

3.1 定态薛定谔方程

作为一个理论体系,至少应该能够解决以下问题:

(1) 给出在某一时刻,量子体系的全部物理量的取值及其平均值等物理信息。这是从运动学的观点来考察状态。此时可以将描述状态的波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 中的 t 作为参数处理,而将 \mathbf{r} 作为自变量来讨论问题。

(2) 给出体系的状态随时间的变化规律。这相当于从动力学的角度来考察状态。薛定谔方程可以解决这个问题。

下面我们从运动学的角度来讨论量子状态。

从运动学的观点来看,量子体系的状态是多种多样的,但其中有一类状态——**稳定状态**却具有十分重要的实际意义。

稳定态是能量取确定值的状态,简称定态。这类状态,即使时间变了,状态的其他性质可以发生很大的变化,但它的能量取值却一定不变。

定态也是千差万别的,自然描述定态的波函数(称为定态波函数)也是千差万别的,但是这些波函数却服从一个统一的规律,这个规律可以在数学上用一个方程——定态薛定谔方程来表达。

定态薛定谔方程可以从前面讲的量子力学第三个原理来推出。

必须指出,定态时位能函数与时间无关, $U=U(\mathbf{r})$,即体系是处于保守力场的情况。

3.1.1 定态薛定谔方程的建立

在保守势场中, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\mathbf{r})$ 与时间无关,可以用分离变量法来求解薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (3-1)$$

令 $\psi(\mathbf{r}, t) = f(t)\varphi(\mathbf{r})$, 代入上式得

$$i\hbar \varphi(\mathbf{r}) \frac{\partial f(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) f(t)$$

整理得

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\varphi(\mathbf{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = A$$

其中, A 是一个与空间和时间变量无关的分离常数, 于是经过分离变量可以得到两个方程, 即

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = A \quad (3-2)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = A \varphi(\mathbf{r}) \quad (3-3)$$

方程(3-2)的解直接可以得到

$$f(t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} A t\right) = C \exp\left(-i 2\pi \frac{A}{h} t\right)$$

其中 C 为常数, 根据一般的波动形式可知 $\frac{A}{h} = \nu$ (频率), 对比德布罗意关系式 $E = h\nu$ 可以认定分离常数具有能量的含义, 即 $A = E$, 于是方程(3-2)的解可以写成

$$f(t) = C e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

方程(3-3)可写成

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

即

$$\hat{H} \varphi_E(\mathbf{r}) = E \varphi_E(\mathbf{r}) \quad (3-4)$$

上式称为定态薛定谔方程。满足该方程的波函数 $\varphi_E(\mathbf{r})$ 称为定态波函数。

在数学上它叫做算符 \hat{H} 的本征方程 (或称特征方程)。“本征”译自德语“eigen”。英语为“characteristic”, 应翻译成“特征”。物理学领域一般采用源自德语的“本征”, 数学领域一般采用源自英语的“特征”。

我们把描述某种运算手续的符号称为“算符”, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 、 \hat{H} 、 $U(\mathbf{r})$ 、 ∇ 、 $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ 等都是算符。

所谓本征方程就是这样的方程

算符作用在某函数上 = 常数乘以同一函数

这个常数就叫作本征值。能够使方程成立的本征值一般不止一个, 所有本征值的集合称为本征值谱。满足本征方程的波函数叫作本征波函数。取不同本征值时, 满足方程的本征函数一般也不同, 因此本征函数一般要注明其对应的本征值。

定态薛定谔方程也就是能量算符 (哈密顿算符) \hat{H} 的本征方程, 二者之间的对应关系如表 3-1。

表 3-1 薛定谔方程与 \hat{H} 本征方程的关系

物 理 上	数 学 上
定态薛定谔方程 $\hat{H}\varphi(\mathbf{r})=E\varphi(\mathbf{r})$	能量算符 \hat{H} 的本征方程
定态波函数 $\varphi(\mathbf{r})$	能量算符 \hat{H} 的本征函数
体系处于 $\varphi(\mathbf{r})$ 态时能量的一个可测量值 E	能量算符 \hat{H} 的一个本征值
体系在实验上可测得的全部能量值	能量算符 \hat{H} 的本征值谱

