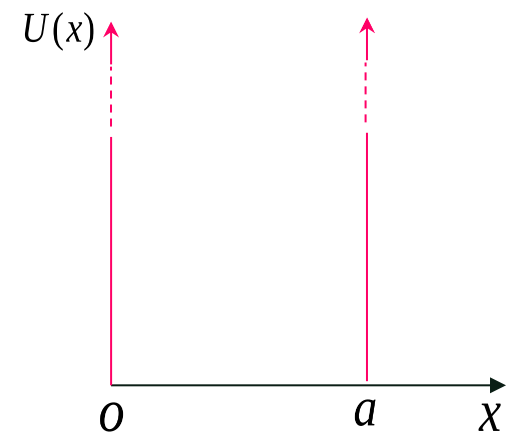
➢ 回顾：定态薛定谔方程 $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$

- 一维无限深势阱　　束缚态　能级分立

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



阱外的波函数 $\Psi(x)=0$

阱内的波函数

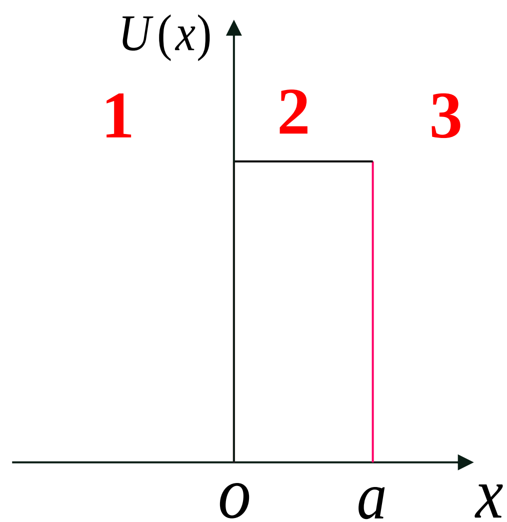
$$\Psi_n(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}xe^{-\frac{i}{\hbar}Et}\qquad E_n=\frac{n^2h^2}{8ma^2}$$

23.3 隧道效应

一、一维散射的一般问题

当 $U(+\infty) = U(+\infty) = 0$ 而 $E > 0$

非束缚态（散射态）



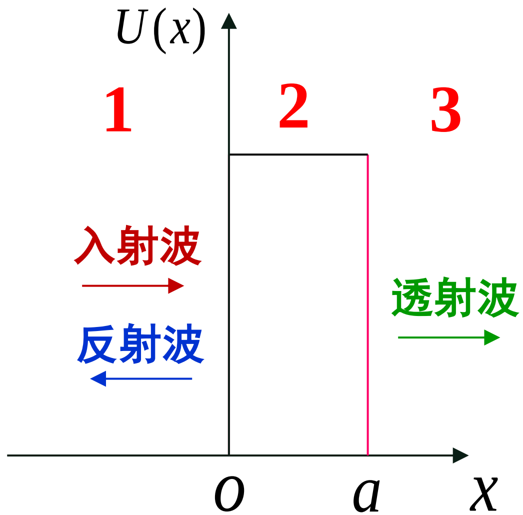
$E > 0$ 的任何值都可以使方程有单值、有限、连续的解，即能量有连续谱。

主要问题：求散射几率

当 $x \to \pm\infty \quad U \to 0$

方程为 $$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)=0$$

令 $k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ $$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}t^2}+k^2\psi(x)=0$$



粒子左方入射时

$x \to -\infty \qquad \psi_1(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$

入射　　反射

$x \to +\infty \qquad \psi_3(x)=Ce^{ikx}+C'e^{-ikx}$

透射　　该区域无左行波 $C'=0$

反射和透射的几率各是多大？

$$\psi(x)_{\text{入射波}} = Ae^{ikx} \qquad \psi(x)_{\text{反射波}} = Be^{-ikx} \qquad \psi(x)_{\text{透射波}} = Ce^{ikx}$$

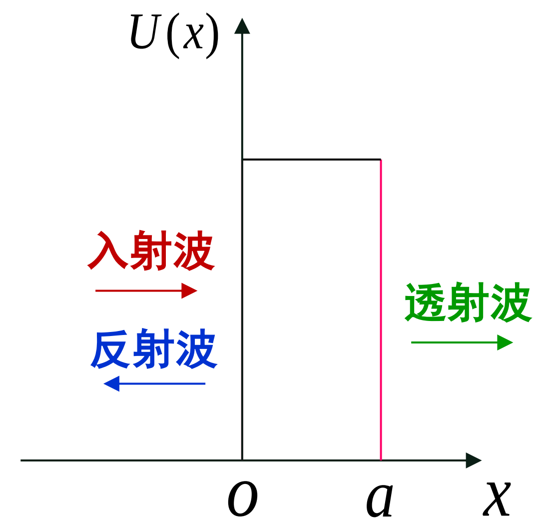
概率流密度 $$J = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$$

