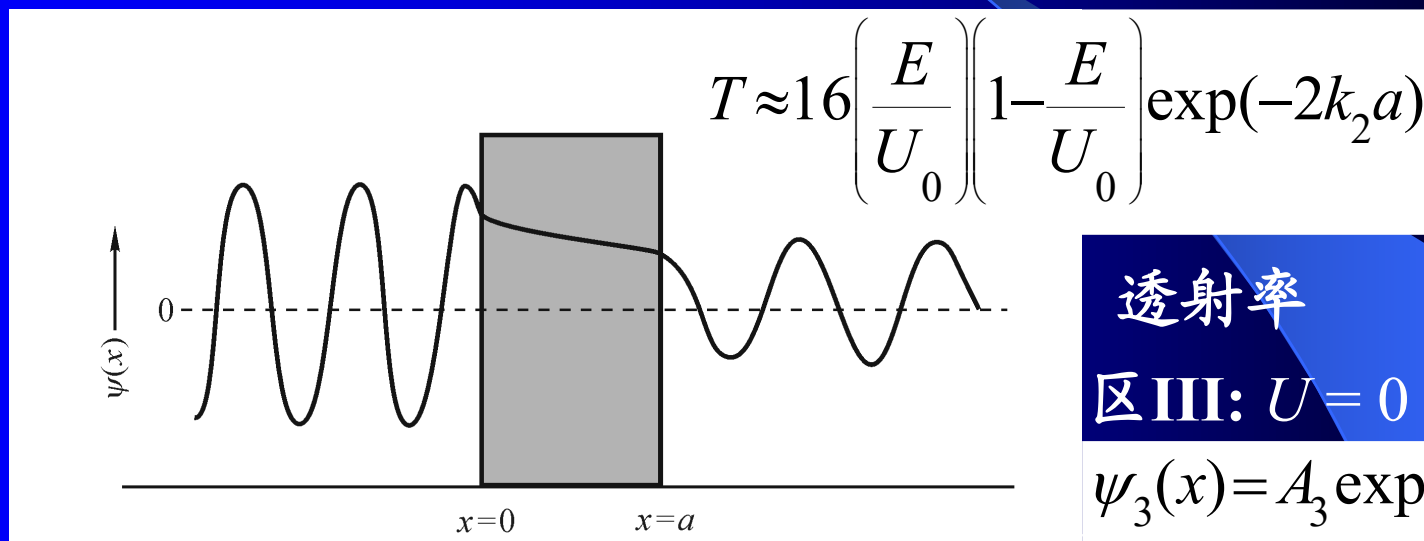
区 I:  $U = 0$

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1 x) + B_1 \exp(-jk_1 x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar > 0$$

反射率:

$$R = 1 - T$$



区 II:  $U = U_0$

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(k_2 x) + B_2 \exp(-k_2 x)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar > 0$$

透射率

区 III:  $U = 0$

$$\psi_3(x) = A_3 \exp(jk_1 x)$$

$$k_3 = k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar > 0$$

# 势垒:

区II:  $\psi_2(x) = A_2 \exp(k_2 x) + B_2 \exp(-k_2 x)$

有粒子进入区II

区III:  $\psi_3(x) = A_3 \exp(jk_1 x)$

有粒子贯穿势垒进入区III  
(隧道效应) 粒子几率密度:

$$\psi_3(x)\psi_3^*(x) \approx 16 \left( \frac{E}{U_0} \right) \left( 1 - \frac{E}{U_0} \right) \exp(-2k_2 a) A_1 A_1^*$$

# 阶跃位函数:

区II:  $\psi_2(x) = A_2 \exp(-k_2 x)$

有粒子进入区II, 粒子几率密度:

$$\psi_2(x)\psi_2^*(x) \approx 4(E/U_0) \exp(-2k_2 a) A_1 A_1^*$$

量子力学中

粒子的波动性  
可以解释

低能量粒子能渗入  
或贯穿高能势垒

经典物理不能解释