定态问题实际上就是求解能量算符的本征方程。这个本征方程是微分方程,但它不是一个普通的微分方程,而是含有一个待定常数 E ,而 E 本身又有确定物理含义的微分方程,即定态薛定谔方程。通过求解定态薛定谔方程得到定态波函数,进一步乘以与能量密切相关的时间函数 $f(t)$ 就可以得到描述能量稳定状态的波函数:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi_E(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

判断一个波函数描述的状态是否为定态,就是看能否将该波函数转化成上式的形式。

简并度: 如果对应一个 E 值,有 f 个线性独立的波函数满足本征方程,则称对应这个能量 E 是 f 度简并的,简并度有时也称退化度。

注意: 在求解薛定谔方程时,应选择合适的坐标系以求简化计算过程。

3.1.2 定态的特点和实现定态的条件

1. 定态的特点

1) 任何时刻,能量的取值不变。

前面讲过,与时间相关的定态波函数为

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi_E(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

其中 $\varphi_E(\mathbf{r})$ 满足定态薛定谔方程

$$\hat{H}\varphi_E(\mathbf{r}) = E\varphi_E(\mathbf{r})$$

这里的 E 是分离常数,它不仅与 \mathbf{r} 无关,而且与 t 也无关。只要体系所处的力场不变 (U 不变),若在某一时刻,体系的能量取确定值,则在以后的任何时刻,状态的其他性质可以发生很大变化,但其能量取值却一定不变,这一特点就是称其为**稳定状态的原因**。

2) 对于定态,所有不显含时间 t 的物理量,其取值概率与平均值都不随时间改变。

例如,对于定态归一化波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$,其位置概率密度为

$$W(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\varphi_E(\mathbf{r})|^2$$

说明在定态时,位置概率密度与时间无关。

再由连续性方程

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

可得

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}$$

如 \mathbf{J} 仅在 x 方向不为零, 则 $J_x = \text{常数}$ 。这意味着, 在单位时间通过垂直于 x 轴的单位面积的概率在 x 的任何点均相等。这就好像匀速运动, 无论在 x 方向的任何点上。都通过相等的概率流。

2. 实现定态的条件

1) $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, 前面已经说明。

2) 初始时刻, 状态处于定态, 才能保证以后时刻也为定态!

下面以三维空间运动的自由粒子为例, 讨论一下通过薛定谔方程求得粒子运动状态情况的过程。

所谓自由运动是指粒子在运动过程中不受外力的作用。这时对应的位能应是常数。为简单计, 取此常数为零。这样自由粒子的能量算符为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

相应的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi(x, y, z) = E \varphi(x, y, z) \quad (3-5)$$

方程具有分离变量解

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x) \varphi(y) \varphi(z)$$

将其代入式(3-5), 得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{d^2 \varphi(y)}{dy^2} + \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} \right) = E$$

上式可分为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} / \varphi(x) = E_x \quad (3-6)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(y)}{dy^2} / \varphi(y) = E_y \quad (3-7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} / \varphi(z) = E_z \quad (3-8)$$

能量本征值为 $E = E_x + E_y + E_z$ 。

由于式(3-6)~(3-8)形式相同, 故仅以式(3-6)为代表求解之。

必须强调, 方程(3-6)是一个包含待定常数 E_x 的微分方程, 既要求出本征值, 也要求出相应的本征函数。另外还要强调的是: 微分方程的解不一定是我们要的波函数, 只有满足自然条件的解, 才是我们需要的定态波函数。在从数学解中挑选波函数的过程中, 就可以定出本征值来。

首先, 微分方程(3-6)的通解为

$$\varphi(x) = c_1 \exp\left(\frac{\sqrt{-2mE_x}}{\hbar} x\right) + c_2 \exp\left(-\frac{\sqrt{-2mE_x}}{\hbar} x\right) \quad (3-9)$$

其中 c_1, c_2 为任意常数。

然后, 我们来挑选满足自然条件的解。

(1) 当 $E_x \leq 0$ 时, 有 $\frac{\sqrt{-2mE_x}}{\hbar} = a$, a 为实数, 从而方程的解为

$$\varphi(x) = c_1 e^{ax} + c_2 e^{-ax}$$

为使 $x \rightarrow \pm\infty$ 时上式有限, 只能 $c_1 = c_2 = 0$, 显然, 零解没有物理意义。因此对应 $E_x < 0$ 的解, 不是波函数。

