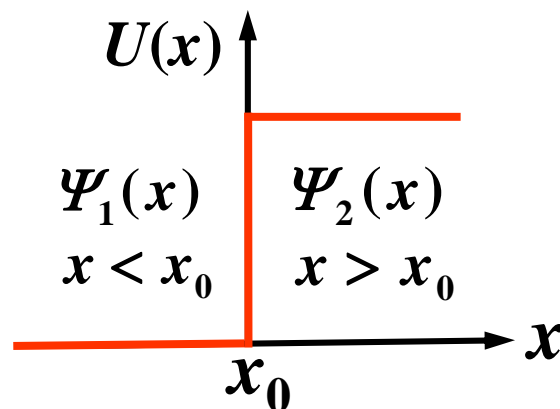


27.3 势垒穿透

定理： 对于势场连续点，或势场不是无限大的间断点，波函数的一阶导数连续。



波函数连续（概率连续）：

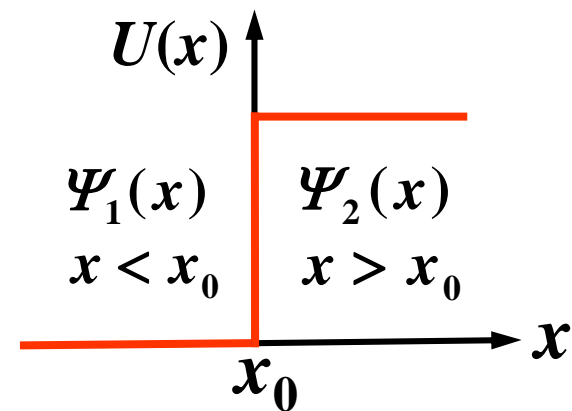
$$\Psi_1(x_0^-) = \Psi_2(x_0^+)$$

波函数一阶导数连续：

$$\Psi_1'(x_0^-) = \Psi_2'(x_0^+)$$

证明:

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



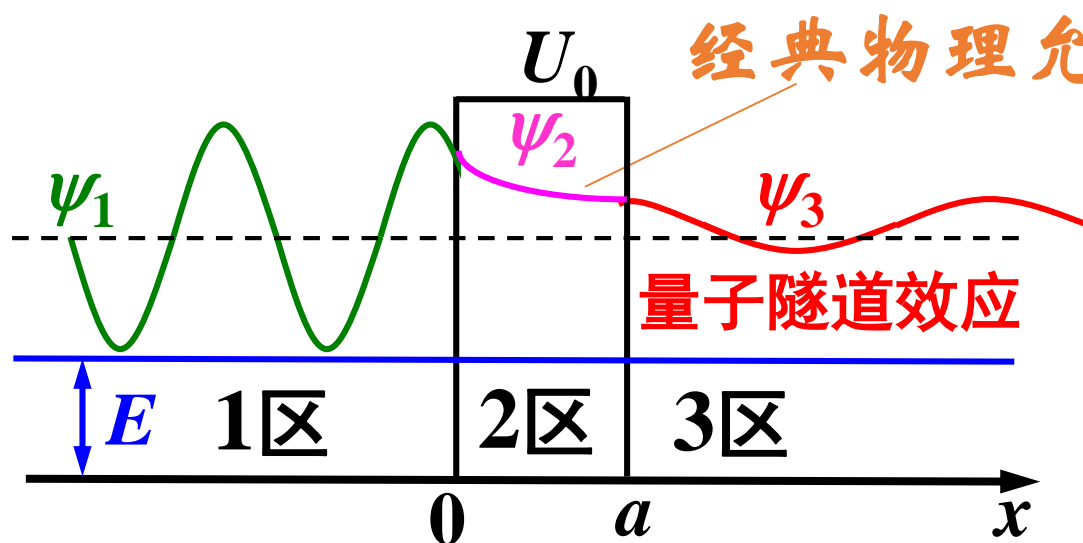
$$\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \Psi''(x) dx = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [E - U(x)] \Psi(x) dx$$

$$\Psi_2'(x_0 + \varepsilon) - \Psi_1'(x_0 - \varepsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [E - U(x)] \Psi(x) dx$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [E - U(x)] \Psi(x) dx = 0 \quad \Rightarrow \quad \Psi_1'(x_0^-) = \Psi_2'(x_0^+)$$

一、量子隧穿效应

设一质量为 m 的粒子以能量 E 从左边沿 x 轴射向势垒。我们只讨论 $E < U_0$ 的情况，假设势垒无吸收，粒子能量保持不变。由于粒子具有波动性，所以入射粒子可以有一定的概率穿透势垒，这称为量子隧穿效应（tunneling effect）。



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

在给定 E 和 $U(x)$ 的条件下，求解薛定谔方程得到波函数 Ψ_3 ，由 Ψ_3 计算粒子穿透势垒出现在3区的概率。列出求解的主要步骤和势垒穿透概率的计算公式。

1. 分区列能量本征方程

$$\Psi_1''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1(x) = 0, x < 0$$

$$\Psi_2''(x) - \frac{2m}{\hbar^2} [U_0 - E] \Psi_2(x) = 0, 0 \leq x \leq a$$

$$\Psi_3''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_3(x) = 0, x > a$$

设 $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\lambda = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$, 方程写成

$$\Psi_1''(x) + k^2 \Psi_1(x) = 0$$

$$\Psi_2''(x) - \lambda^2 \Psi_2(x) = 0$$

$$\Psi_3''(x) + k^2 \Psi_3(x) = 0$$

2. 有物理意义的解

$$\Psi_1(x) = e^{ikx} (\text{入射波}) + R e^{-ikx} (\text{反射波})$$

$$\Psi_2(x) = A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x} (\text{阱壁多次反射})$$

$$\Psi_3(x) = S e^{ikx} (\text{透射波})$$

3. 粒子穿透势垒的概率 穿透系数

$$T = |S e^{ikx}|^2 / |e^{ikx}|^2 = |S|^2$$

为确定 S ，要用在 $x=0$ 和 $x=a$ 这两点波函数的连续性条件

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \Psi_2(a) = \Psi_3(a)$$

以及波函数一阶导数的连续性条件

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0), \Psi_2'(a) = \Psi_3'(a)$$

