



量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

光电科学与工程学院 王智勇

第五章：求解定态薛定谔方程

第三讲：势垒贯穿 (量子隧道效应)

1. 简要回顾

当势能 $V(\mathbf{r})$ 与时间 t 无关时，可以通过分离变量将薛定谔方程变成定态薛定谔方程形式（实为能量的本征方程），对应的解称为定态解

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\xrightarrow{\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

- 1) 当势能 $V(\mathbf{r})$ 是实数时，定态波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 总可以表达为实函数；
- 2) $\psi(\mathbf{r})$ 是单值的、有限的；
- 3) $\psi(\mathbf{r})$ 与它的一阶导数都是处处连续的。

定态的特点

- (1) 定态的几率密度和几率流密度都与时间无关，即粒子在空间中的概率分布不随时间变化

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar) \Rightarrow \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) = \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

- (2) 任何不显含时间的力学量，其平均值与时间无关
(因而定态的能量具有确定值)

$$\bar{F} = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{F} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \int \psi^*(\mathbf{r}) \hat{F} \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

2. 从束缚态到散射态

量子力学的定态研究对象有两类：束缚态和散射态

► **束缚态**：前面讲过的定态实例，是在势阱中的束缚态，其特点是波函数在无穷远处为零(即粒子只在有限区域内出现的概率不为零，或者说粒子的运动被限制在有限的空间范围内)；束缚态的能量是分立的。

➤ **散射态**：定态实例中除了束缚态问题，还有非束缚态问题。**非束缚态又称为散射态**，是能量连续分布的态，波函数可以表达为平面波的叠加，波函数在无穷远处不为零，是扩展态。

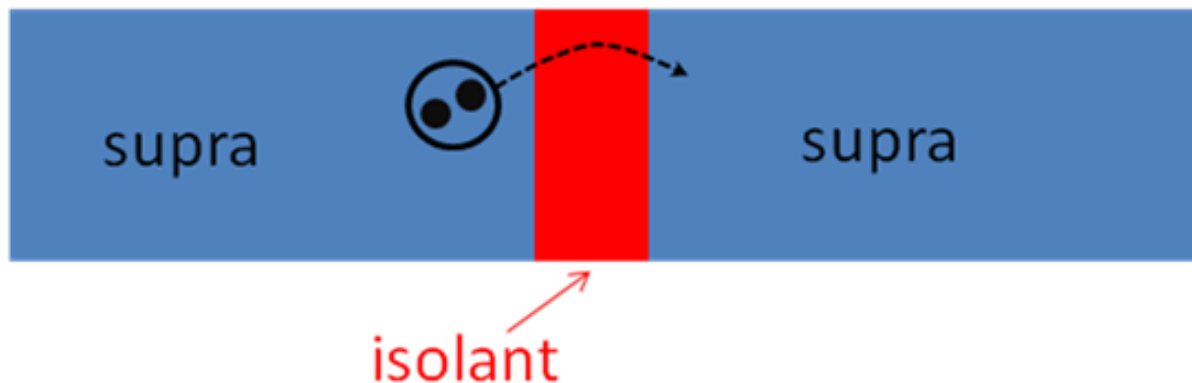
➤ 一个典型的散射态，即是我们即将讲到的势垒贯穿的粒子状态，它也明显地表现出量子效应（**注意：这类问题中，粒子的能量是预先确定的**）。

为了简单计，下面我们将以一维势垒贯穿问题为例

3. 一维势垒贯穿问题

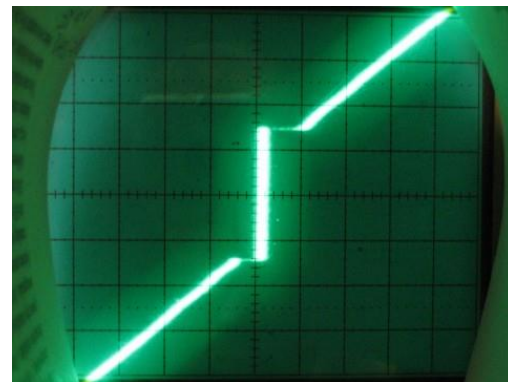
1962年，年仅22岁的研究生约瑟夫森(B. Josephson)通过量子理论计算预言：中间用薄绝缘体隔开的两超导体之间存在超导电流，这种宏观的量子效应在其后几年就被实验测量到。

获1973年诺贝尔物理学奖



Josephson effect

超导电子学
超导量子计算
超导量子干涉仪



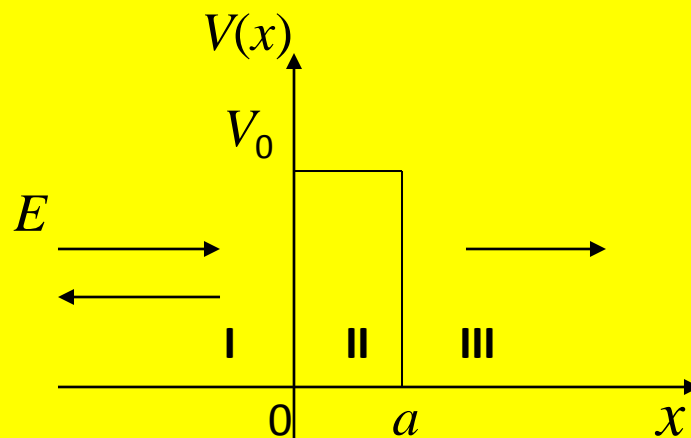
Josephson Junction

什么是一维势垒贯穿问题？

它是入射粒子被势垒散射时的一维运动问题。典型势垒是方形势垒，其定义如下：

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0, \text{ or } x > a \end{cases}$$

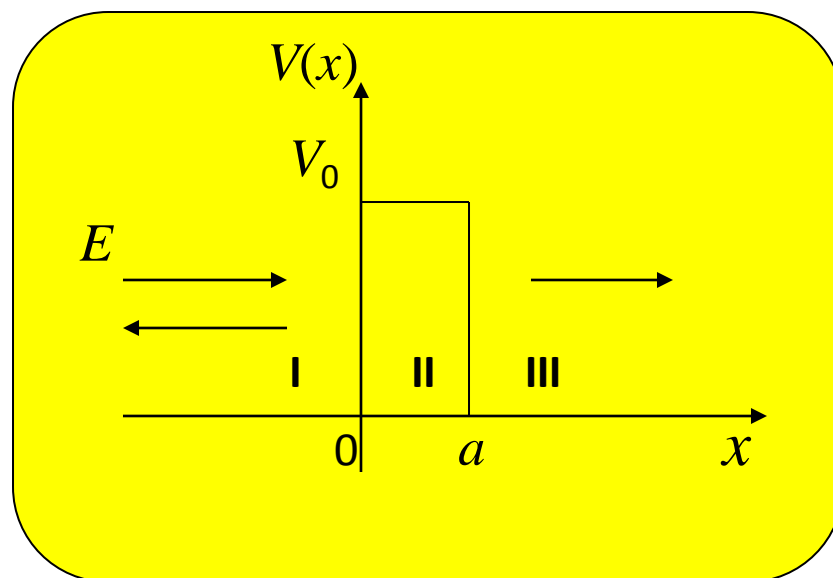
已知粒子以能量 E 沿 x 正向入射



势垒：经典力学 vs 量子力学

➤ 当 $E > V_0$ 时，如果按照经典力学理论，粒子应该完全穿透势垒，无反射；但是量子力学将告诉我们，粒子既有穿透的可能，又有反射的可能。

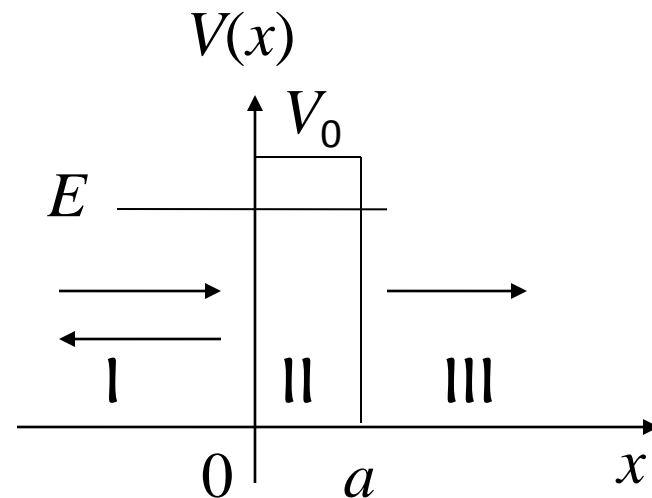
➤ 当 $E < V_0$ 时，如果按照经典力学理论，粒子应该完全被反射，不能穿透势垒；但是量子力学将告诉我们，粒子既有反射的可能，又有透射的可能。



3.1、计算过程

(1) 方形势垒

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0, \text{ or } x > a \end{cases}$$



(2) 哈密顿算符(位置表象下) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

为了研究入射粒子遇到势垒时的反射与透射情况，即研究入射粒子在区域 I 和 III 中出现的可能性，考虑到满足薛定谔方程的波函数对应粒子在空间出现的几率幅，因此我们通过求解，进而研究代表粒子在区域 I 和 III 中出现的概率的反射系数与透射系数，尤其是后者。

(3) 定态薛定谔方程可以表达为

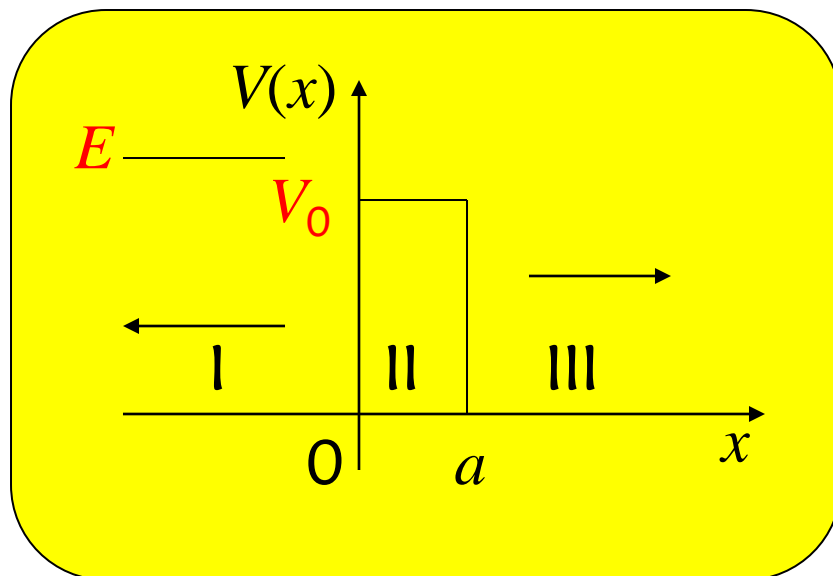
$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E\psi = 0, & x < 0, x > a \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V_0)\psi = 0, & 0 < x < a \end{cases}$$