(2) 当 $E_x \geq 0$ 时, 有 $\frac{\sqrt{-2mE_x}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar} = ik_x$, 其中 k_x 是实数, 从而解为

$$\varphi(x) = c_1 e^{ik_x x} + c_2 e^{-ik_x x} \quad (3-10)$$

显然, x 在 $(-\infty, +\infty)$ 的整个区域中, 方程的解都满足单值、有限、连续的条件。于是方程(3-6)的本征值 $E_x \geq 0$ 。

三维情况时, 归一化的定态波函数为

$$\varphi(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

其中

$$\mathbf{k} = k_x \mathbf{i} + k_y \mathbf{j} + k_z \mathbf{k}, \quad k_\mu = \frac{\sqrt{2mE_\mu}}{\hbar}, \quad \mu = x, y, z$$

对应的本征值为任意大于等于零的实数。

讨论:

(1) 连续本征值谱。自由运动的本征值是所有正实数和零, 属于连续取值的区域, 因此叫连续谱。自由运动实际可测量的能量值是大于等于零的任意实数。

(2) 退化度。一维自由运动时, 对应同一个能量 E 值, 有两个线性独立的波函数, 按照前面退化度的定义, 此时退化度为 2。(思考题: 对于三维自由运动, 对于同一个能量 E , 退化度是多少?)

(3) 由式(3-10)可得一维运动时, 对应同一个 E_x , 两个线性独立的波函数为

$$\psi_1(x, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_x x - E_x t)\right)$$

$$\psi_2(x, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(-p_x x - E_x t)\right)$$

对于 $\psi_1(\mathbf{r}, t)$, 作为平面波函数, 考虑其位相为 A 的等相面的运动情况

$$\frac{p_x x - E_x t}{\hbar} = A$$

由上式可知, 随时间 t 的增加, 等相面的位置 x 也增加, 因此说明 $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ 描述的是粒子由左向右的运动, p_x 取正方向。同理, $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ 描述的是粒子由右向左的运动, p_x 取负方向。

(4) 位置概率的计算, 由

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right)$$

得

$$W(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |A|^2$$

也就是说, 自由运动粒子的位置概率密度不仅与时间无关, 也与空间位置无关。在无穷远处发现粒子的概率与在有限远处发现粒子的概率相同。这说明, 自由粒子可以“自由自在”地漫游到无穷远的地方。这样的状态叫非束缚态(无法将粒子束缚在一个有限的区域

中)。这时的概率流密度为

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} |A|^2 \left(\exp\left(\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}{\hbar}\right) \frac{-i\mathbf{p}}{\hbar} \exp\left(\frac{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}{\hbar}\right) \right. \\
 &\quad \left. - \exp\left(\frac{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}{\hbar}\right) \frac{i\mathbf{p}}{\hbar} \exp\left(\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}{\hbar}\right) \right) \\
 &= \frac{|A|^2}{2m} \mathbf{p} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right) \exp\left(\frac{-i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right) \right. \\
 &\quad \left. + \exp\left(\frac{-i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right) \right] \\
 &= \frac{\mathbf{p}}{m} |A|^2 = \mathbf{v} |A|^2
 \end{aligned}$$

其中 \mathbf{v} 为粒子的运动速度。

3.2 梯形位

如图 3-1 所示, 粒子沿 x 方向运动, 遇到一维梯形位, 其数学表达式为

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

这个位在 $x=0$ 点间断。描述电子在金属边缘时的运动, 常用这种类型的位加以近似处理

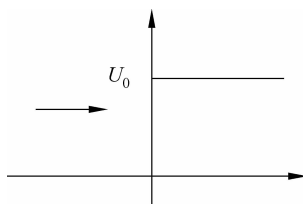


图 3-1 梯形位示意图

3.2.1 方程的解

定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_1''(x) = E \varphi_1(x) \quad (x < 0) \quad (3-11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_2''(x) = (E - V_0) \varphi_2(x) \quad (x \geq 0) \quad (3-12)$$

方程(3-11)和方程(3-12)的通解分别是

$$\varphi_1 = A e^{i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x} + B e^{-i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x} \quad (3-13)$$

$$\varphi_2 = C e^{i \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} x} + D e^{-i \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} x} \quad (3-14)$$

因为我们讨论的是粒子自左向右的运动, 因此当 $E > U_0$ 时, $x > 0$ 区域没有向左运动的波, 应令 $D=0$;

当 $E < U_0$ 时, 式(3-14)变成

$$\varphi_2 = C e^{-\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} x} + D e^{\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} x}$$