由此可得关于 R, A, B, S 的四个代数方程，解出 S 就可以得到穿透系数 T 的计算公式。

当 $\lambda a \gg 1$ 时，

$$T \propto e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

例如，当 $U_0 - E \sim 5\text{eV}$ ， $a > 50\text{nm}$ 时， $T \sim 0$ ，隧道效应基本消失，量子 \rightarrow 经典。

The Nobel Prize in Physics 1973

"for their experimental discoveries regarding tunneling phenomena in semiconductors and superconductors, respectively"



Leo Esaki



1/4 of the prize

Japan

IBM Thomas J. Watson
Research Center
Yorktown Heights, NY, USA

b. 1925



Ivar Giaever



1/4 of the prize

USA

General Electric Company
Schenectady, NY, USA

b. 1929
(in Bergen, Norway)

"for his theoretical predictions of the properties of a supercurrent through a tunnel barrier, in particular those phenomena which are generally known as the Josephson effects"



Brian David Josephson



1/2 of the prize

United Kingdom

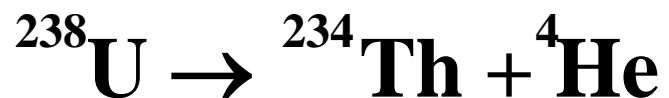
University of Cambridge
Cambridge, United Kingdom

b. 1940

二、量子隧道效应的应用

隧道二极管，金属场致发射，核的 α 衰变，...

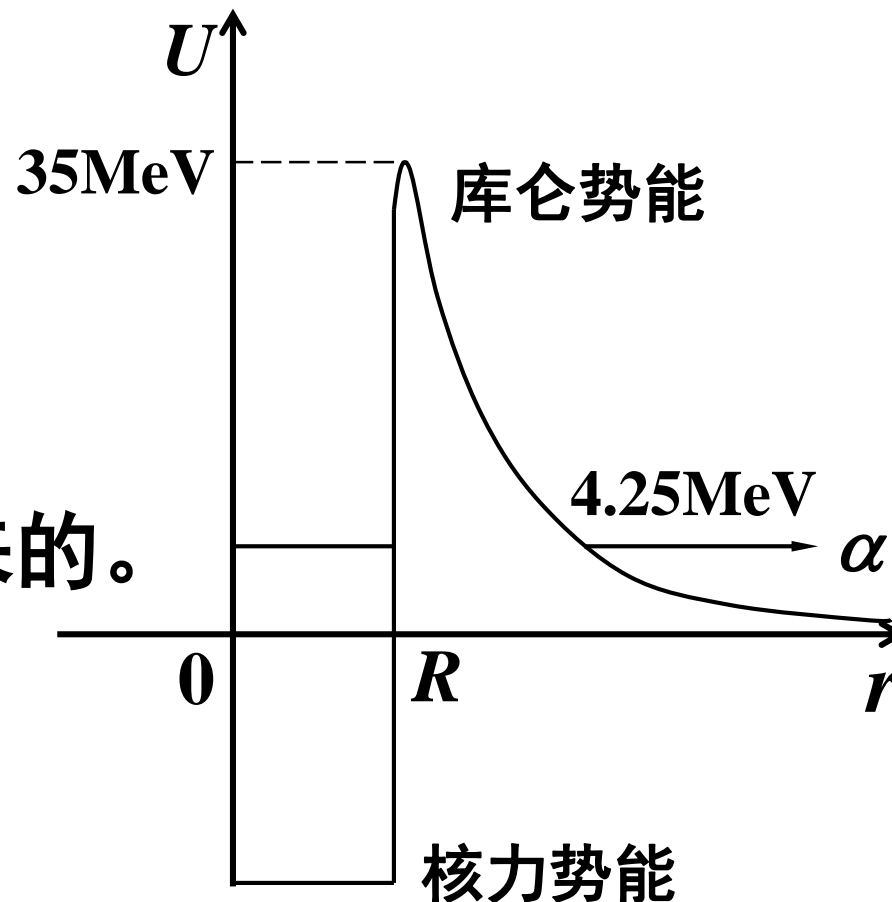
1. 核的 α 衰变



$$E_{\alpha} = 4.25 \text{ MeV}$$

α 是通过隧道效应出来的。

对不同的核，算出的
衰变概率和实验一致。



2. 扫描隧道显微镜 (STM) (Scanning Tunneling Microscopy)

1986	宾尼希 (G.Binning)	} 发明STM
诺贝尔奖	罗雷尔 (Rohrer)	
	鲁斯卡 (E.Ruska)	1931发明电 子显微镜

STM是一项技术上的重大发明，**用于观察表面的微观结构**（不接触、不破坏样品）。

原理：利用量子隧道效应

The Nobel Prize in Physics 1986

"for his fundamental work in electron optics, and for the design of the first electron microscope"



Ernst Ruska



1/2 of the prize

Federal Republic of Germany

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft
Berlin, Federal Republic of Germany

b. 1906

d. 1988

"for their design of the scanning tunneling microscope"



Gerd Binnig



1/4 of the prize

Federal Republic of
Germany

IBM Zurich Research
Laboratory
Rüschlikon,
Switzerland

b. 1947



Heinrich Rohrer



1/4 of the prize

Switzerland

IBM Zurich Research
Laboratory
Rüschlikon,
Switzerland

b. 1933

The Nobel Prize in Physics 1987

"for their important break-through in the discovery of superconductivity in ceramic materials"