(4) 解方程

$E > V_0$ 的情形

令 $k_1 = (2\mu E / \hbar^2)^{1/2}$

$$k_2 = [2\mu(E - V_0) / \hbar^2]^{1/2}$$



则方程变为

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0, & x < 0, x > a \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + k_2^2\psi = 0, & 0 < x < a \end{cases}$$

$$k_1^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

$$k_2^2 = \frac{2\mu(E - V_0)}{\hbar^2}$$

方程的通解为

向右传播的入射波

向左传播的反射波

分区求解

$$\begin{cases} \psi_{\text{I}} = A \exp(ik_1x) + A' \exp(-ik_1x), & x < 0, \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \psi_{\text{II}} = B \exp(ik_2x) + B' \exp(-ik_2x), & 0 < x < a, \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} \psi_{\text{III}} = C \exp(ik_1x) + C' \exp(-ik_1x), & x > a, \end{cases} \quad (3)$$

由左向右的透射波

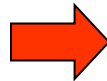
因III区无由右向左传播的平面波，故 $C' = 0$

由边界条件确定系数

$$\begin{cases} \psi_{\text{I}} = A \exp(ik_1 x) + A' \exp(-ik_1 x), & x < 0, & (1) \\ \psi_{\text{II}} = B \exp(ik_2 x) + B' \exp(-ik_2 x), & 0 < x < a, & (2) \\ \psi_{\text{III}} = C \exp(ik_1 x), & x > a, & (3) \end{cases}$$

由波函数的连续性条件

$$\begin{cases} \psi_{\text{I}}|_{x=0} = \psi_{\text{II}}|_{x=0} \\ \left. \frac{d\psi_{\text{I}}}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_{\text{II}}}{dx} \right|_{x=0} \\ \psi_{\text{II}}|_{x=a} = \psi_{\text{III}}|_{x=a} \\ \left. \frac{d\psi_{\text{II}}}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{\text{III}}}{dx} \right|_{x=a} \end{cases}$$



$$\begin{cases} A + A' = B + B' \\ k_1 A - k_1 A' = k_2 B - k_2 B' \\ B \exp(ik_2 a) + B' \exp(-ik_2 a) \\ = C \exp(ik_1 a) \\ k_2 B \exp(ik_2 a) - k_2 B' \exp(-ik_2 a) \\ = k_1 C \exp(ik_1 a) \end{cases}$$

消去 B 和 B' ,并设 A 已知, 可得透射波振幅 C 与入射波振幅 A 之间的关系为:

$$C = \frac{4k_1 k_2 \exp(-ik_1 a)}{(k_1 + k_2)^2 \exp(-ik_2 a) - (k_1 - k_2)^2 \exp(ik_2 a)} A, \quad (4)$$

以及反射波振幅 A' 与入射波振幅 A 间的关系

$$A' = \frac{2i(k_1^2 - k_2^2) \sin ak_2}{(k_1 - k_2)^2 \exp(ik_2 a) - (k_1 + k_2)^2 \exp(-ik_2 a)} A, \quad (5)$$

利用概率流密度公式:

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

求得入射波 $A \exp(ik_1 x)$
的概率流密度



$$J_{\text{In}} = \frac{\hbar k_1}{\mu} |A|^2$$

透射波 $C \exp(ik_1 x)$
的概率流密度



$$J_{\text{T}} = \frac{\hbar k_1}{\mu} |C|^2$$

反射波 $A' \exp(-ik_1 x)$
的概率流密度



$$J_{\text{R}} = -\frac{\hbar k_1}{\mu} |A'|^2$$

透射系数和反射系数

为了描述入射粒子遇到势垒时的透射概率和反射概率，定义透射系数和反射系数。

透射
系数

$$T = \frac{J_T}{J_{\text{In}}} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2 + 4k_1^2 k_2^2} \quad (6)$$

反射
系数

$$R = \frac{|J_R|}{J_{\text{In}}} = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2 + 4k_1^2 k_2^2} \quad (7)$$

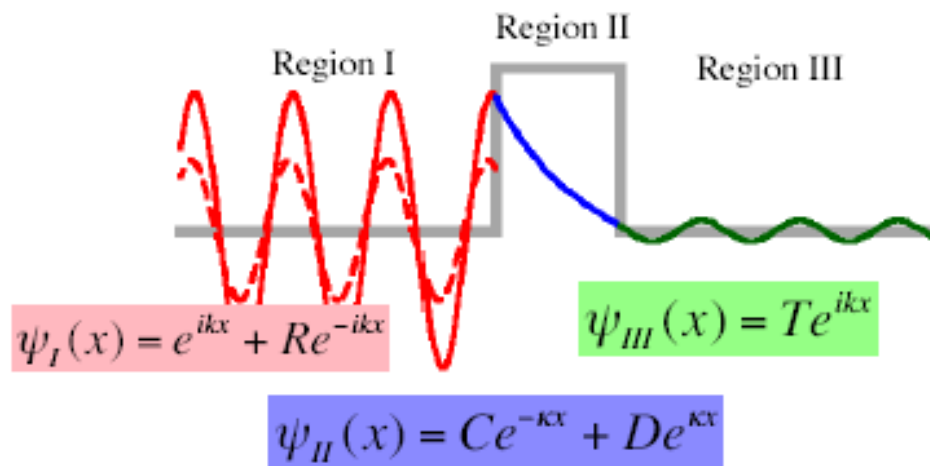
以上二式说明入射粒子部分地隧穿势垒($0 < x < a$)到达第III区域，另一部分则被势垒反射回来I区。

$$T + R = 1 \quad \text{表明概率守恒}$$

以上求解结果的适用性，不依赖于 $(E - V_0)$ 是正还是负，因此上述结果对 $E - V_0 < 0$ 的情况也成立

$E < V_0$ 的情形

$k_2 = [2\mu(E - V_0)/\hbar^2]^{1/2}$ 是虚数



令 $k_2 = i\kappa$

其中 $\kappa = [2\mu(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$ 是实数

(注：上图中的表达符号与正文不同)

在(6)和(7)式中，把 k_2 换为 $i\kappa$ ，得

透射系数

反射系数

$$T = \frac{4k_1^2 \kappa^2}{(k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4k_1^2 \kappa^2}, \quad R = \frac{(k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a}{(k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4k_1^2 \kappa^2}$$

$$k_2^2 = -\kappa^2, \quad \sin(i\theta) = i \sinh \theta$$

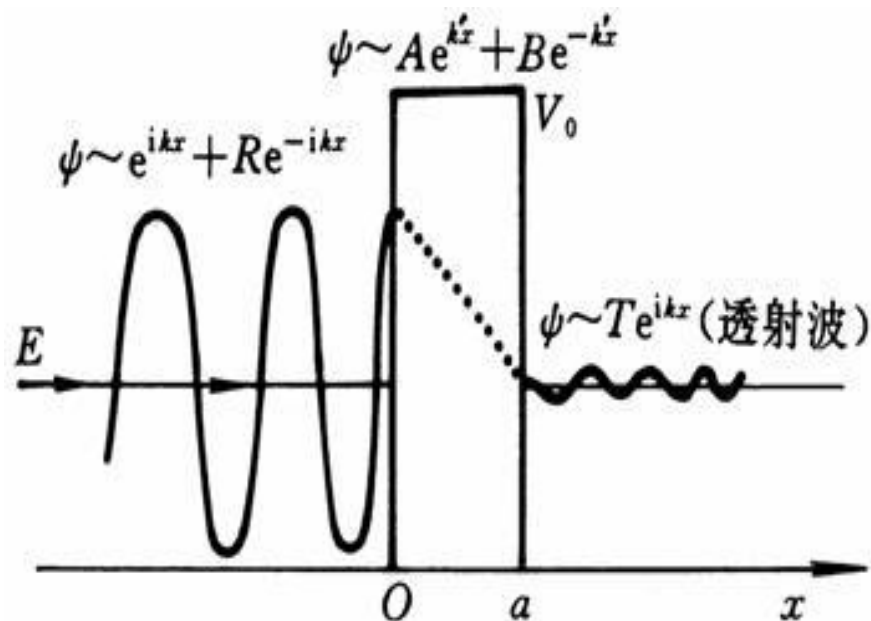
透射系数

$$T = \frac{4k_1^2 \kappa^2}{(k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4k_1^2 \kappa^2}, \quad R = \frac{(k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a}{(k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4k_1^2 \kappa^2}$$

反射系数

这说明，即使 $E < V_0$ ，也有大于零的透射系数 T 。

这种粒子能够穿透比它动能还要高的势垒而不失去能量的现象称为量子隧道效应 (tunnel effect)。它是粒子具有波动性的生动表现。(右图中的 k' 相当于 κ ， k 相当于 k_1 ，反射系数是 $|R|^2$ ，透射系数是 $|T|^2$)



(注：上图中的表达符号与正文不同)

(5) 讨论

即势垒又高又宽

1. 低能粒子穿透

当 E 很小, 或 $V_0 \gg E$, 而 a 又不太小时, 有 $\kappa a \gg 1$, 则

$$\exp(\kappa a) \gg \exp(-\kappa a) \Rightarrow \sinh^2 \kappa a = \left[\frac{\exp(\kappa a) - \exp(-\kappa a)}{2} \right]^2 \approx \frac{1}{4} \exp(2\kappa a)$$

透射系数

$$T = \frac{4}{\frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{\kappa} + \frac{\kappa}{k_1} \right)^2 \exp(2\kappa a) + 4}$$

$$\because \frac{k_1}{\kappa} + \frac{\kappa}{k_1} \geq 2 \sqrt{\frac{k_1}{\kappa} \frac{\kappa}{k_1}} = 2, \quad \exp(2\kappa a) \gg 1,$$

左式分母中求和的4可以忽略, 于是有

$$T = T_0 \exp(-2\kappa a) = T_0 \exp[-2a \sqrt{2\mu(V_0 - E)}/\hbar], \quad \kappa a \gg 1$$

$$\text{其中 } T_0 = 16 \left(\frac{k_1}{\kappa} + \frac{\kappa}{k_1} \right)^{-2} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}$$

表明 T 随垒宽 a 和垒高 V_0 的增大而呈指数减小。

举例说明

入射粒子为电子

设 $E=1\text{eV}$, $V_0=2\text{eV}$,
 $a=2\times 10^{-10}\text{m}=2\text{\AA}$,
算得 $T\approx 0.51$ 。