将以上波函数分别代入 $\vec{J}$

入射概率流密度 $$J_I = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

反射概率流密度 $$J_R = -\frac{\hbar k}{m}|B|^2$$

透射概率流密度 $$J_T = \frac{\hbar k}{m}|C|^2$$



$$J_I = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 \qquad J_R = -\frac{\hbar k}{m}|B|^2 \qquad J_T = \frac{\hbar k}{m}|C|^2$$

$$\because k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \therefore \frac{k}{m} = \frac{\sqrt{2mE}}{m\hbar} = \frac{p}{m\hbar}$$

$$\therefore \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$ 粒子的经典速度

$$J_I = v|A|^2 \qquad J_R = -v|B|^2 \qquad J_T = v|C|^2$$ 粒子流

反射系数 $R = |J_R / J_I| = |B|^2 / |A|^2$

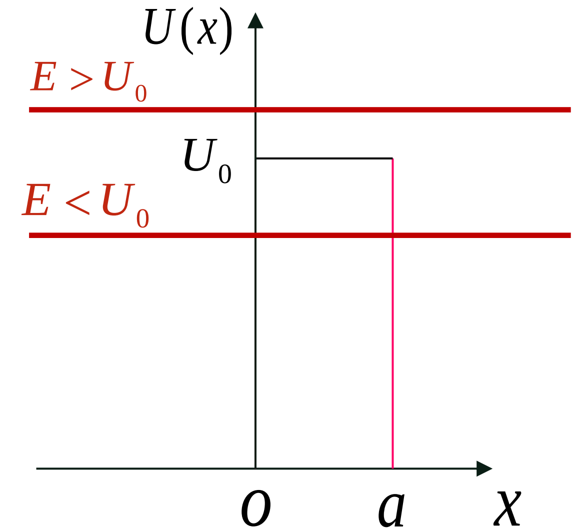
透射系数 $T = J_T / J_I = |C|^2 / |A|^2$

二、一维方势垒

势能函数

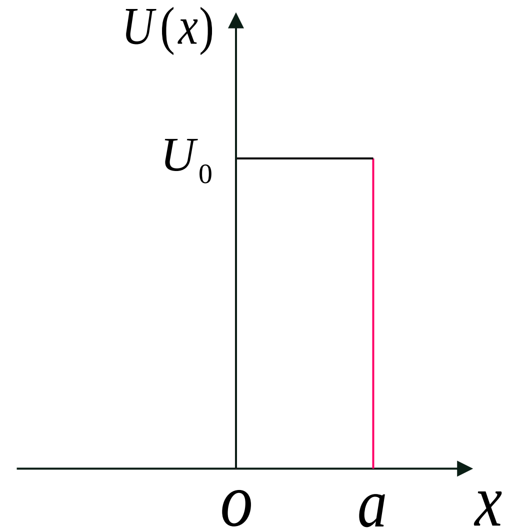
$$U(x) = U_0 \qquad 0 < x < a$$

$$U(x) = 0 \qquad x < 0, x > a$$



1、当 $0 < E < U_0$

令 $k_1 = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ $\quad k_2 = \sqrt{\dfrac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$



定态薛定谔方程表示为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + k_1{}^2\psi(x) = 0 \qquad x < 0, x > a$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} - k_2{}^2\psi(x) = 0 \qquad 0 < x < a$$

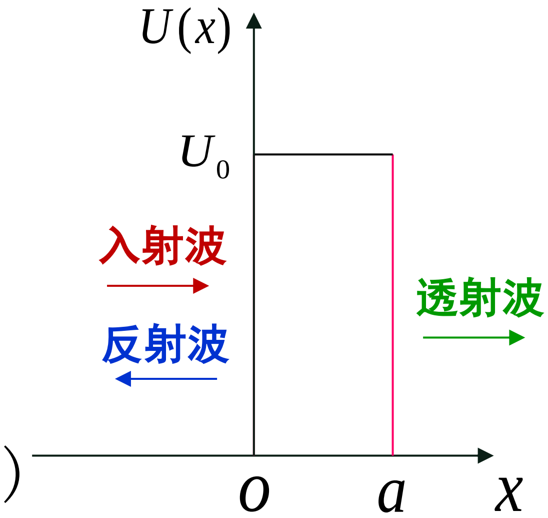
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} & (x < 0) \\ Be^{k_2x} + B'e^{-k_2x} & (0 < x < a) \\ Ce^{ik_1x} & (x > a) \end{cases}$$