J. Georg Bednorz

🏆 1/2 of the prize

Federal Republic of
Germany

IBM Zurich Research
Laboratory
Rüschlikon, Switzerland
b. 1950

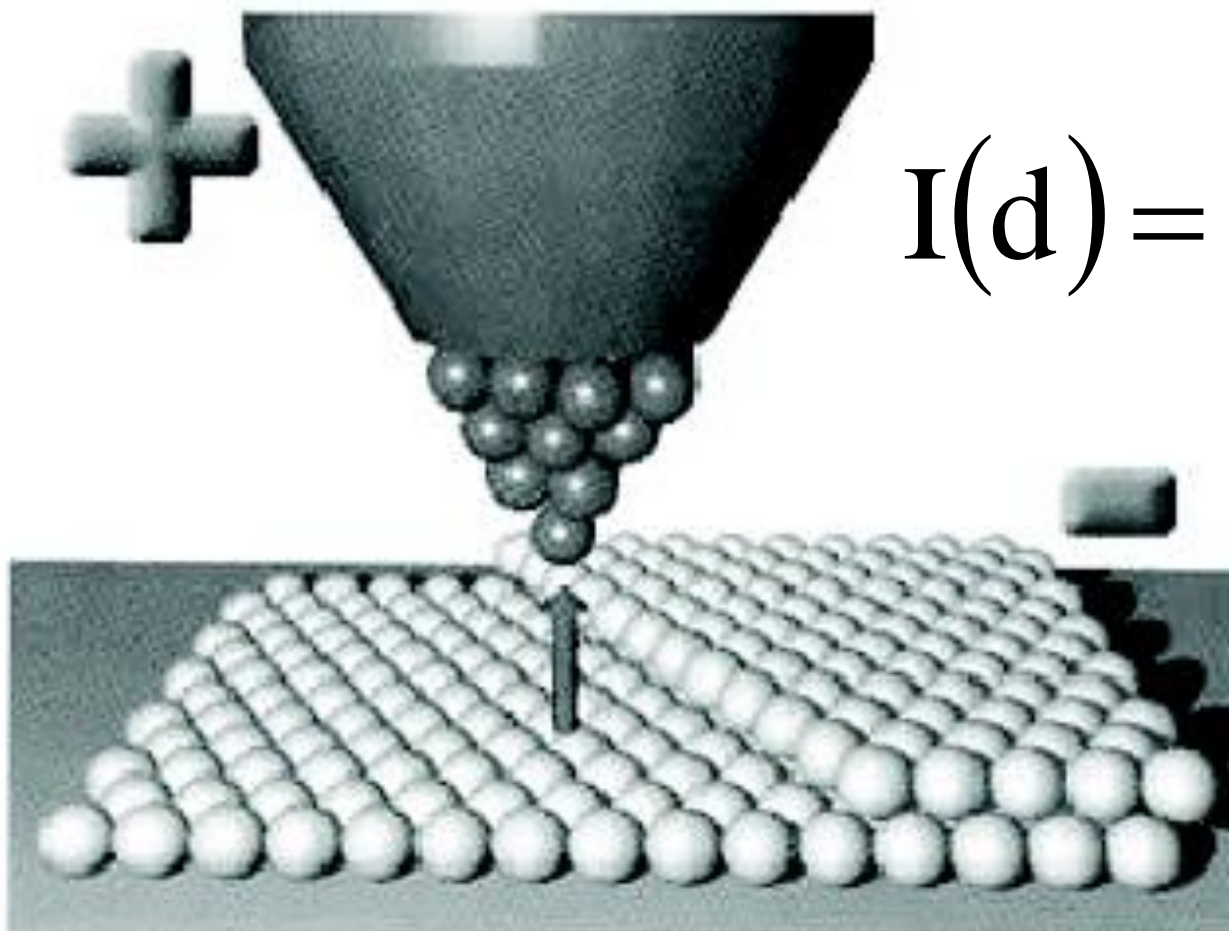


K. Alexander Müller

🏆 1/2 of the prize

Switzerland

IBM Zurich Research
Laboratory
Rüschlikon, Switzerland
b. 1927



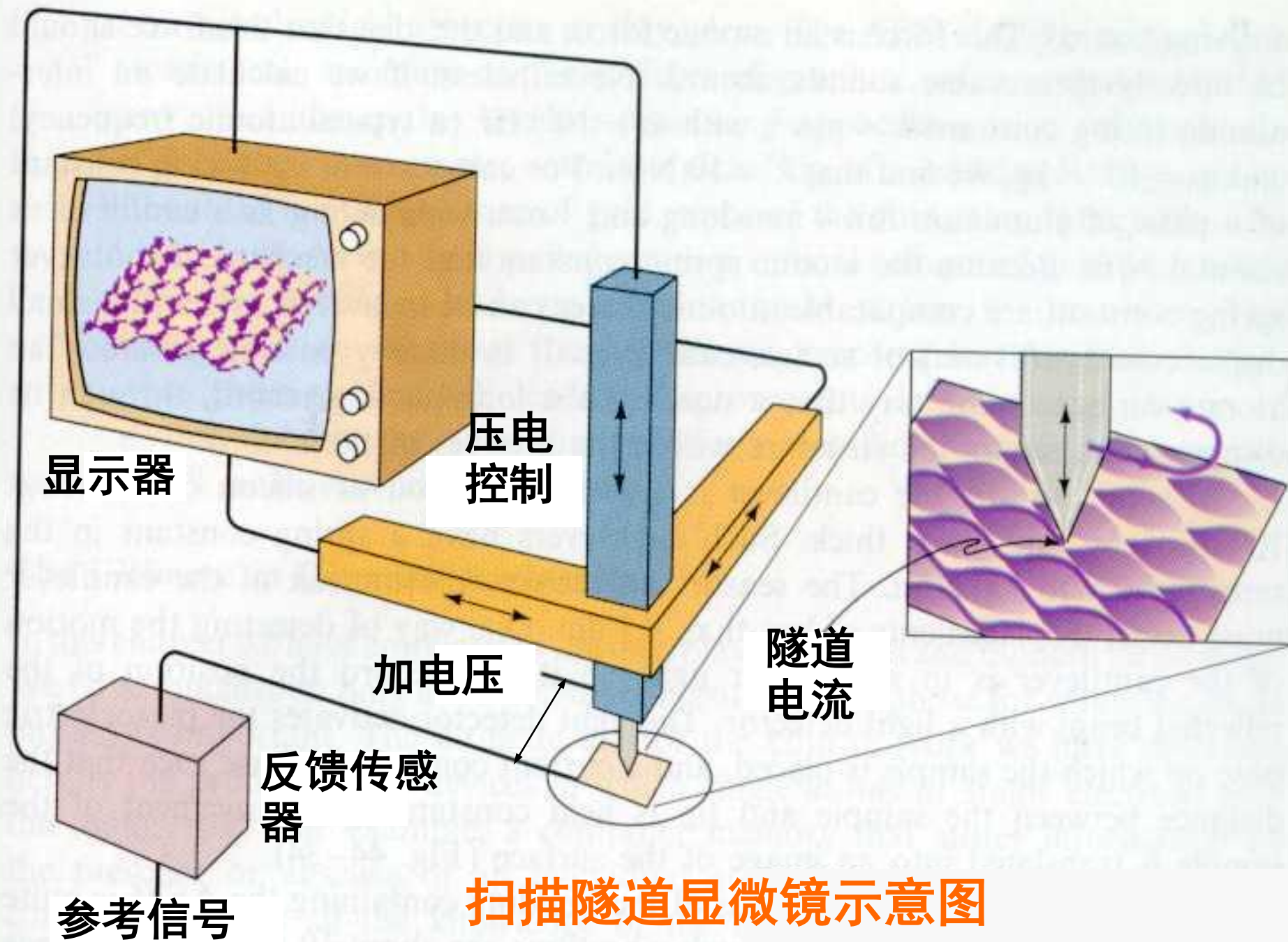
$$I(d) = I_0 e^{-\mu d}$$

STM工作原理示意图

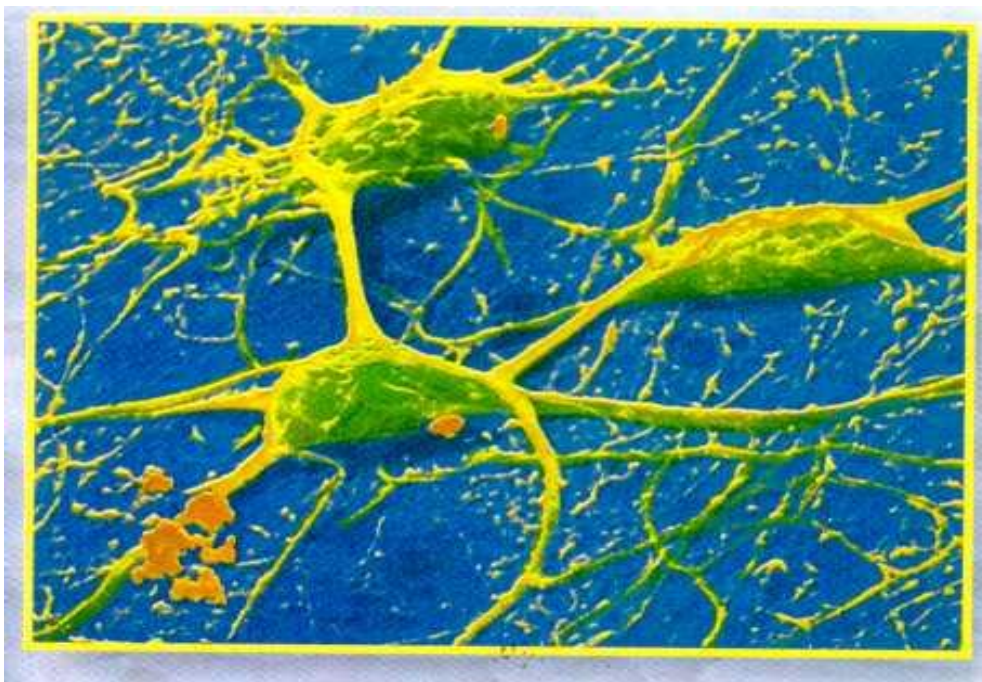
二种模式 { 恒流
恒高

隧道电流 i ，对针尖和样品表面之间的距离 d 非常敏感。用金属探针在样品表面扫描，通过隧道电流的变化就能记录下样品表面的微观形貌和电子分布等信息。

扫描隧道显微镜在表面物理、材料科学、化学和生物等很多领域的科学研究中都有重要的应用。



扫描隧道显微镜示意图



用STM得到的神经细胞象