若入射
粒子换
成质子

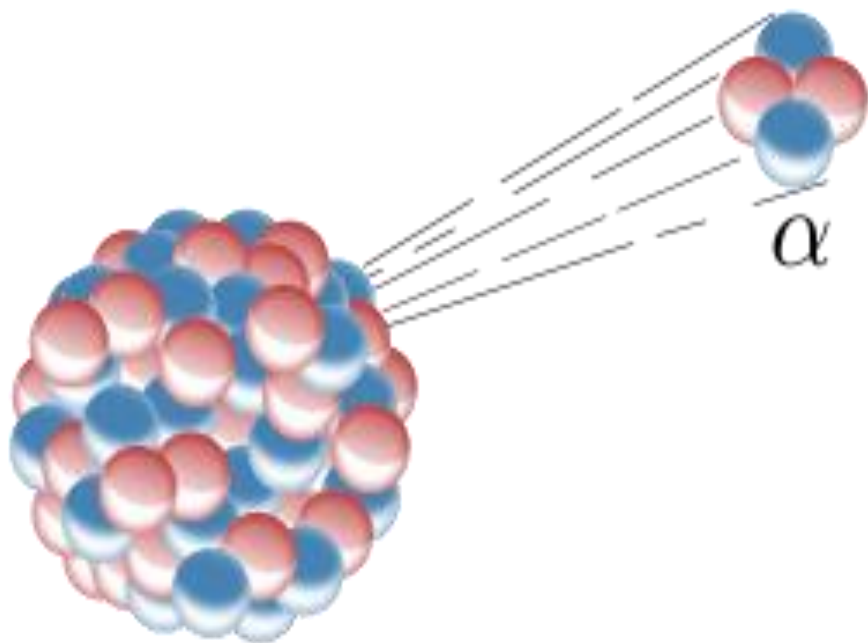
质子与电子质量比
 $\mu_p/\mu_e\approx 1840$,
对于 $a=2\text{\AA}$, 有
 $T\approx 2\times 10^{-38}$ 。

若势垒
宽度改
变

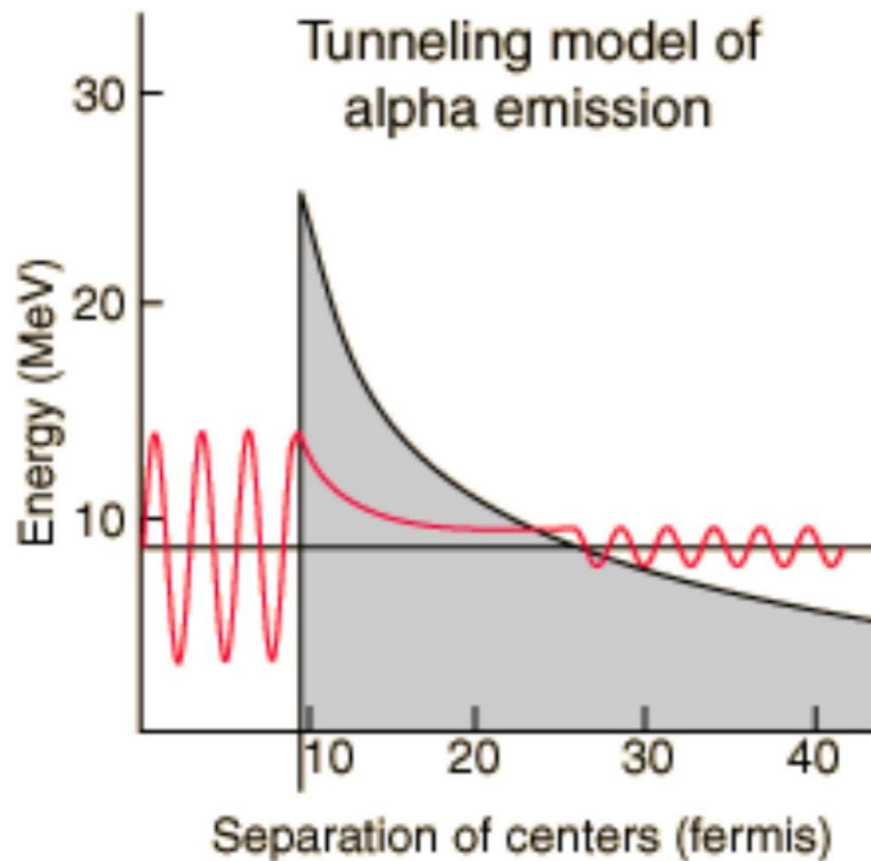
若 $a=5\times 10^{-10}\text{m}=5\text{\AA}$,
则 $T\approx 0.024$, 可见
透射系数迅速减小。

可见，透射系数明显地依赖于粒子的
质量(因而入射能量)和势垒的宽度。

量子力学提出后，Gamow
首先用势垒穿透成功的说明了
放射性元素的 α 衰变现象。



α衰变的理论解释



1928年，乔治·伽莫夫解释原子核α衰变的模型，
借助这模型，导引出粒子半衰期与能量关系的方程式

2. 共振输运

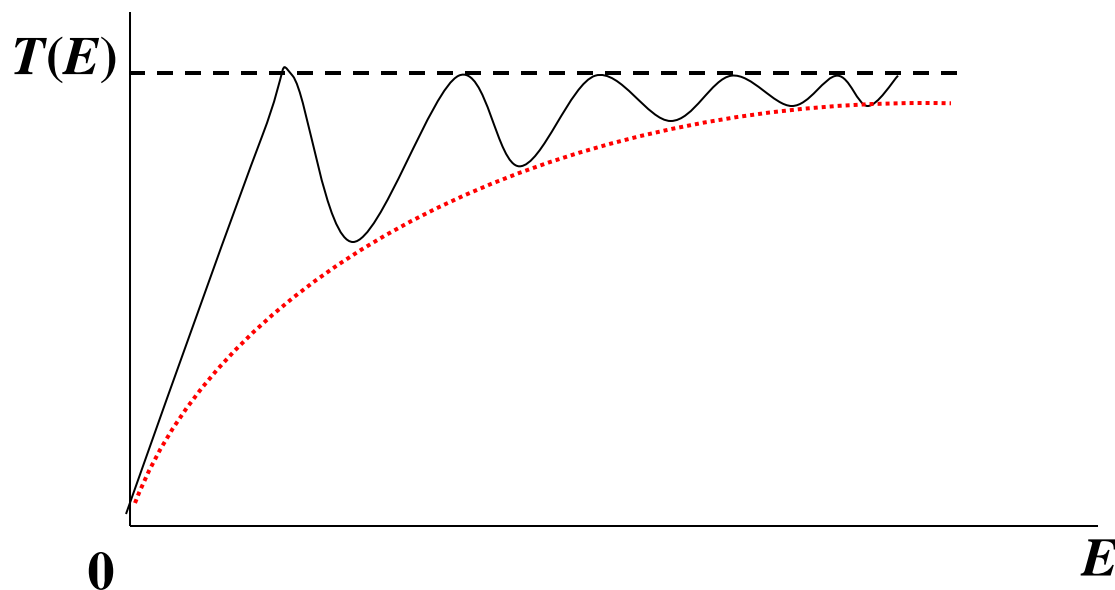
对于单个势垒，只适用于 $E \geq V_0$ 的情形

透射
系数

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2 + 4k_1^2 k_2^2}$$

$$\sin ak_2 = 0 \Rightarrow T = T_{\max} = 1 \quad (\text{共振现象})$$

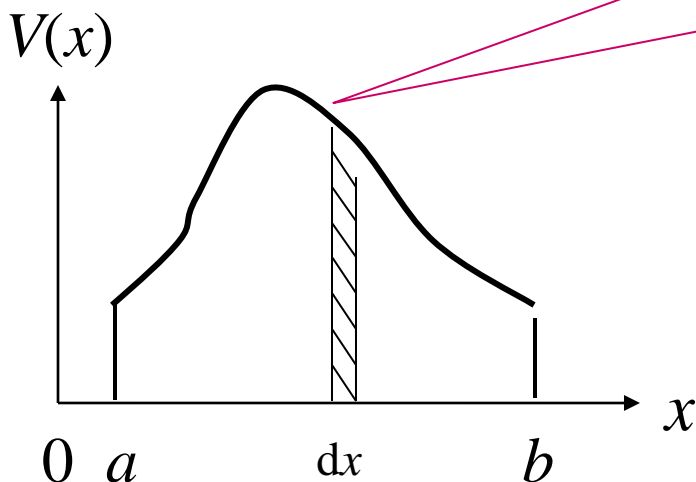
$$\Rightarrow ak_2 = a[2\mu(E - V_0)/\hbar^2]^{1/2} = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



如果是双势垒
或者多势垒周
期性排列，还
会存在共振的
量子隧道效应。

3. 任意形状的势垒

可把任意形状的势垒分割成多个无限窄的势垒，每一个无限窄势垒近似用方势垒处理。



每一窄方势垒透射系数近似为

$$T = T_0 \exp\{-2\sqrt{2\mu[V(x) - E]}dx/\hbar\}$$

即采用了又高又宽的势垒近似。则贯穿整个势垒的透射系数，等于贯穿这些窄方势垒透射系数之积，即

$$T = T_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2\mu[V(x) - E]}dx\right\}$$

此式的推导虽不太严格，但与严格推导的结果一致。

进一步的启发性思考

在经典力学中量子隧道效应是无法理解的，因为当粒子进入到势垒内部时，粒子的总能量小于势垒： $E < V_0$ ，因此粒子的动能为负，而动量为虚数，这是不允许的。

但按照量子力学理论，这是允许的，这一现象是可以理解的，这是由于微观粒子具有波动性的表现。(联想到截止波导中的电磁波，它沿波导方向上的波数是虚数)

$$E = p^2 / 2\mu + V_0, E < V_0 \Rightarrow p^2 / 2\mu < 0$$

$$p = \sqrt{2\mu(E - V_0)}, E < V_0 \Rightarrow p \text{ is an imaginary number}$$

$$E = p^2/2\mu + V(x)$$

由于坐标与动量算符不对易，势能与动能算符不对易，即势能与动能不能同时确定，因此说“粒子在某一点的能量等于动能与势能之和”，是没有意义的。只能说粒子在给定量子力学状态下的平均总能量，等于平均动能与平均势能之和，而在一个态上求平均时，要对变量的整个区域求积分。

当粒子在势垒范围内被激发时，根据测不准关系，粒子的动能就在某一范围内不确定，这个不确定度可计算如下：

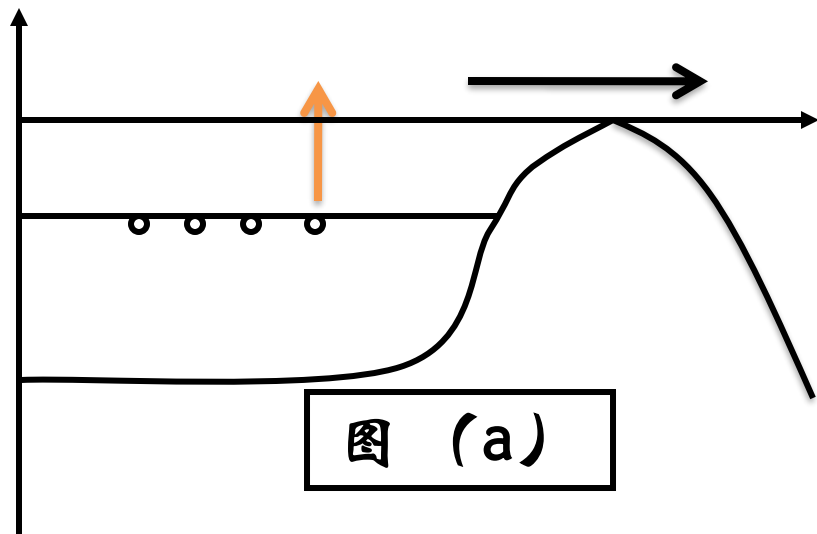
$$\Delta x \leq a, \overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} \geq \hbar^2/4 \Rightarrow$$

$$\overline{(\Delta p)^2} \geq \hbar^2/2a^2, \Delta T = \overline{(\Delta p_x)^2}/2\mu \geq \hbar^2/8\mu a^2$$