由**连续性条件**

在 x=0处，波函数及其一阶导数均连续

$$(\psi_1)_{x=0} = (\psi_2)_{x=0} \Rightarrow A + A' = B + B'$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\right)_{x=0} = \left(\frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\right)_{x=0} \Rightarrow ik_1(A - A') = k_2(B - B')$$



同理，在 x=a处

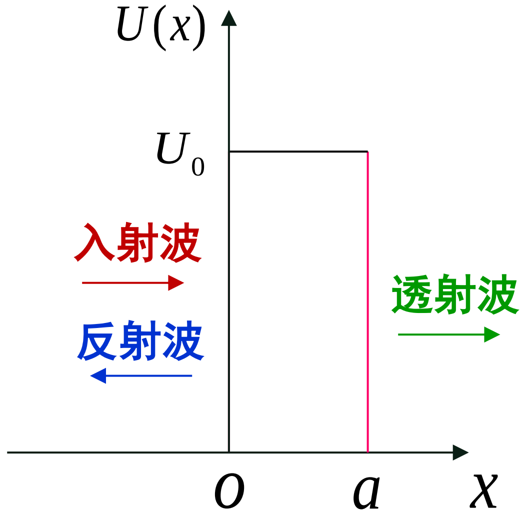
$$(\psi_2)_{x=a} = (\psi_3)_{x=a} \Rightarrow Be^{k_2 a} + B'e^{-k_2 a} = Ce^{ik_1 a}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\right)_{x=a} = \left(\frac{\mathrm{d}\psi_3}{\mathrm{d}x}\right)_{x=a} \Rightarrow k_2 Be^{k_2 a} - k_2 B'e^{-k_2 a} = ik_1 Ce^{ik_1 a}$$

可得

$$(1+A')\cosh k_2 a+\frac{ik_1}{k_2}(1-A')\sinh k_2 a=Ce^{ik_1 a}$$

$$\frac{k_2}{ik_1}(1+A')\sinh k_2 a+(1-A')\cosh k_2 a=Ce^{ik_1 a}$$



其中 $\sinh x=\dfrac{e^{x}-e^{-x}}{2},\cosh x=\dfrac{e^{x}+e^{-x}}{2}$

解以上方程，得

$$A' = \frac{(k_1{}^2 + k_2{}^2)\sinh k_2 a}{(k^2{}_1 - k^2{}_2)\sinh k_2 a + 2ik_1 k_3 \cosh k_3 a} A$$

$$C = \frac{2ik_1 k_3 e^{-ik_1 a}}{(k_1 - k_3)^2 \sinh k_3 a + 2ik_1 k_3 \cosh k_3 a} A$$

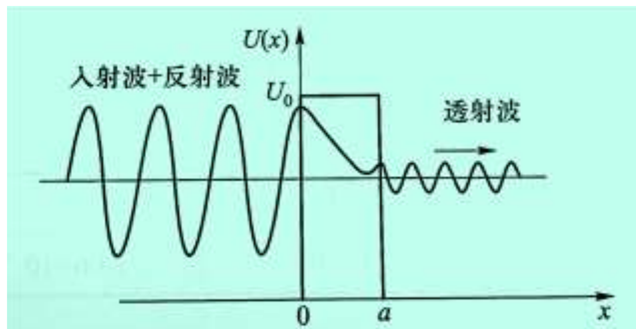
反射系数 $$R = \frac{J_R}{J_I} = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1{}^2 + k_2{}^2)\sinh^2 k_2 a}{(k_1{}^2 + k_2{}^2)\sinh^2 k_2 a + 4k_1{}^2 k_2{}^2}$$

透射系数 $$T = \frac{J_T}{J_I} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1{}^2 k_2{}^2}{(k_1{}^2 + k_2{}^2)\sinh^2 k_2 a + 4k_1{}^2 k_2{}^2} = 1 - R$$

讨论：

(1) $E<U_0$,但$T\neq0$，这是经典力学**不能**解释的，称为

量子**隧道效应**（Quantum tunneling effect），简称**量子隧穿**。



(2) $R+T=1$，即**几率守恒，也就是粒子数守恒。**

可以证明，上式对**任意**势能函数上发生的散射都成立。

(3) 若粒子能量很小，$k_2 a >> 1$

$$T \approx T_0 e^{-2k_2 a} = T_0 e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

量子隧穿率对势垒高度U_0、宽度a和粒子能量E非常敏感

T 随势垒宽度a的增加迅速减小

a/nm	1.0	2.0	5.0	10.0
T	0.101	1.02×10^{-2}	1.06×10^{-5}	1.12×10^{-10}

宏观粒子不会发生隧道效应。

2、当 $E > U_0$ 时　同理可解出

透射系数　$$T = \frac{J_T}{J_I} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)\sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}$$

反射系数　$$R = \frac{J_R}{J_I} = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1^2 - k_2^2)\sin^2 k_2 a}{(k_1^2 - k_2^2)\sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} = 1 - T$$