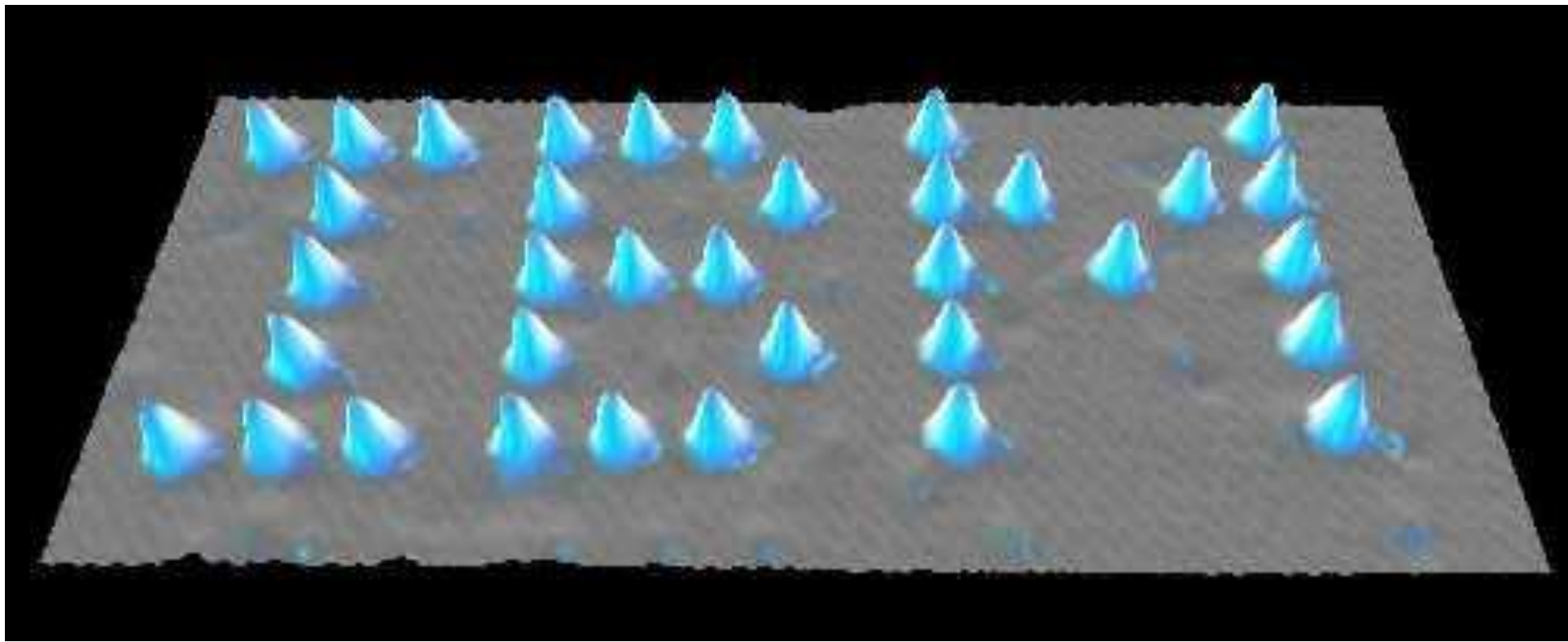


硅表面STM扫描图象

在 1959 年 12 月召开的美国物理年会上,著名物理学家,诺贝尔奖得主费曼在题为“*There's a plenty of room at the bottom*”的演讲中为人们描述了这样一个梦想:“如果有一天可以按人的意志安排一个个原子,将会出现什么样的奇迹?…这些物质将有什么性质?这是十分有趣的物理问题。虽然我不能精确地回答它,但我绝不怀疑当我们能在如此小尺寸上进行操纵时,将得到具有大量独特性质的物质。”

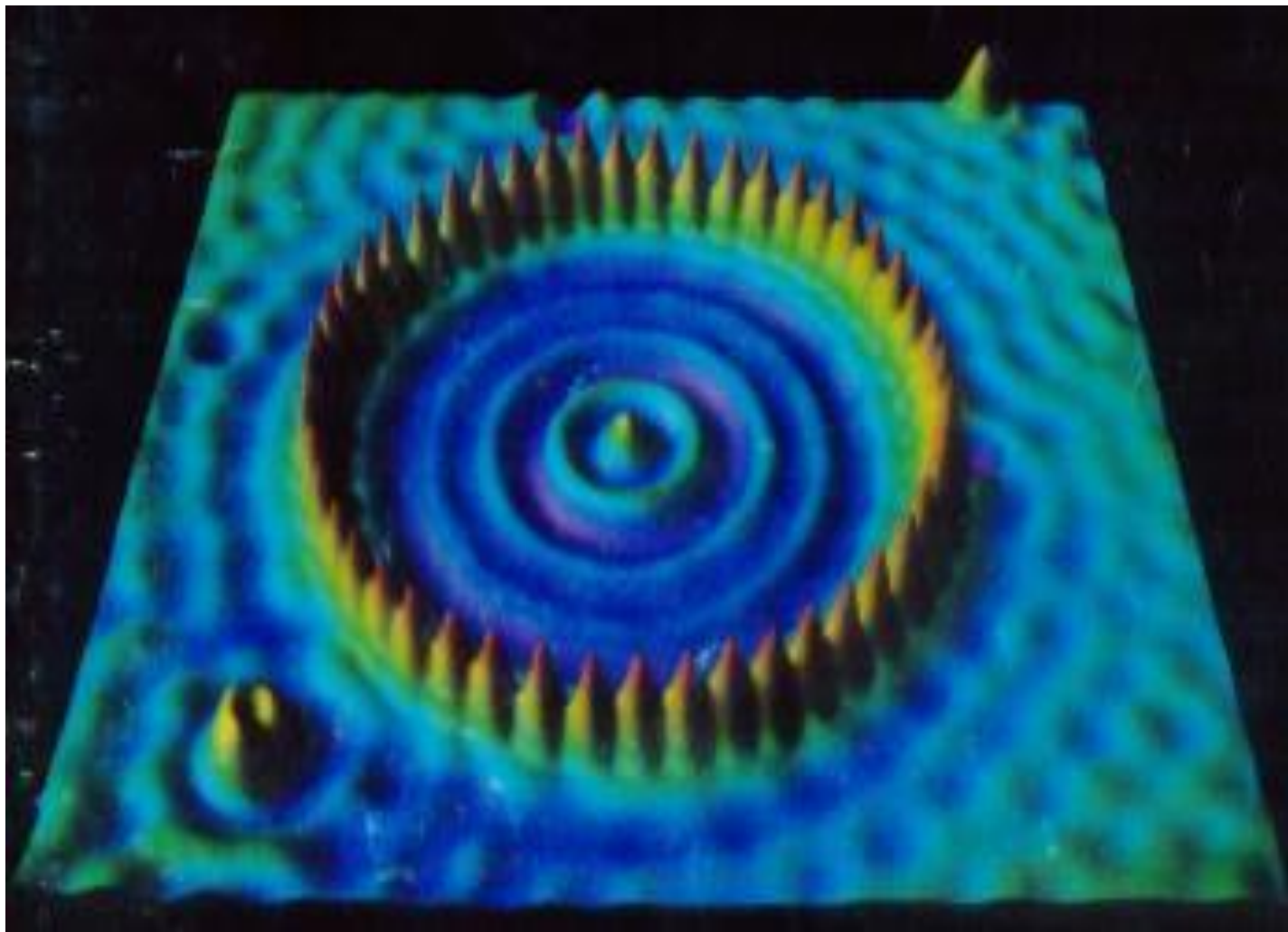
“如果我们能够最终发展出对我们所制备及要制备的物质进行原子水平观察的能力的话,对解决化学及生物学问题将有巨大助益。而我相信这一能力的实现是不可避免的。”





1991年恩格勒等用STM在镍单晶表面逐个移动氩原子，拼成了字母IBM，每个字母长5纳米。

移动分子实验的成功，表明人们朝着用单一原子和小分子构成新分子的目标又前进了一步，其内在意义目前尚无法估量。



镶嵌了48个Fe原子的Cu表面的STM照片

48个Fe原子形成“量子围栏”，围栏中的电子形成驻波。

Fe原子间距：0.95 nm，圆圈平均半径：7.13 nm

27.4 谐振子

平衡位置附近的微振动可近似认为是简谐振动。例如，原子核内质子和中子的振动、原子和分子的振动、固体晶格离子的振动等。

选平衡位置为坐标原点和势能零点，简谐振子能量本征方程为 $\lim_{|x| \rightarrow \infty} U(x) = \infty$

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

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

本征态是束缚态： $\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \Psi(x) = 0$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi = 0$$

采用级数解法。结果如下：

1、 简谐振子的能量

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2} \right) h \nu$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_0 = \frac{1}{2} h \nu, \quad E_1 = \frac{3}{2} h \nu, \quad E_2 = \frac{5}{2} h \nu, \dots$$