量子隧穿概率的指数变化规律，具有诸多技术应用。通过控制相关参数，让信号按照指数规律的衰减或者放大，可以实现开关技术、放大器技术、传感器技术、量子隧道显微镜技术，等等。通过光子的量子隧穿效应，还可以克服衍射极限，更有利于实现器件的微型化和集成化，在纳米技术中有广泛应用。例如，与光子的量子隧穿效应所对应的表面等离子体激元，是纳米光子学的核心概念。

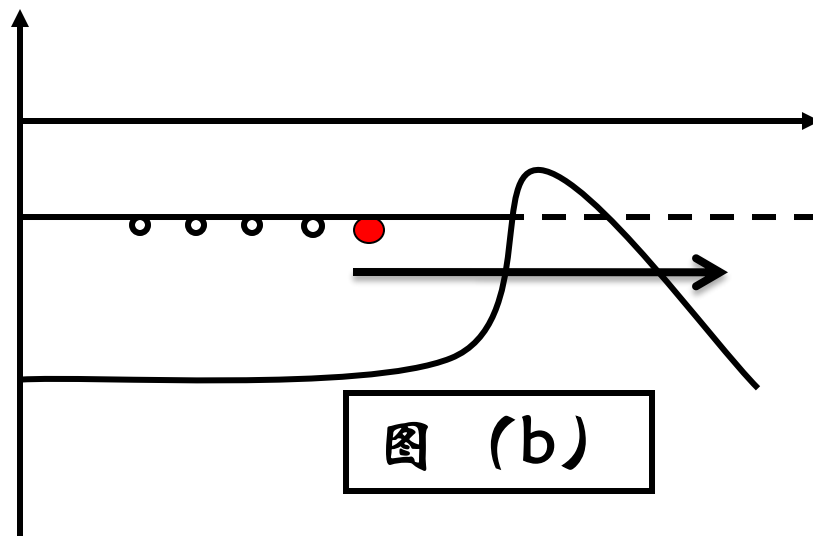
与势垒贯穿相关的科技(课外阅读)

1. 场致发射 (冷发射)



欲使金属发射电子，
可以将金属加热或用光照射
给电子提供能量，这就是
我们所熟知的**热发射**和
光电效应。

但是，施加一个**外电场**，
金属中电子的所感受到的电
势如图(b)所示。金属中电子
面对一个势垒，能量最大的
电子就能通过隧道效应穿过
势垒漏出，从而导致所谓**场
致电子发射**。



2. 隧道二极管

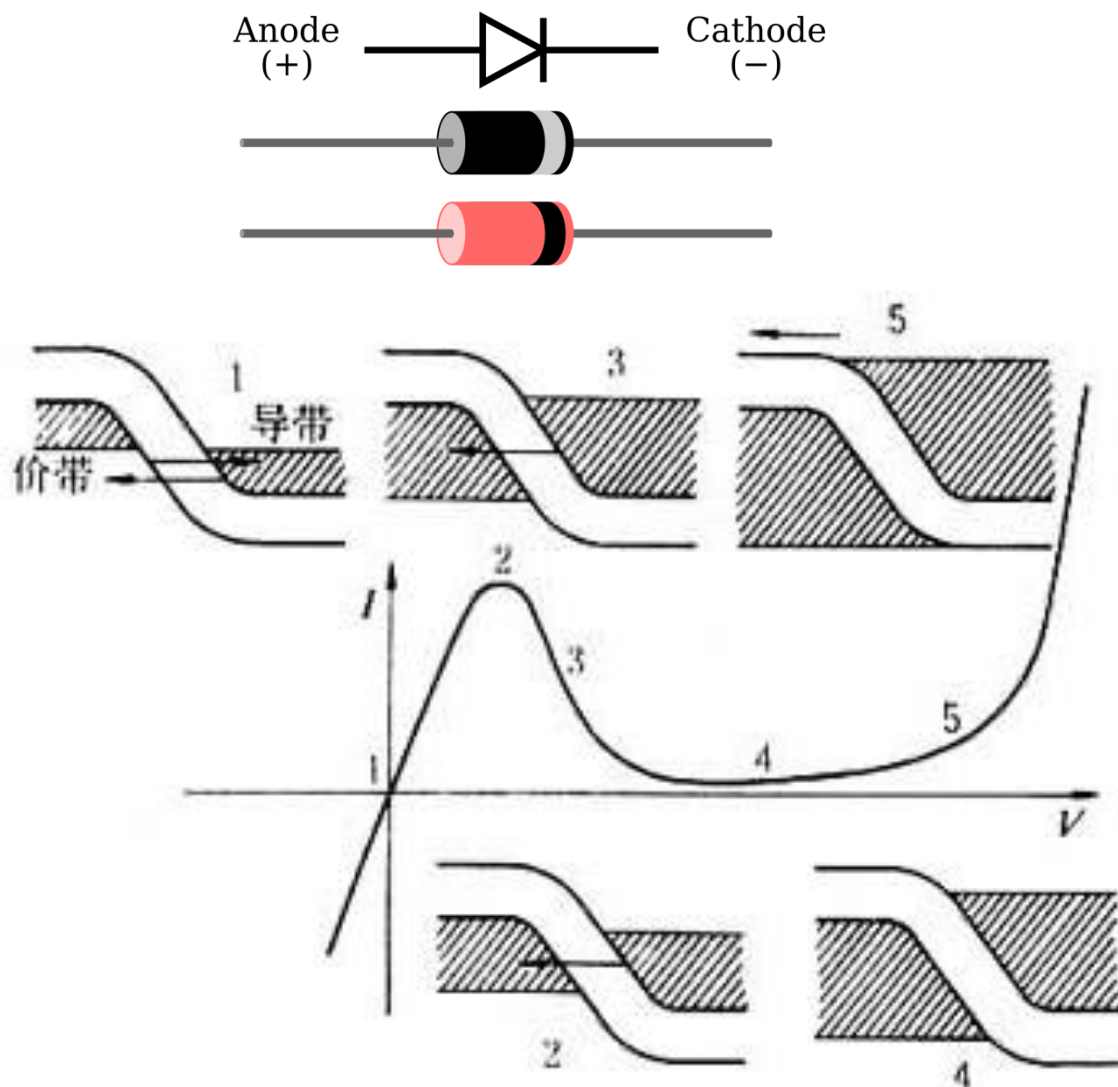


图2 隧道二极管伏安特性曲线

1957年江崎玲於奈发明隧道二极管。它是高掺杂半导体形成的窄的PN结；

当加前向偏压时，N区电子可以通过隧道效应，穿过禁带进入P区空带。随偏压增大，隧道电流变大；随后到达极大值然后逐渐下降（因为可进入空态减少），最后下降到零（空态没了）

这种电流随电压增大反而变小的现象称为负微分电导效应

1973年诺贝尔物理学奖

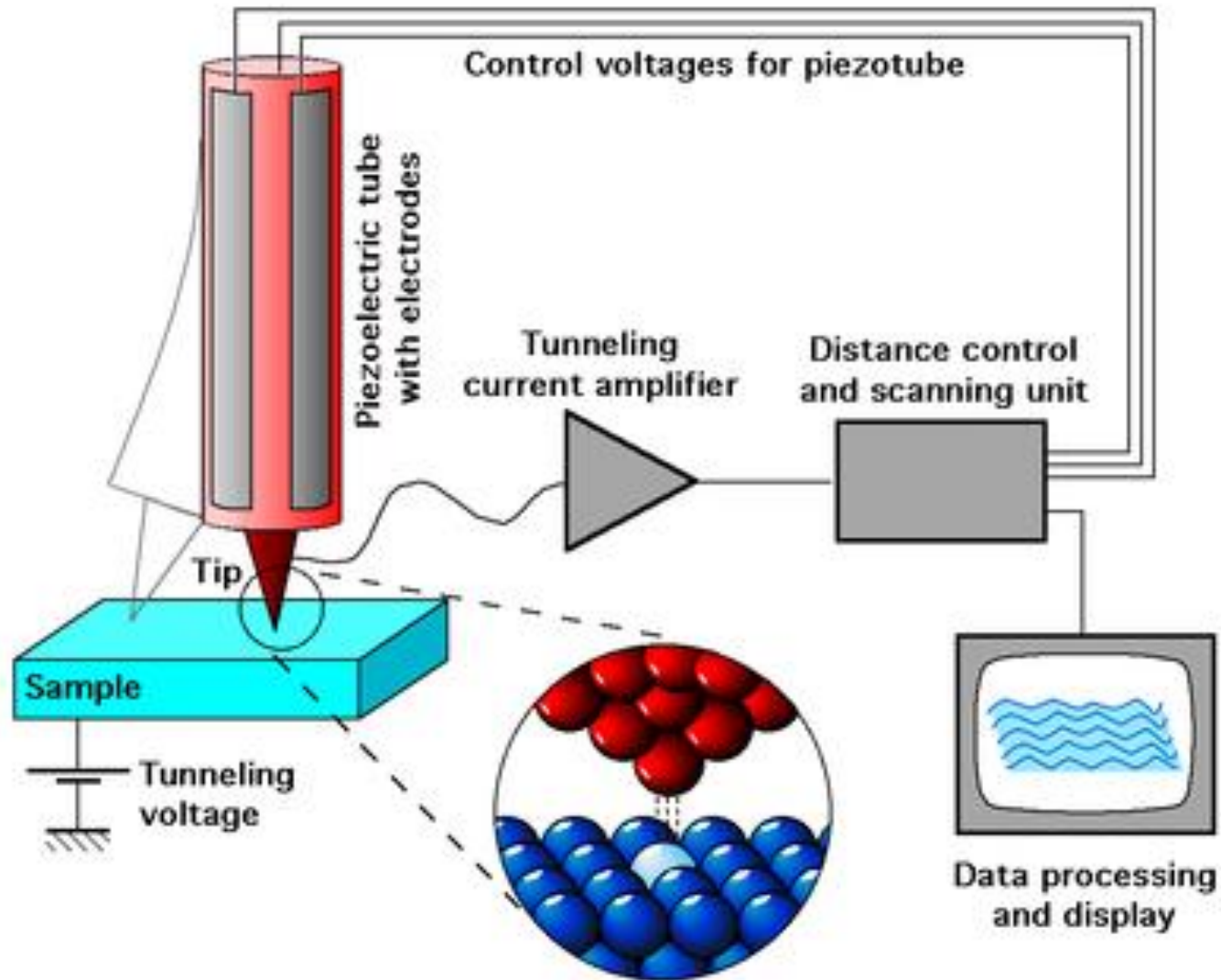
3. 闪存与固态硬盘



舛冈富士雄博士在[东芝公司](#)工作期间，通过理论计算发现：利用量子隧道效应进行[隧穿注入](#) (Tunnel injection) 写入，以及[隧穿释放](#) (Tunnel release) 抹除，可实现信息的读写。他在1984年旧金山IEEE[国际电子会议](#)宣读了自己的发现，[Intel](#)与会者看到了它的巨大潜力，于1988年推出第一款商业性闪存…，现在的闪存市场：268亿