讨论：

(1) 在 $E > U_0$ 粒子一般也不能百分之百的穿透势垒。

(2) 粒子一定能穿过势垒的条件

$k_1 = k_2$　　不存在势垒

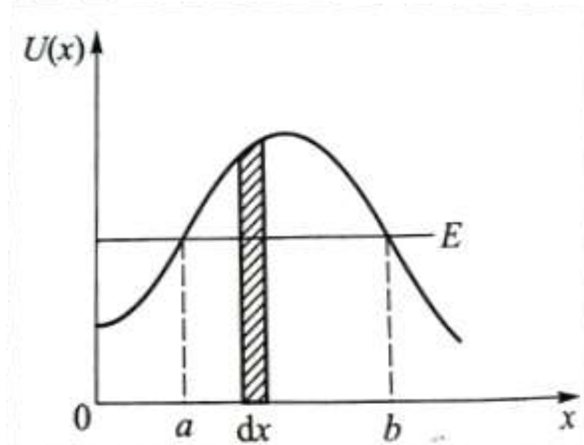
$\sin^2 k_2 a = 0$　　$k_2 a = \dfrac{a\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} = n\pi$　共振隧穿（Resonant tunneling）

3、如果势垒不是方形，而是任意形状 $U(x)$

势垒宽度：$\mathrm{d}x$

势垒高度：$U(x)$

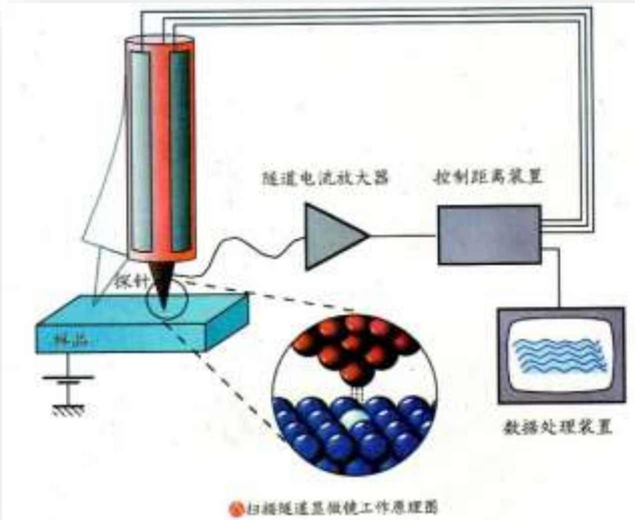
能量：$U(a)=U(b)=E$



穿过方形势垒微元后 $T=T_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U(x)-E)}\mathrm{d}x}$

由$a\rightarrow b$的透射系数 $T=T_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2m(U(x)-E)}\mathrm{d}x}$