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega = (n + 1/2)h\nu$$

(1)量子化，等间距： $\Delta E = h\nu$

分子振动 $\Delta E \sim (10^{-2} - 10^{-1} \text{ eV}) > kT$ (室温),
所以，室温下分子可视为刚性。

(2)有零点能： $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$ ，符合不确定度关系

(3) 当 $n \rightarrow \infty$ 时， $\Delta E / E_n \rightarrow 0$ ，量子化 \rightarrow 连续

(宏观振子能量相应 $n \sim 10^{25}$ ， $\Delta E \sim 10^{-33} \text{ J}$)

符合玻尔对应原理。

2、简谐振子的本征波函数

$$\Phi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2n\sqrt{\pi n!}} \right)^{1/2} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

H_n 是厄密 (Hermite) 多项式, 最高阶是 $(\alpha x)^n$,

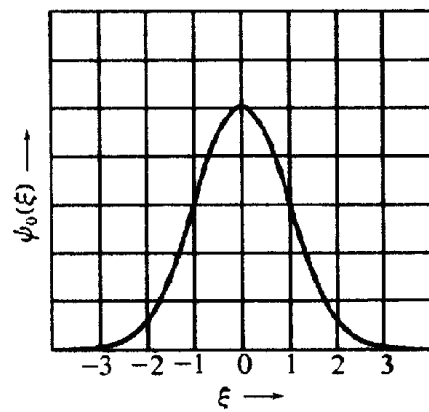
$$\Phi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

$$\Phi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \cdot 2(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

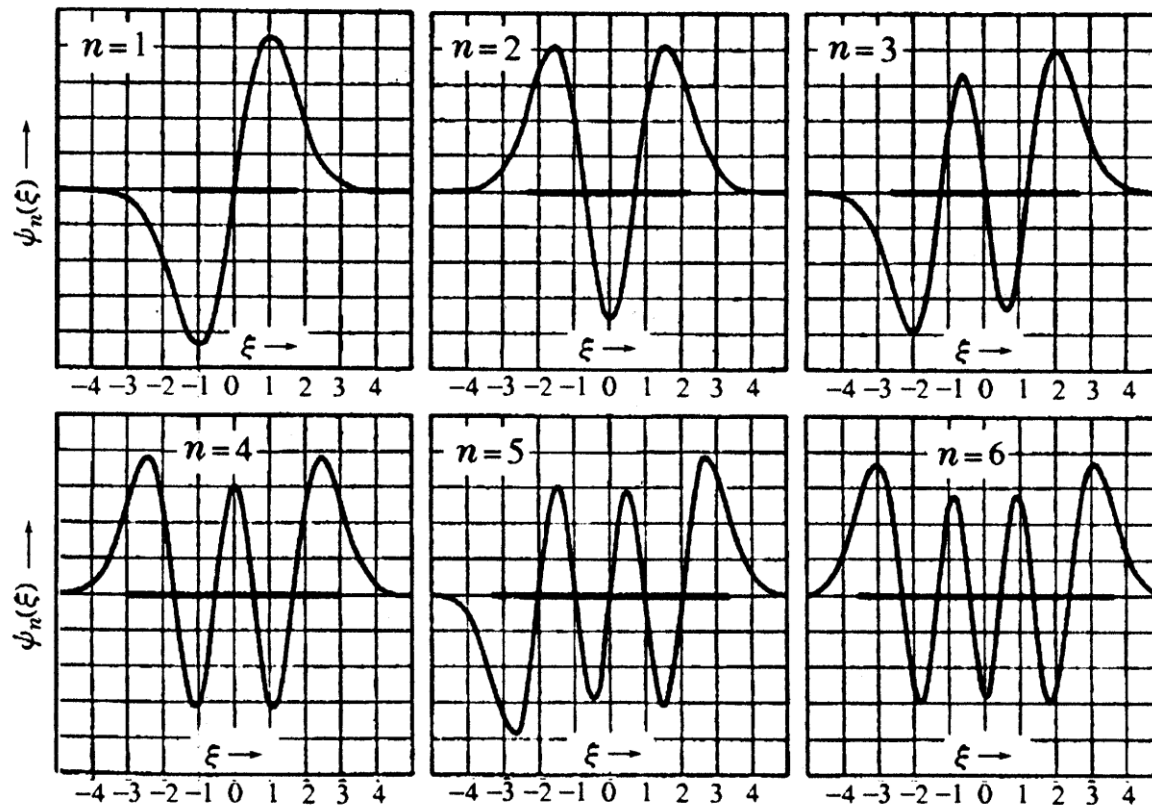
$$\Phi_2(x) = \left(\frac{\alpha}{8\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} [2 - 4(\alpha x)^2] e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