4. 扫描隧穿显微镜 (STM)

(Scanning Tunneling Microscope)



隧道电流公式

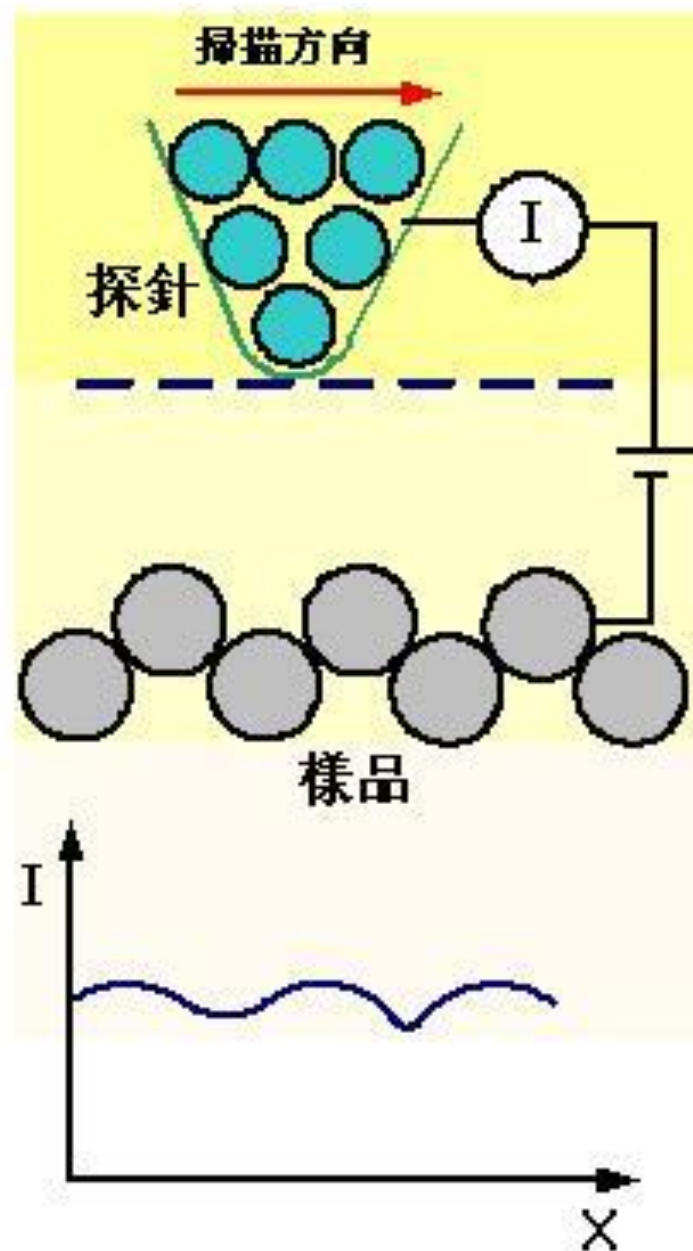
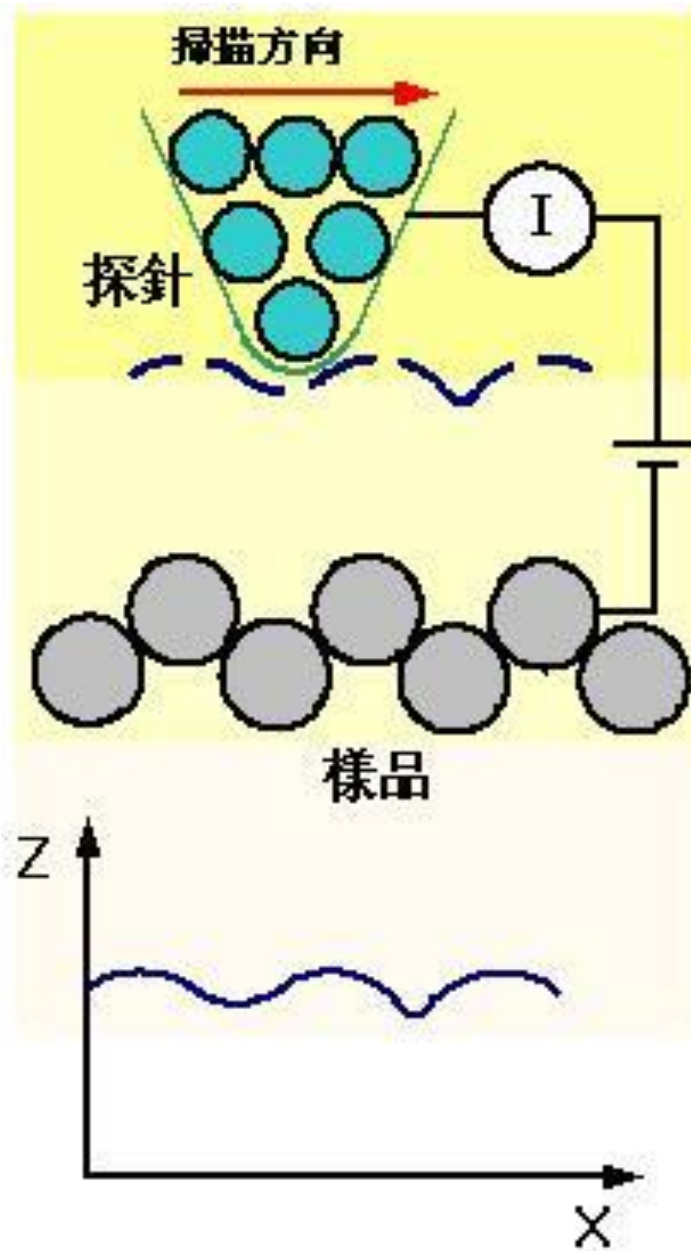
$$i \propto U e^{-A\sqrt{\Phi}S}$$

S ——样品和针尖间的距离

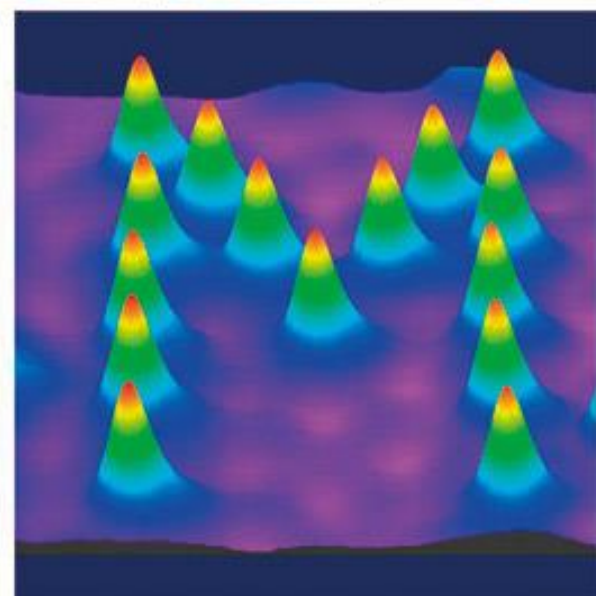
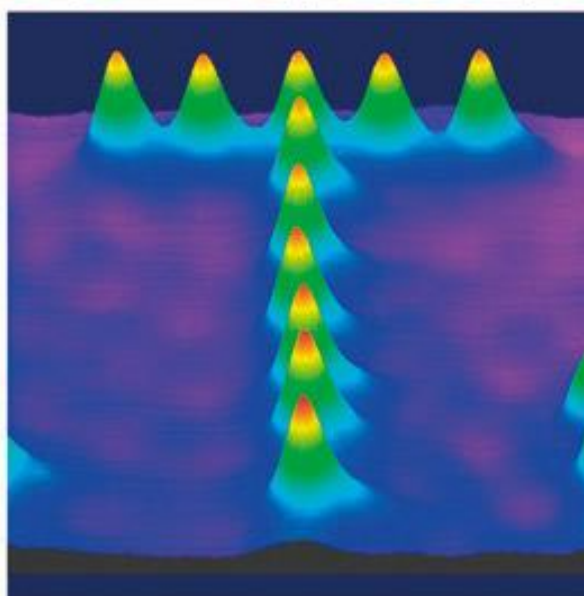
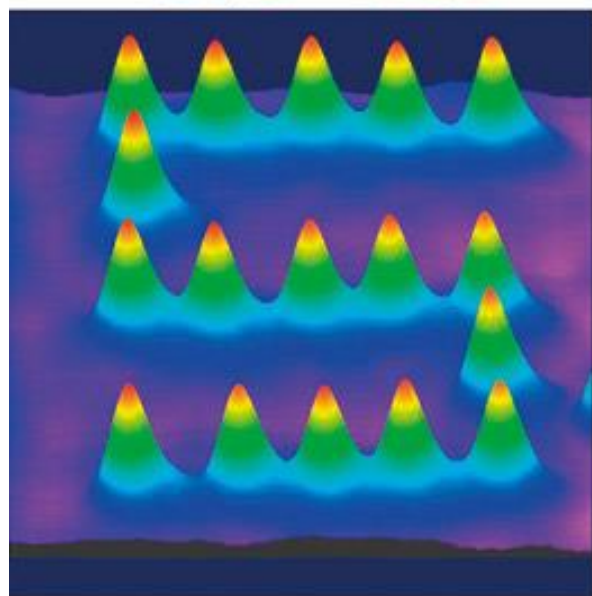
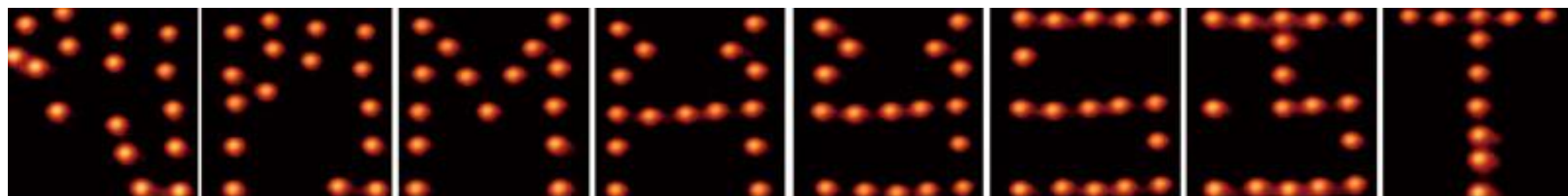
U ——加在样品和针尖间的微小电压