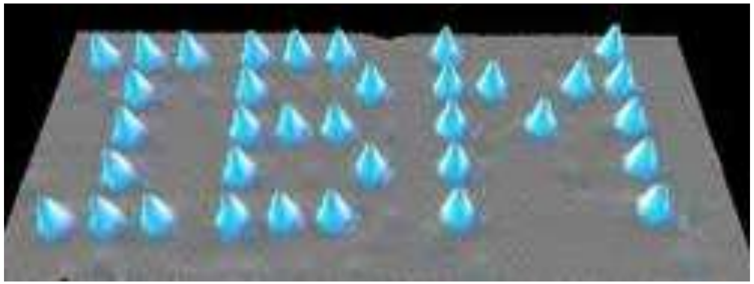
三、隧道效应的应用

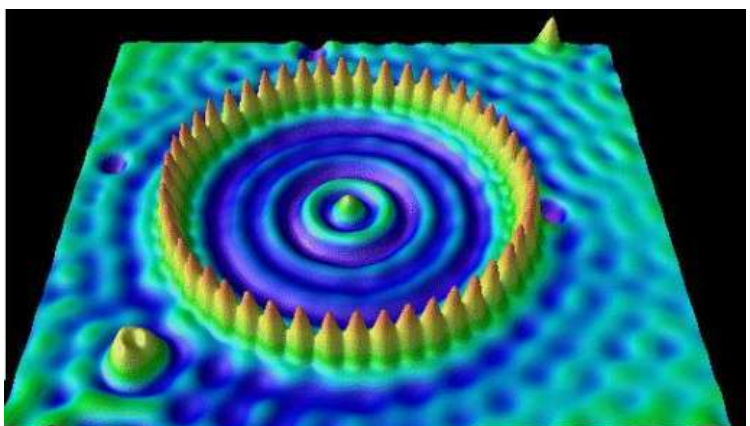


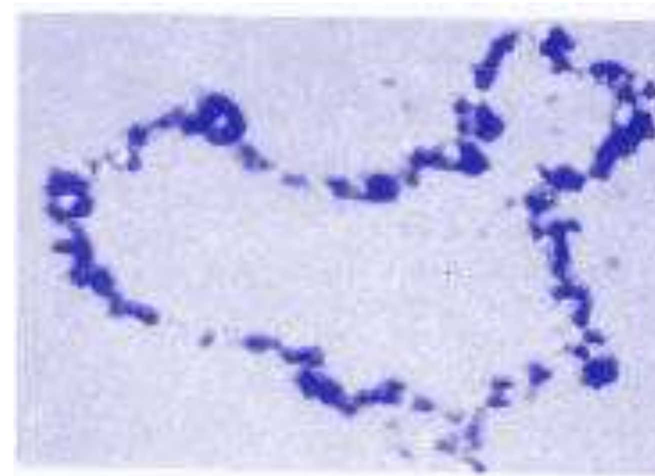
扫描隧道显微镜（STM）
Scanning Tunneling Microscope
1982年研制

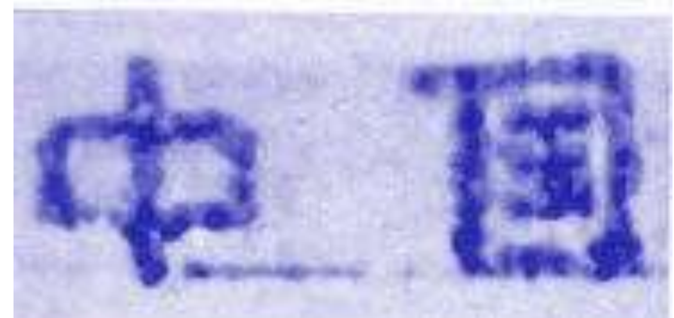
1986年德国物理学家
宾尼和罗雷尔获诺贝尔奖

基于STM（Scanning Tunneling Microscope）的量子操控

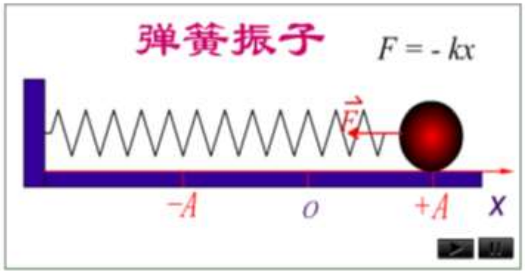








➢ 经典谐振子

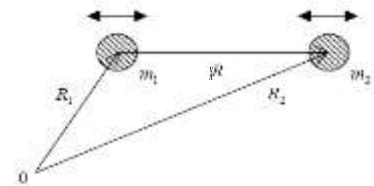


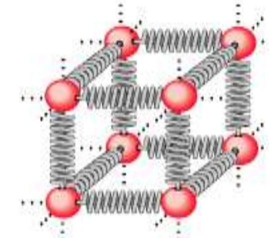
$$\frac{d^2x}{dt^2}+\omega^2x=0 \quad \omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