⋮

⋮



$n = 0$

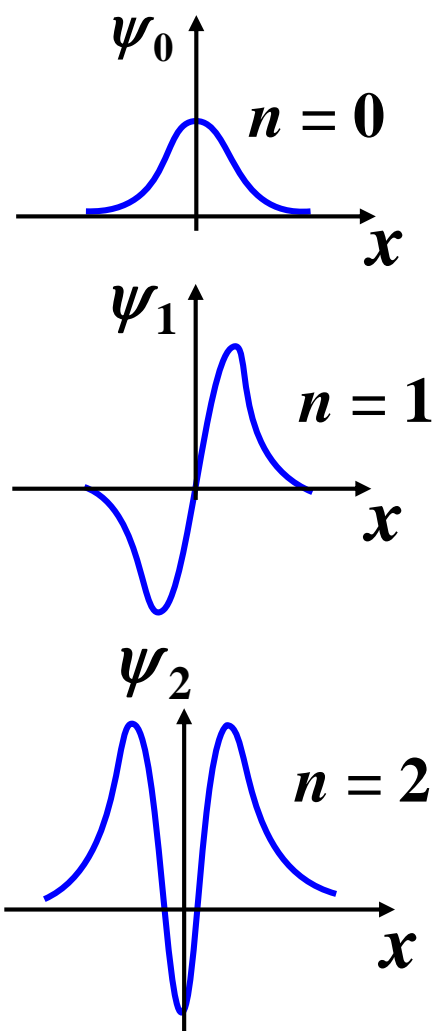


$$\xi = \alpha x$$

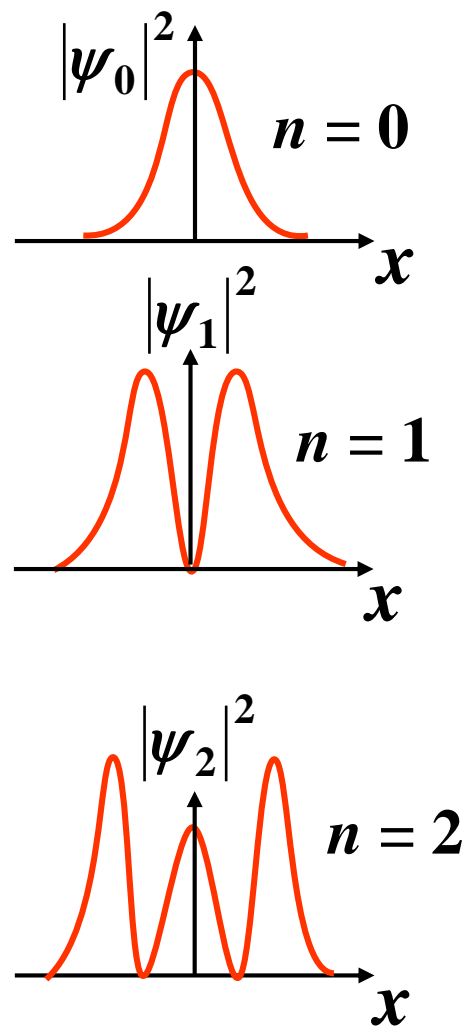
$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