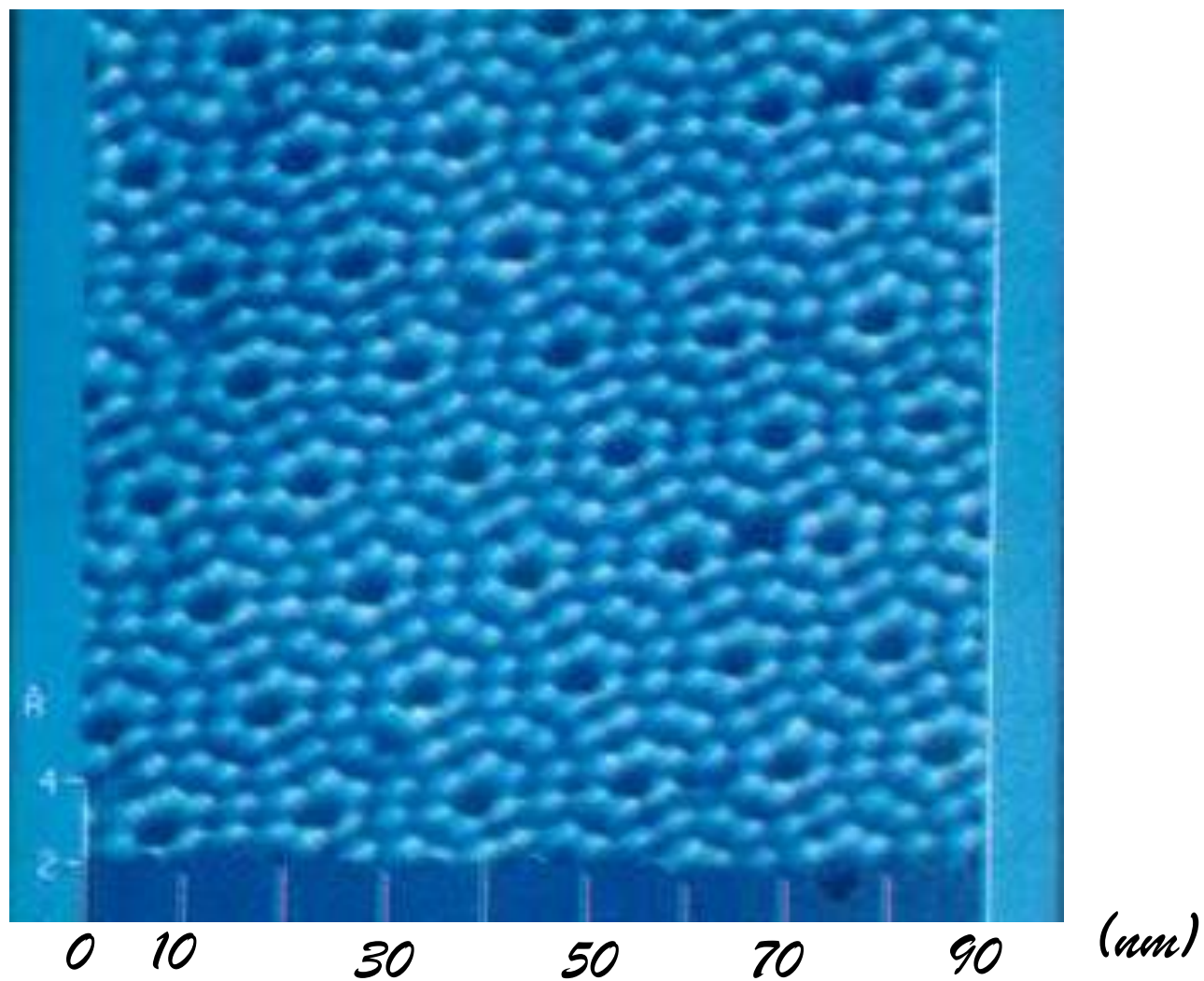
A ——常数

Φ ——平均势垒高度



STM 的两种工作模式 左：恒流模式 右：恒高模式



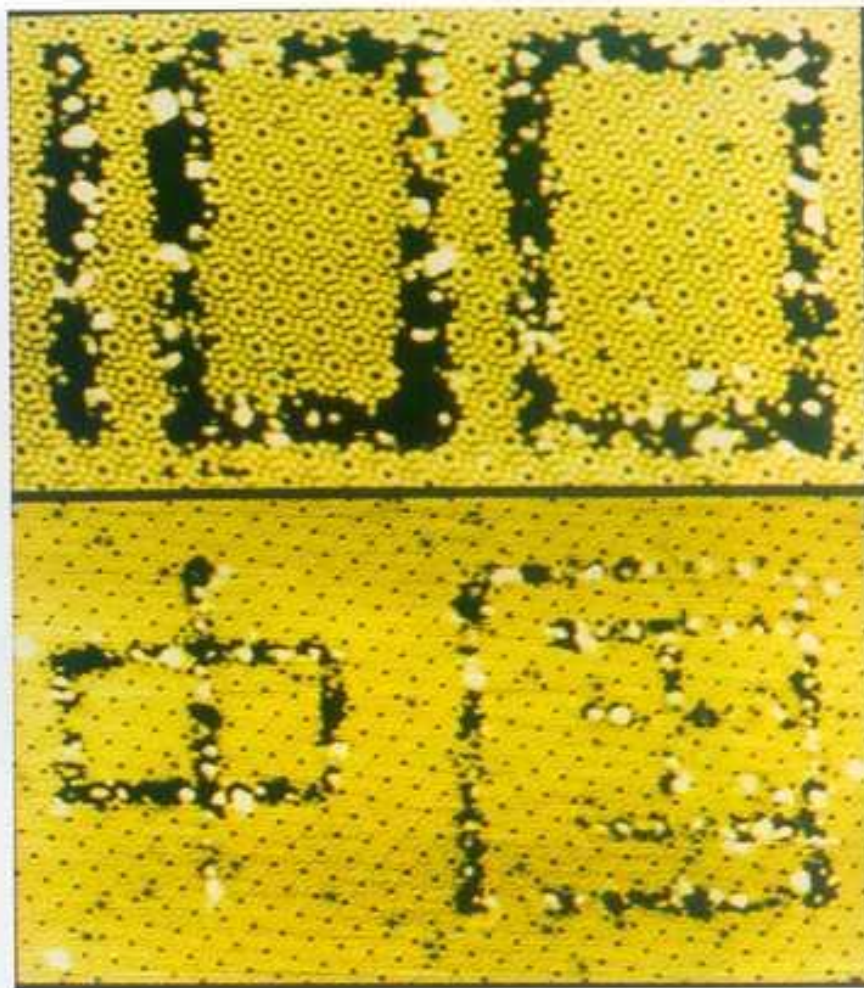


硅晶体表面的STM扫描图象



神经细胞的STM扫描图象

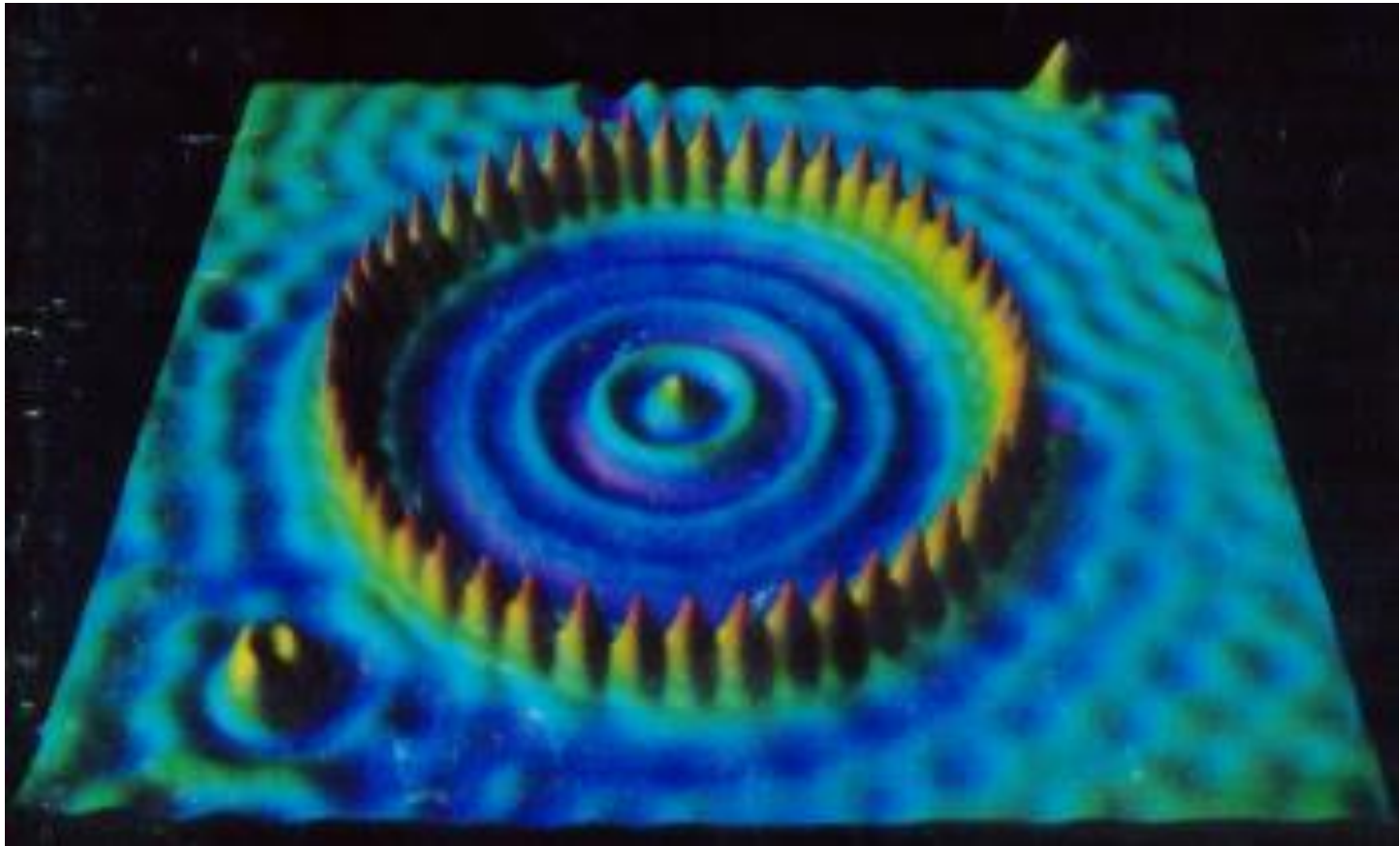
单原子搬运，白春礼先生（中科院院长）



用原子操纵写出的“100”、“中国”

世界上第一次测量到波函数形态

镶嵌了48个 Fe 原子的 Cu 表面的扫描隧道显微镜照片。48个 Fe 原子形成“电子围栏”，围栏中的电子形成驻波

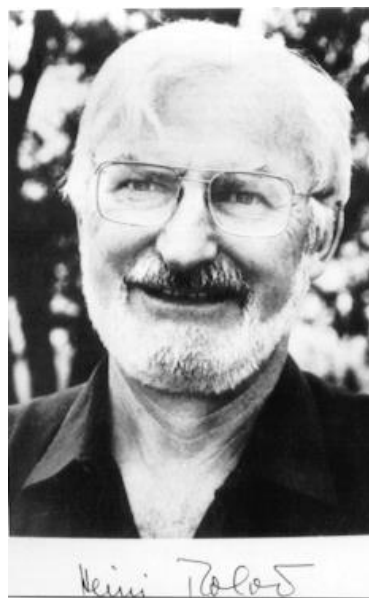


1986年度的诺贝尔物理奖由宾尼、罗赫尔与鲁斯卡三人分享。

前两者就是扫描隧穿显微镜的直接发明者，
(鲁斯卡是1932年电子显微镜的发明者，这里只是为了追朔他的功劳)