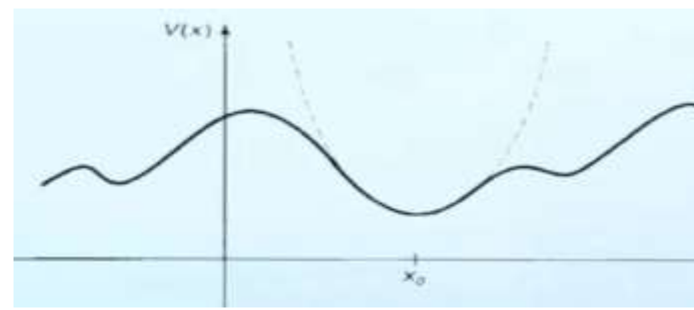
$$x=A\cos(\omega t+\alpha)$$

- 谐振子势能: $U=\frac{1}{2}m\omega^2A^2$

➢ 量子谐振子







$$U(x)\approx U_0+\frac{1}{2}k(x-x_0)^2$$

23.4 一维谐振子

一、模型建立

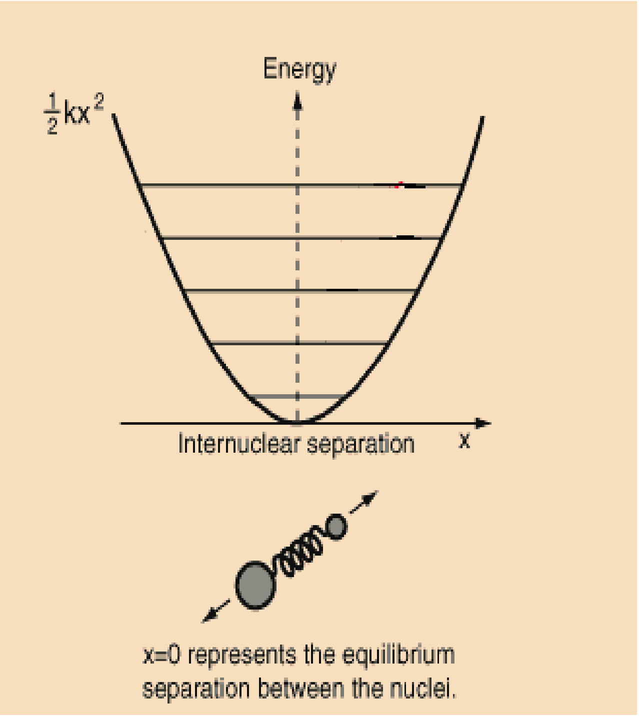
以平衡位置为零势能点

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

定态薛定谔方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi=0$$

变系数二阶常微分方程



二、模型求解

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi=0$$

引进无量纲参量 $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\equiv\alpha x,\quad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\quad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$

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

（1）先讨论论 $\xi\to\pm\infty$ 的行为，求渐进解

$$\xi\to\pm\infty \qquad \lambda \ll \xi^2 \qquad \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2}-\xi^2\psi=0$$

求解可得：$\psi = Ae^{-\xi^2/2} + Be^{\xi^2/2}$

波函数在$\xi \to \pm\infty$ 时的有限性条件，$B = 0$

（2）求实际解

$\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\xi^2/2}$ 代入方程，可得

$$\frac{\mathrm{d}^2 H}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\xi} + (\lambda - 1)H = 0$$

用级数法求解

对 $H(\xi)$ 在$\xi=0$附近作泰勒展开求解方程

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

为了在 $\xi\to\infty$ 时，波函数有限，$H(\xi)$ 必须截断为多项式。

即可得能量本征值 E满足：

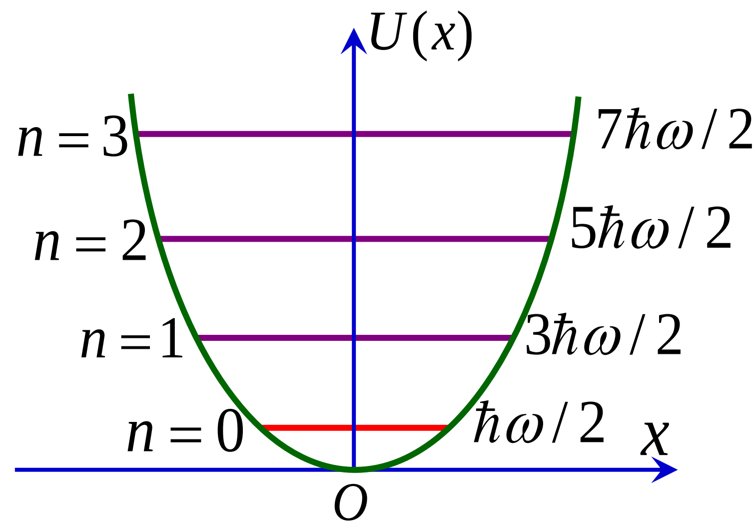
$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega \qquad n=0,1,2,3,\cdots$$

三、结果讨论

1.能量本征值

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$



(1)谐振子的能量是量子化的，其能级是均匀分布的，相邻两能级之间的间隔均为 $\hbar\omega$ **；**

(2)基态能量 $E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$**，称为零点能。**

2.波函数及概率密度

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

厄米（Hermite）多项式

$$= N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x) \quad (\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar})$$

由归一化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$

利用Hermite多项式的正交性：

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) \mathrm{d}\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}$$