3、概率密度

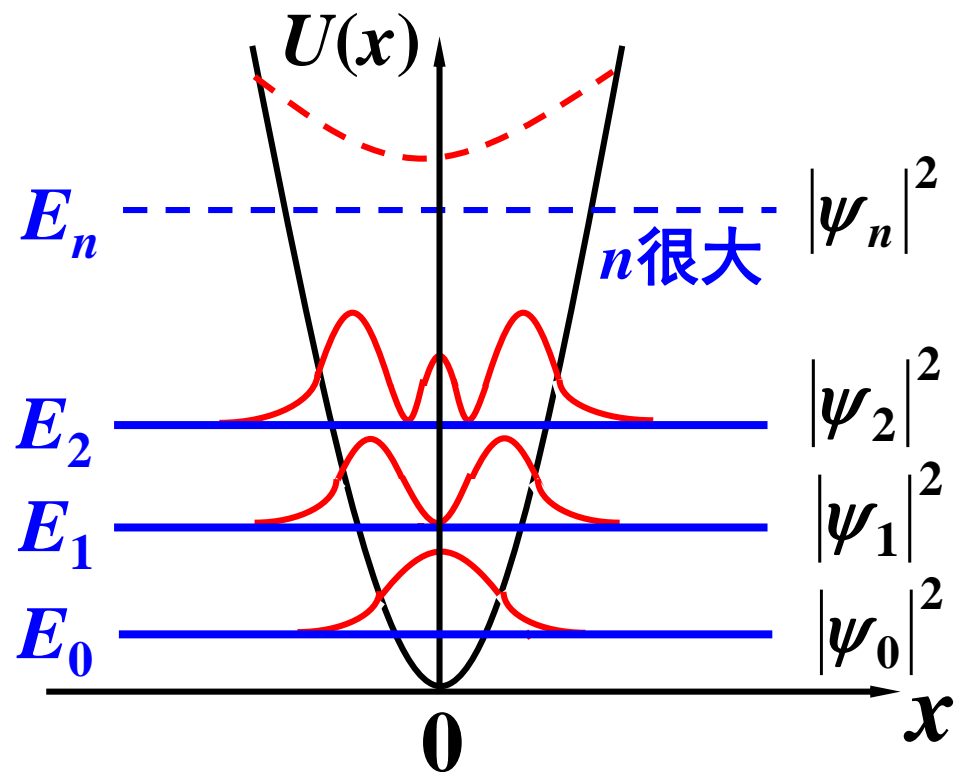
波函数



概率密度



概率密度的特点：

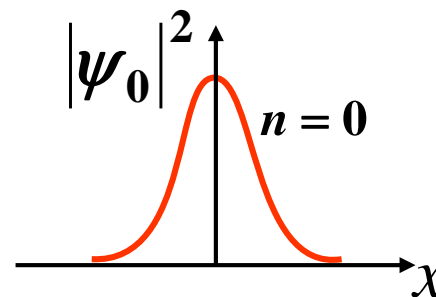


(1) 概率在 $E < U$ 区仍有分布 — 量子效应

(2) n 小时, 概率分布与经典谐振子完全不同

例如基态位置概率分布在 $x = 0$ 处最大,

$$W_0(x) = |\psi_0(x)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2}$$



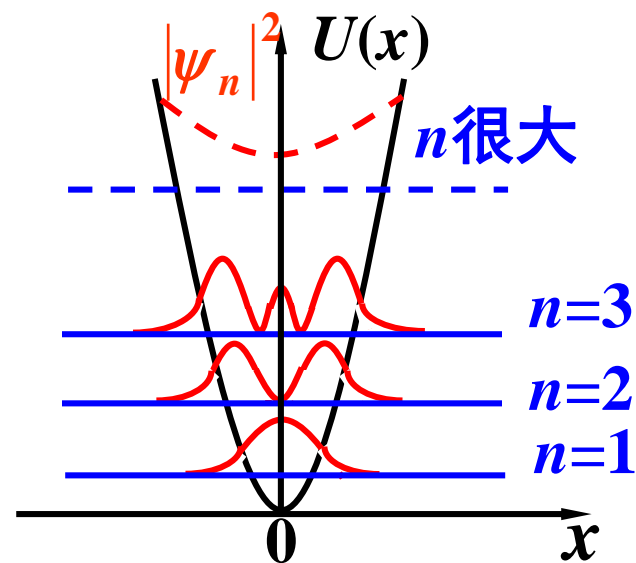
经典振子在 $x = 0$ 处概率最小。

(3) 当 $n \rightarrow \infty$ 时,

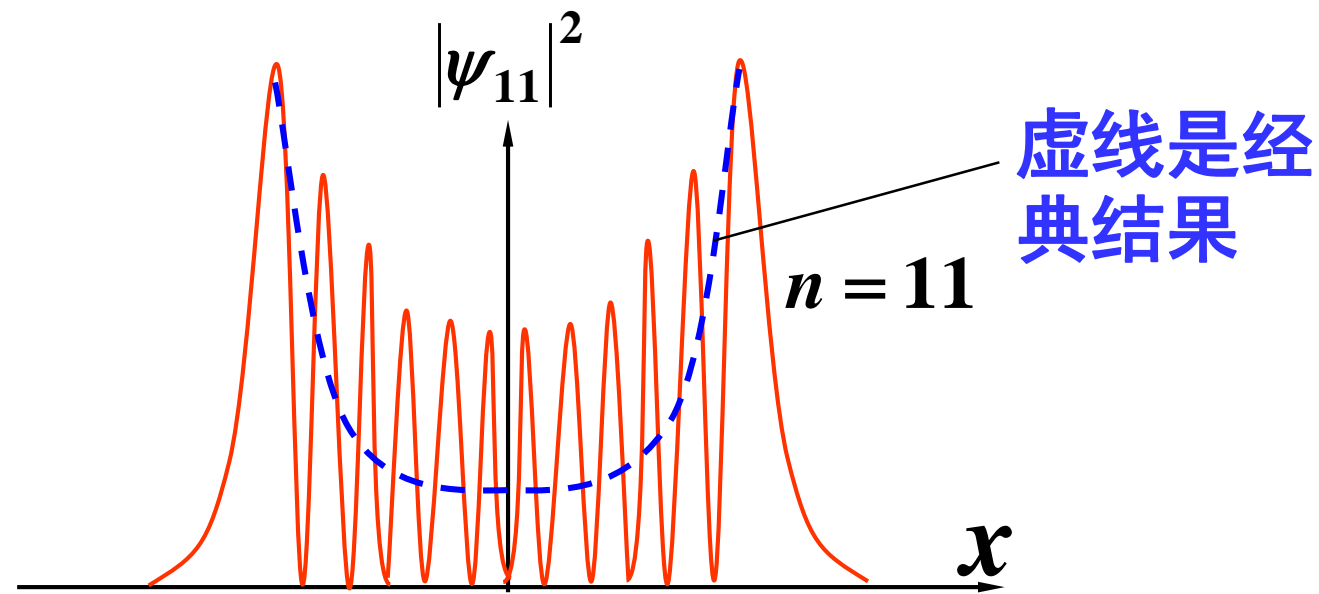
量子概率分布

→ 经典概率分布,

符合玻尔对应原理。



简谐振子 $n=11$ 时的概率密度分布：



经典简谐振子在原点速度最大，停留时间短，
粒子出现的概率小；振子在两端速度为零，
出现的概率最大。

可以验证，简谐振子的能量本征函数系也是完备的，也满足正交、归一化条件：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_m^*(x) \Phi_n(x) dx = \delta_{m,n} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}$$

任何满足适当边界条件和连续性要求的波函数，均可用这个函数系作展开

$$\Psi(x,t) = \sum_n C_n \Phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$
$$C_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n^*(x) \Psi(x,0) dx$$

例27.3 一个质量为m的粒子在一维势场

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0 \\ \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2, & x > 0 \end{cases}$$

中运动，求其能级。

解:

$$x > 0,$$

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

$$\Psi|_{x=0} = 0$$



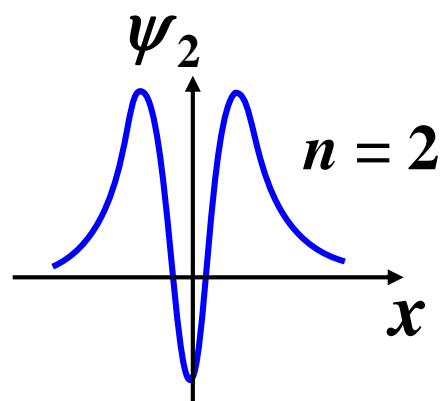
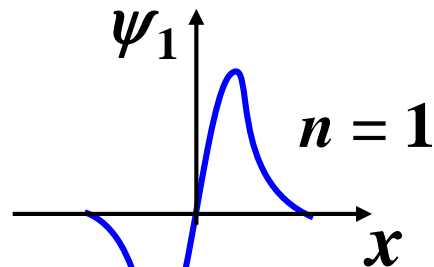
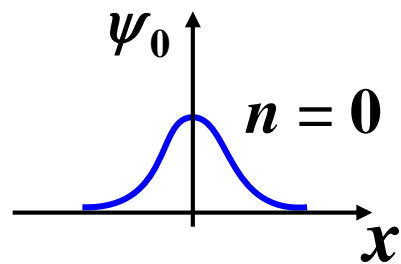
$$n = 2m + 1$$



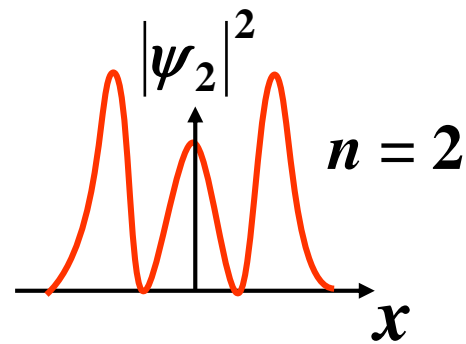
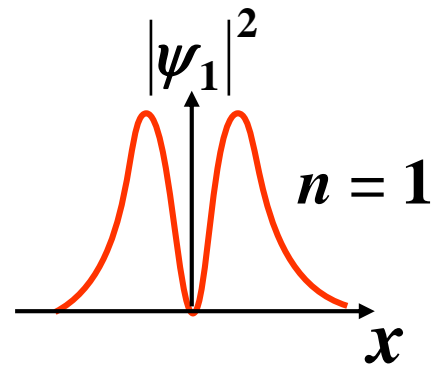
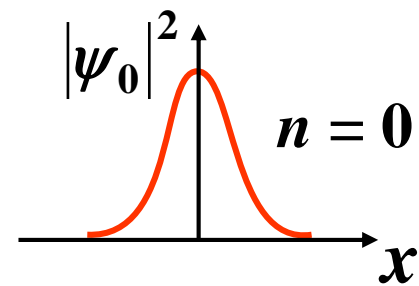
$$E = \left(2m + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega$$

$$m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

波函数



概率密度



第27章结束