宾尼



罗赫尔



鲁斯卡

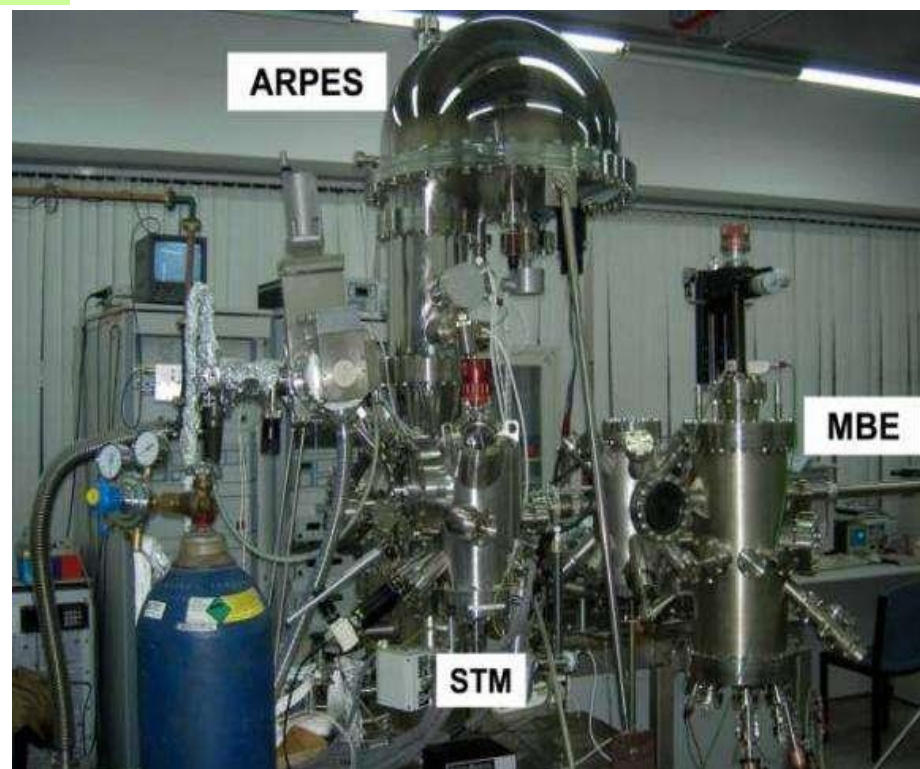
微观世界三大利器

欲善其事，先利其器，

扫描隧穿显微镜 (STM)

分子束外延生长技术 (MBE)

角分辨光电子能谱 (ARPES)



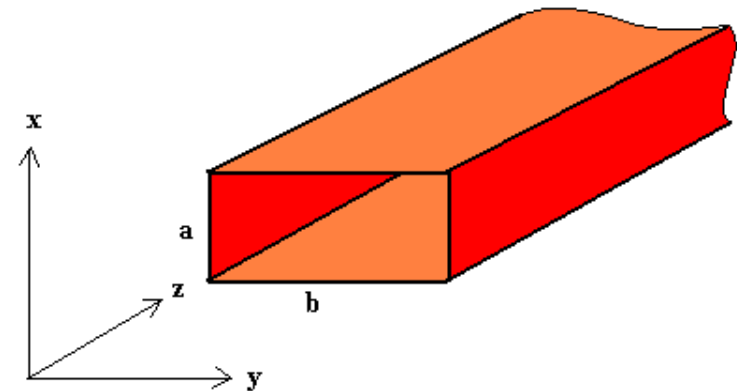
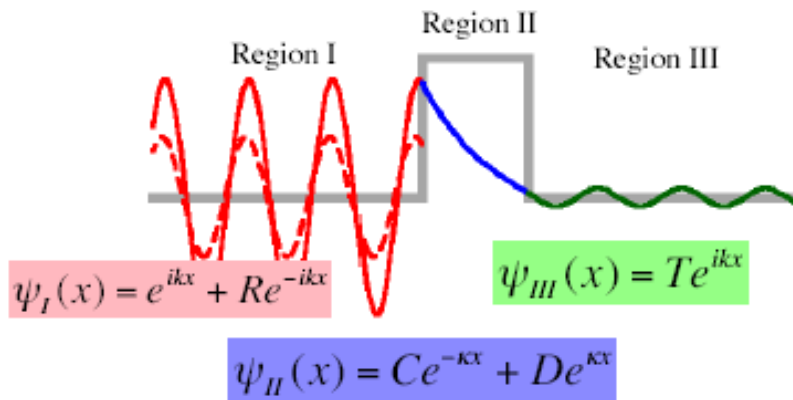
5. 光子的势垒贯穿与纳米光子学

当电磁波的频率小于波导的截止频率时(此时的波导称作截止波导)，电磁波的电场强度和磁感应强度，将沿波导方向呈指数衰减。如果波导长度有限，将有部分电磁波能量穿过这段截止波导，这对应光子的势垒贯穿效应。

量子势垒穿透的电磁截止波导类比

- 沿X轴方向一维量子势垒隧穿

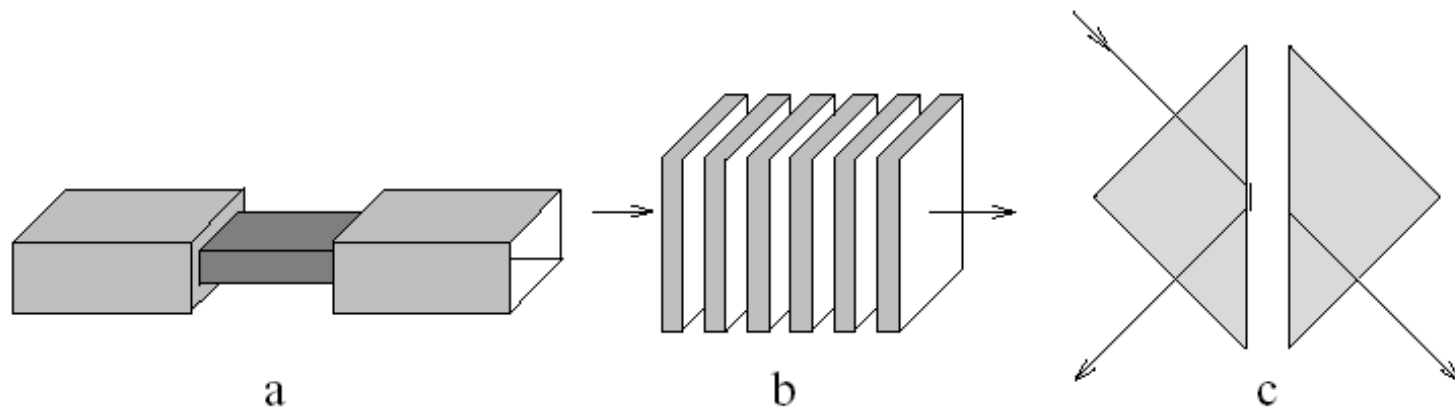
沿Z轴放置的中空金属波导

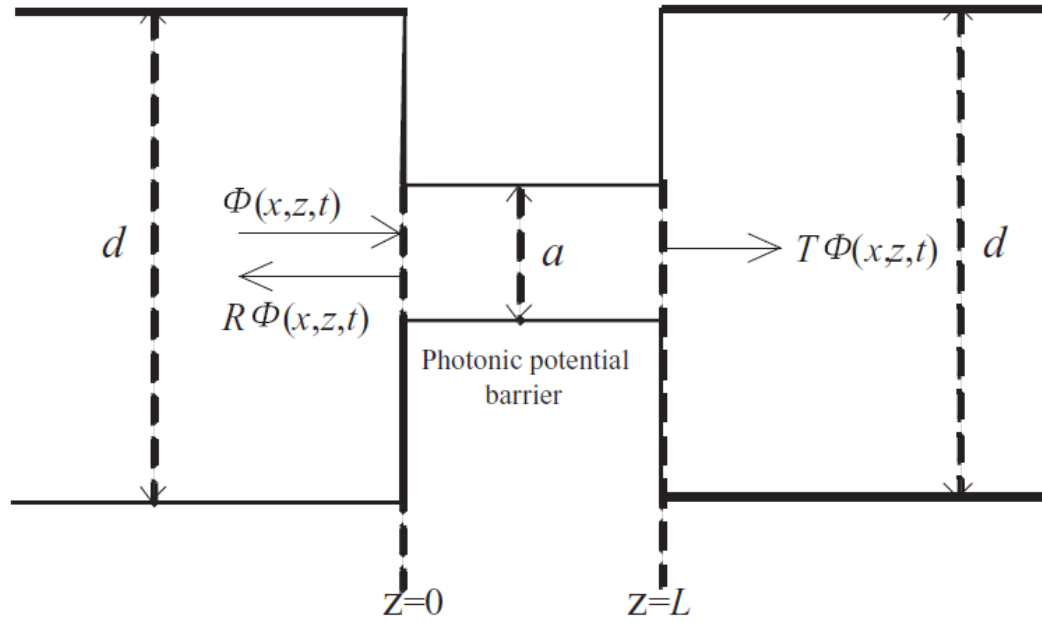


Rectangular waveguide

三类主要的光子势垒

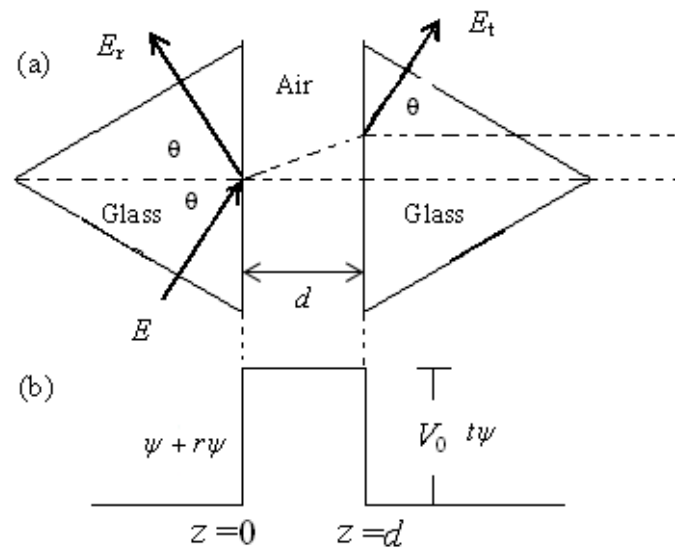
- a) 截止波导； b) 光子晶体（周期性的电介质异质结构）； c) 受挫全内反射双棱镜