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

得到 $N_n = \sqrt{\dfrac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}}$

- 谐振子的最低几条能级及对应的波函数

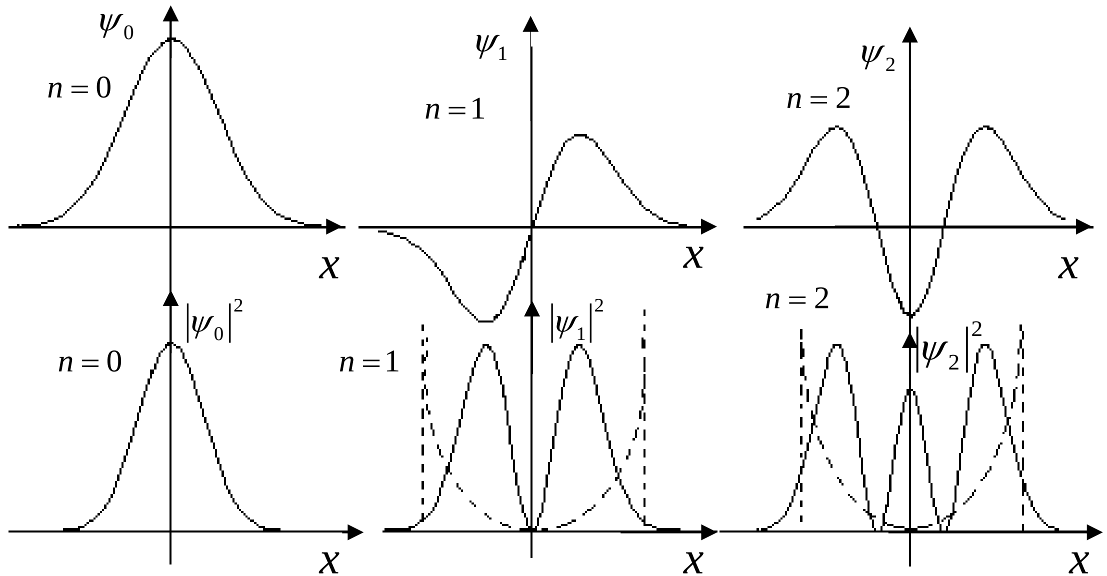
$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \psi_0 = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2}$$ 高斯（Gauss）函数

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega \qquad \psi_1 = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}} \alpha x e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega \qquad \psi_2 = \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} (2\alpha^2 x^2 - 1) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega \qquad \psi_3 = \frac{\sqrt{3\alpha}}{\pi^{1/4}} (\frac{2}{3}\alpha^2 x^2 - 1)\alpha x e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