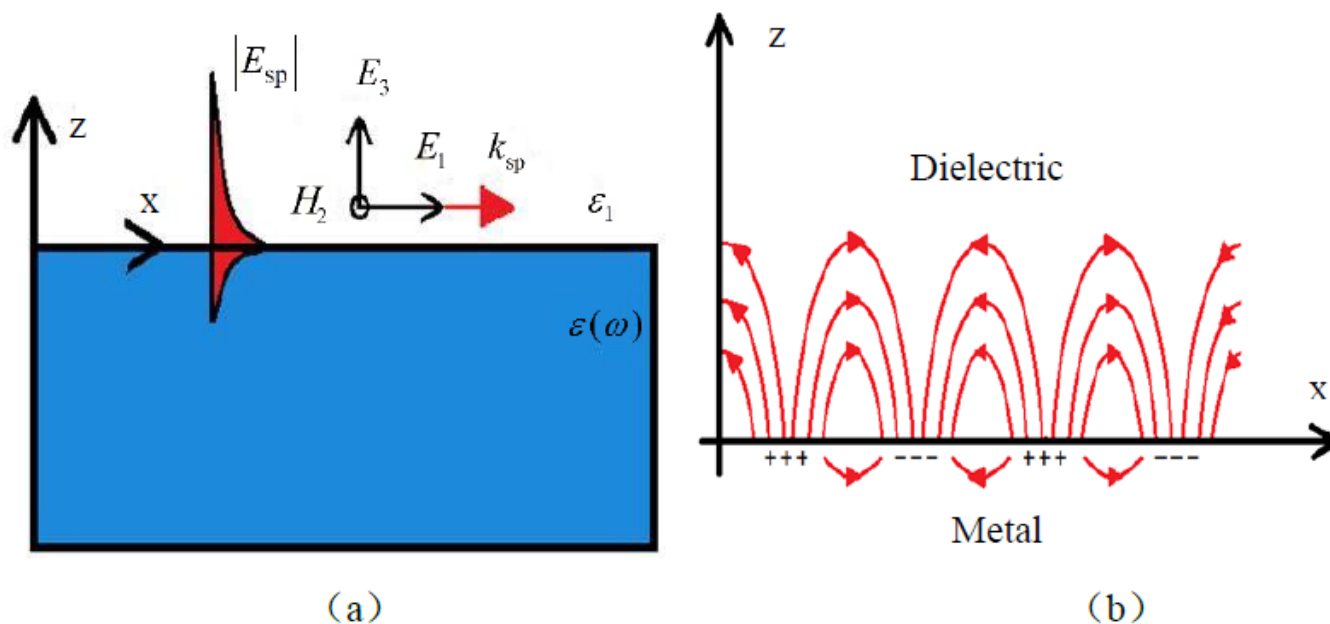
$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \mathbf{H} + \frac{1}{c^2} (\omega^2 - \omega_c^2) \mathbf{H} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0$$

$$\frac{1}{c^2} (\omega^2 - \omega_c^2) \Leftrightarrow \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V_0)$$



上图 (a)表示双棱镜全反射示意图，当入射光在左边棱镜的底边界面处发生全反射时，在两个棱镜中间仍有隐失波 (evanescent waves)存在，如果两棱镜之间的距离 d 不是太大时，这部分波将在第二个棱镜中存在可测量的电磁波输出。此时电磁波满足的Helmholtz方程与量子力学中量子隧穿时的定态方程在数学结构上是同构的，其中两棱镜之间的这段空间就相当于量子力学中的势垒，被称之为光子势垒（如上图 (b)所示），其中 r ， t 分别为反射和透射系数 ψ 为入射粒子的波函数；而光子在全内反射下仍然通过光子势垒进入右边棱镜的行为，被称之为光子的量子隧穿行为。

电磁波在两种介质的边界的垂直方向上，强度随距离呈指数衰减，从而电磁波局域于介质表面，它对应电磁波与介质中的电子构成的一种集体激发，即表面等离子体激元，通过它能实现超越衍射极限的分辨率，是当代纳米光子学的基础。无论是截止波导内的电磁波，还是这种材料表面的电磁波，都具有随某个空间方向上的距离呈指数衰减的分布规律。从量子力学的角度看，它与光子的势垒贯穿效应有关（如果在界面附近有其他金属粒子，则有部分表面波转换成辐射场）。



金属表面等离子体激元
(a)电场分布图；(b)电荷分布图

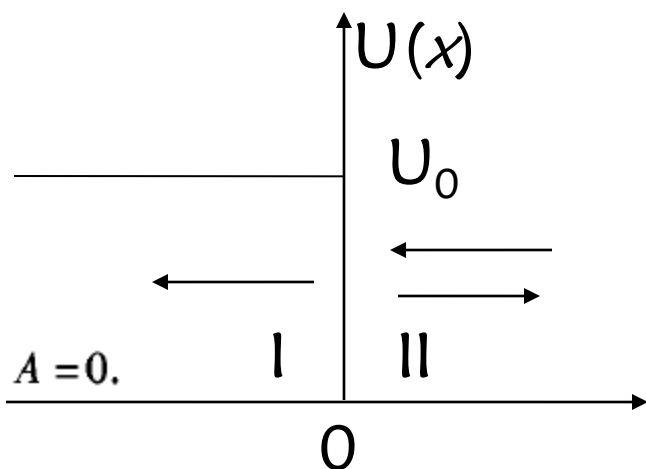
例 1: 一束单一能量的电子流垂直地射到金属表面上, 如果 $E = 0.1 \text{ eV}$, $U_0 = 8 \text{ eV}$, 试计算这些电子的反射概率. 在通常的伦琴射线管中 ($E = 10^5 \text{ eV}$, $U_0 = 10 \text{ eV}$), 轰击对阴极的电子反射概率为若干?

解

$$\begin{cases} \psi_1 = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} & x < 0 \\ \psi_2 = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} & x > 0 \end{cases}$$

本题电子流由真空沿 x 轴负向入射到金属,

B' 项对应入射波, B 项对应反射波, A' 项对应透射波, $A = 0$.



1. 由波函数标准条件定系数.

(1) 由 $\psi_2(0) = \psi_1(0)$ 得 $B + B' = A'$.

(2) 由 $\psi'_2(0) = \psi'_1(0)$ 得 $k_2 B - k_2 B' = -k_1 A'$.

由 k_1 ① + ② 得 $\frac{B}{B'} = \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1}$, 由 k_2 ① - ② 得 $\frac{A'}{B'} = \frac{2k_2}{k_2 + k_1}$.

2. 计算入射波、反射波的概率流密度得反射概率 R 及透射概率 $D = 1 - R$.

$$R = \frac{|\mathbf{J}_R|}{|\mathbf{J}|} = \left| \frac{B}{B'} \right|^2 = \left| \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1} \right|^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E + U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E + U_0}} \right)^2 = \left(\frac{8}{10} \right)^2 = 0.64,$$

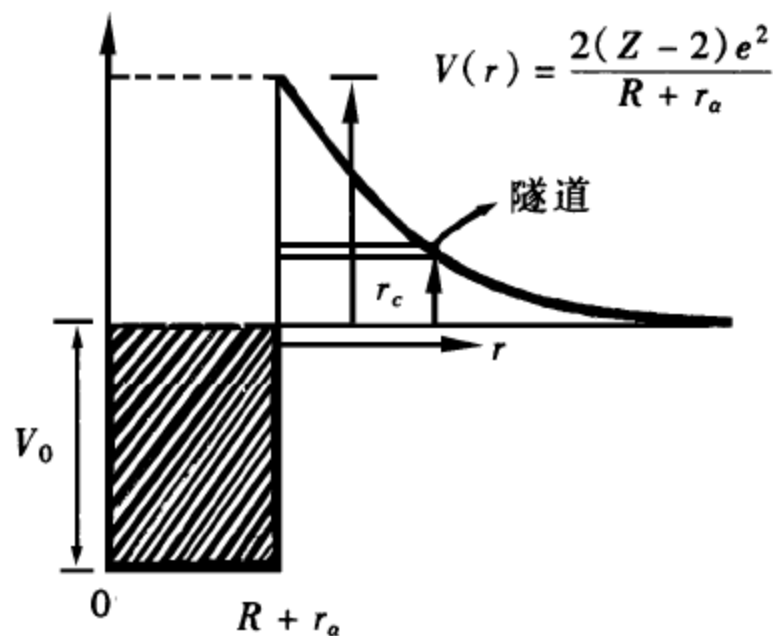
$$D = 1 - R = 0.36$$

对伦琴射线管的情形, 轰击对阴极的电子的 $R = 6.2 \times 10^{-10}$. 电子的能量越大, 被反射的可能性越小.

作业1: 利用两片相同的金属片之间隔着一、两个原子层的氧化物可以形成10eV高、4Å宽的方势垒. 若将3电子伏特动能的电子垂直入射, 求透射系数.

作业2: 能量为1eV的电子入射到矩形势垒上, 势垒高为2eV 为使穿透概率约为 10^{-3} , 势垒大约多宽?

作业3: 已知核的势能曲线如图, 计算 α 粒子的透射系数



α 衰变的势能曲线

1. 质量为 m 的粒子束以动量 $p = \hbar k$ 从 $x = -\infty$ 处入射, 受到周期性 δ 势垒

$$V(x) = V_0 \sum_{n=0}^{\infty} \delta(x - na), \quad a > 0$$

加5分

的作用, 求能够出现完全反射的动量值.

2. 电子通过单一势垒时, 透射系数一般很小, 但是在通过双势垒时, 却可以出现透射系数为100%的情况, 称为共振隧穿, 试研究这种情况并给出共振隧穿发生的条件

加5分

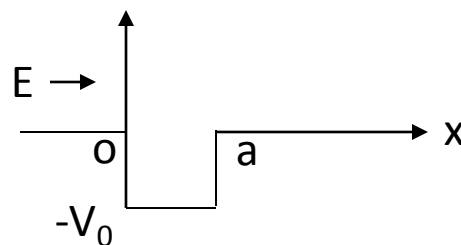
附录 1：了解纳米与分子电子学

附录 2：

1. 方势阱的透射与共振：入射粒子 $E > 0$ ，势阱深度 $-V_0$ ，宽 a 。求透射系数 T ，并讨论 T 的极大，极小条件。

解：

$$u(x) = \begin{cases} -V_0, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0 \text{ 或 } x > a \end{cases}$$



当粒子能量 E 入射高度为 u_0 的势垒($E > u_0$)时, 透射系数

$$\text{为: } T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right)^2 \sin^2 k'a}, \quad \text{其中 } k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2\mu(E - u_0)}}{\hbar}$$

此公式也适用于势阱的透射, 只须改定义 $k' = \frac{\sqrt{2\mu(E + V_0)}}{\hbar}$
即在 k' 表达式中以 $-V_0$ 替代势垒高度 u_0 。

讨论:

(1) $V_0 = 0$ 时, $k' = k$, $T = 1$, 此时无势阱。 $T = 1$ 验证公式正确

(2) $V_0 \neq 0$ 时, $T < 1$, $|R^2| \neq 0$ 粒子不能以100%的几率透过势阱, 有一定的几率被反射, 这是量子力学特有的效应。

(3) 当 $\sin^2 k'a = 0$, 即 $k'a = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots$, $T = 1$, 取极大

值, 称为共振透射; $E_n = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}$; 当 V_0 较大, n 较

小, 则可能存在 $E_n < 0$ 状态, 即束缚态。

当 $\sin^2 k'a = 1$, 即 $k'a = (n + \frac{1}{2})\pi, n = 0, 1, 2, \dots$, T 取极小

值; $E_n = -V_0 + \frac{(n + 1/2)^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}$ 。