- $n=0,1,2$ 时的波函数及概率密度的图

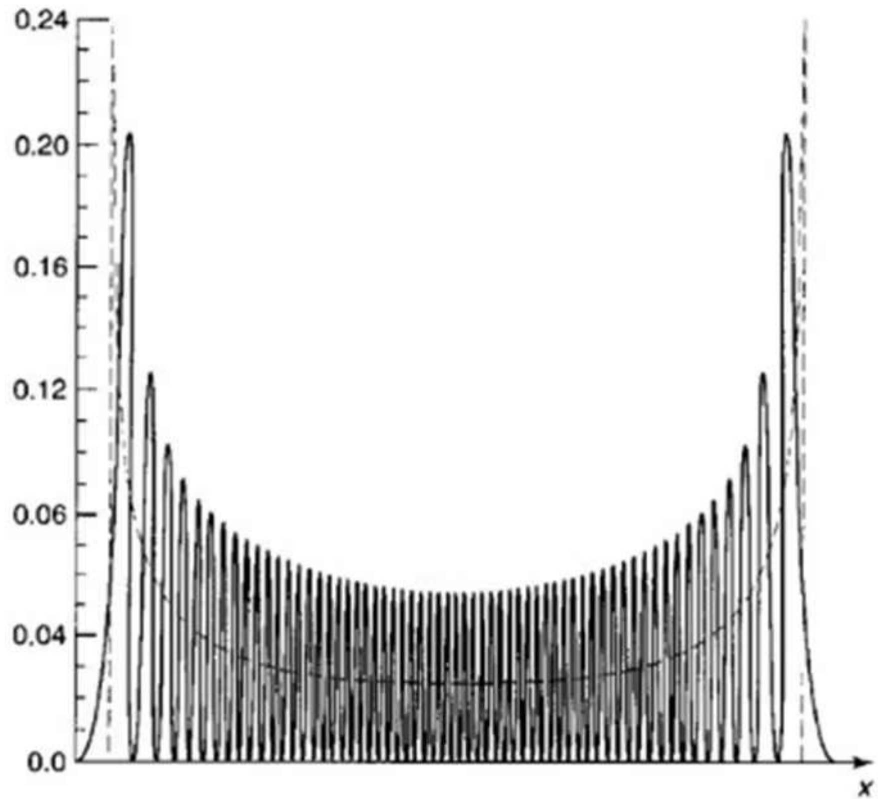


（1）$\psi_n(x)$ 有个节点（零点）。

（2）$\psi_n(x)$ 宇称为 $(-1)^n$。

（3）n较小时粒子出现的概率与经典差异较大。

（3）随着n的增大，概率密度越来越接近经典结论。



n=100时谐振子的位置几率分布

3.经典禁区

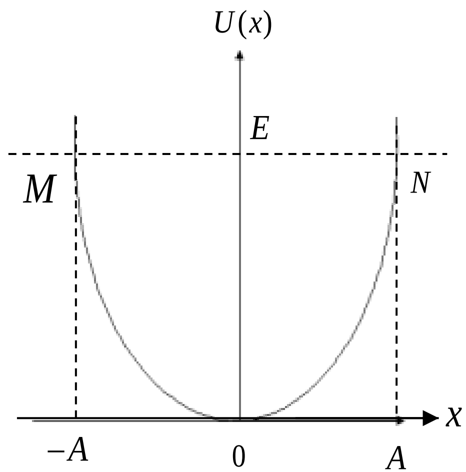
经典 $x = \pm A$ 处振子的速度为零

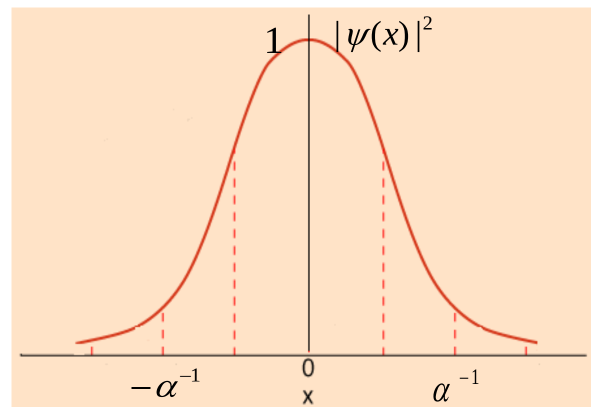
基态为例： $|\alpha x| \le 1$

量子 $|\psi_0|^2 = \dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2}$

$$\int_{-1}^{-\infty} |\psi_0|^2 \, \mathrm{d}\xi + \int_{1}^{\infty} |\psi_0|^2 \, \mathrm{d}\xi = 15.7\%$$

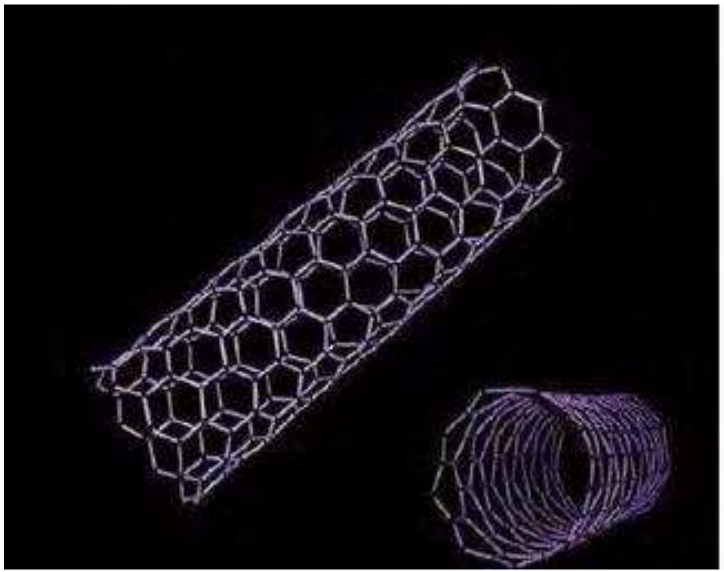
在经典禁区内发现粒子的概率不为零！

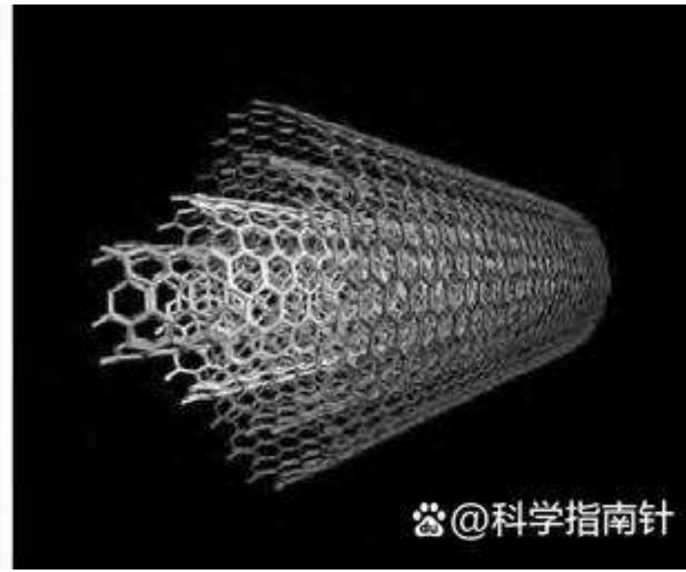




拓展应用

体系指纹 如单壁碳纳米管的呼吸模。





通过测量碳纳米管的径向呼吸模的频率值确定其径向尺度

作业：

1、P245：二、4

2、已知一维谐振子的势能表达式为 $U=\frac{1}{2}kx^2$,则该体系的定态薛定锷方程为(　)

A. $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\psi=E\psi$

B. $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\frac{1}{2}kx^2\psi=E\psi$

C. $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\psi=E\psi$

D. $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\frac{1}{2}kx^2\psi=E\psi$