为保证波函数有限, D 也必须等于零。

令

$$k_1 \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$k_2 \equiv \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} \quad (E > U_0)$$

$$\alpha \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \quad (E < U_0)$$

于是方程(3-13)和方程(3-14)的解就是

1) 当 $E > U_0$ 时

$$\varphi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0) \quad (3-15)$$

$$\varphi_2 = Ce^{ik_2x} \quad (x \geq 0) \quad (3-16)$$

依照前面的讨论,对于 $x=0$ 点,波函数应连续,并且一阶导数也应该是连续的。于是有

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$$

$$\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$$

得

$$A+B=C, \quad A-B=\frac{k_2}{k_1}C$$

进一步得

$$C = \frac{2k_1}{k_1+k_2}A$$

$$B = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}A$$

2) 当 $0 < E < U_0$ 时,

$$\varphi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0) \quad (3-17)$$

$$\varphi_2 = Ce^{-\alpha x} \quad (x \geq 0) \quad (3-18)$$

由连接条件可得

$$C = \frac{2ik_1}{ik_1-\alpha}A$$

$$B = \frac{ik_1+\alpha}{ik_1-\alpha}A$$

3.2.2 物理讨论

在式(3-15)和式(3-17)中, Ae^{ik_1x} 是描述粒子自左向右,以能量为 E 运动的人射波函数; Be^{-ik_1x} 为反射波函数。在式(3-16)和式(3-18)中, Ce^{ik_2x} 及 $Ce^{-\alpha x}$ 为透射波。

图 3-2 所示为人射波、反射波、透射波示意图。

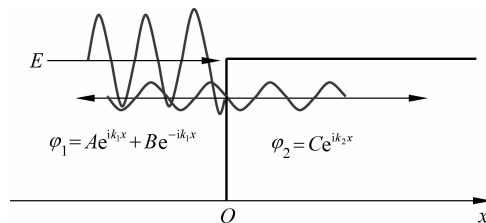


图 3-2 入射波、反射波、透射波示意图

定义反射系数 R 和透射系数 T 分别为

$$R = \frac{|J_R|}{|J_I|}; \quad T = \frac{|J_T|}{|J_I|}$$

其中 $|J_I|$ 、 $|J_R|$ 和 $|J_T|$ 分别为入射波、反射波、透射波的概率流密度绝对值。

由概率流密度定义式

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

得入射波的概率流密度

$$J_I = \frac{i\hbar}{2m}[Ae^{ik_1x}A^*e^{-ik_1x}(-i)k_1 - A^*e^{-ik_1x}Ae^{ik_1x}ik_1] = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2$$

反射波的概率流密度

$$J_R = \frac{i\hbar}{2m}(Be^{-ik_1x}B^*e^{ik_1x}ik_1 + B^*e^{ik_1x}Be^{-ik_1x}ik_1) = -\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2$$

当 $E > U_0$ 时,透射波的概率流密度

$$J_T = \frac{i\hbar}{2m}[Ce^{ik_2x}C^*e^{-ik_2x}(-i)k_2 - C^*e^{-ik_2x}Ce^{ik_2x}ik_2] = \frac{\hbar k_2}{m}|C|^2$$

当 $0 < E < U_0$ 时,透射波的概率流密度

$$J_T = \frac{i\hbar}{2m}[Ce^{-\alpha x}C^*e^{-\alpha x}(-\alpha) - C^*e^{-\alpha x}Ce^{-\alpha x}(-\alpha)] = 0$$

于是,当 $E > U_0$ 时,有

反射系数

$$R = \frac{|J_R|}{|J_I|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

透射系数

$$T = \frac{|J_T|}{|J_I|} = \frac{k_2|C|^2}{k_1|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$R + T = \frac{(k_1 - k_2)^2 + 4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1$$

当 $0 < E < U_0$ 时,在 $x > 0$ 的区域,波函数呈指数衰减,很快降低到零,因此可以认为是没有透射波。

反射系数

$$R = \frac{|J_R|}{|J_I|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|ik_1 + \alpha|^2}{|ik_1 - \alpha|^2} = 1; \quad T = 0$$

这时,入射波全部被反射回来,因此在 $x < 0$ 的区域中,“净”概率流为零。

3.3 一维势垒——隧道效应

3.3.1 问题的提法

位能形式如图 3-3 所示,数学表达如下:

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

其中 U_0 为势垒高度, a 为势垒宽度。

我们讨论的是: 粒子从负无穷远的地方射来, 沿着 x 方向前进, 到达 $x=0$ 点时, 由于势垒的作用, 粒子的德布罗意波将部分被反射, 部分被透射。按照传统波动理论的处理方法, 透射波到达 a 点时再次被部分反射, 部分透射。这样为了求出势垒右边透射的波,

我们必须考虑在 $x=0$ 及 $x=a$ 点之间无数次波的反射、折射, 并把所有透射到势垒右边的分波加起来, 就是透射过来的波。但在量子力学的理论架构中, 无须这样处理。这种势垒问题, 我们所要做的事情只是求出全部自变量变化区域中均有效的薛定谔方程的解, 而且是满足自然条件的解, 这个解自动、简明地计及了根据物理直觉所想到的所有的“反射”。

在 $x>a$ 的区域 3 中, 仅存在穿过势垒的粒子, 不存在向负方向运动的粒子。

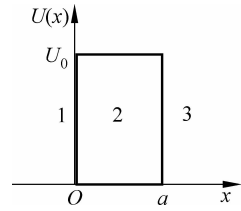


图 3-3 方势垒示意图

3.3.2 定量描述

在 1、2、3 区定态薛定谔方程分别为

$$1 \text{ 区} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} = E \varphi_1$$

$$2 \text{ 区} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + U_0 \varphi_2 = E \varphi_2$$

$$3 \text{ 区} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_3}{dx^2} = E \varphi_3$$

对于 $E > U_0$ 的情况, 令 $k_1 \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$; $k_2 \equiv \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$, 则 3 个区域的定态薛定谔方程解的形式分别为

$$1 \text{ 区} \quad \varphi_1(x) = A e^{ik_1 x} + A' e^{-ik_1 x}$$

$$2 \text{ 区} \quad \varphi_2(x) = B e^{ik_2 x} + B' e^{-ik_2 x}$$

$$3 \text{ 区} \quad \varphi_3(x) = C e^{ik_1 x}$$

在 1、2、3 区域中波函数分别满足有限、单值的要求, 除 $x=0, a$ 点外也处处连续。因此为保证满足处处连续的要求, 只要特别考虑在 $x=0, a$ 处的连接条件就可以了。

按连接条件

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0), \quad \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$$

$$\varphi_2(a) = \varphi_3(a), \quad \varphi_2'(a) = \varphi_3'(a)$$

得

$$A + A' = B + B'$$

$$A - A' = \frac{k_2}{k_1} (B - B')$$

$$B e^{ik_2 a} + B' e^{-ik_2 a} = C e^{ik_1 a}$$

$$B e^{ik_2 a} - B' e^{-ik_2 a} = C \frac{k_1}{k_2} e^{ik_1 a}$$

由上面四式, 可以得到

$$\begin{aligned}
 A' &= \frac{(k_2^1 - k_1^2)(e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a})}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} A \\
 B &= \frac{2k_1(k_2 + k_1)e^{-ik_2 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} A \\
 B' &= \frac{2k_1(k_2 - k_1)e^{-ik_2 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} A \\
 C &= \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} A
 \end{aligned}$$

反射系数

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{|J_R|}{|J_I|} = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a} \right]^{-1} \\
 &= \left[1 + \frac{4E(E - U_0)}{U_0^2 \sin^2 k_2 a} \right]^{-1}
 \end{aligned}$$

透射系数

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{|J_T|}{|J_I|} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}{4k_1^2 k_2^2} \right]^{-1} \\
 &= \left[1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1}
 \end{aligned}$$

可以证明 $R + T = 1$ 。

对于 $0 < E < U_0$ 的情况, 令 $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$, 这时 2 区的波函数为

$$\varphi_2(x) = B e^{\alpha x} + B' e^{-\alpha x}$$

完全类似地, 可以得到此时的反射系数和透射系数分别为

$$\begin{aligned}
 R &= \left[1 + \frac{4E(U_0 - E)}{U_0^2 \operatorname{sh}^2 \alpha a} \right]^{-1} \\
 T &= \left[1 + \frac{U_0^2 \operatorname{sh}^2 \alpha a}{4E(U_0 - E)} \right]^{-1}
 \end{aligned}$$

3.3.3 隧道效应(势垒贯穿)

在 $E > U_0$ 的情况下, 按经典理论, 入射粒子恒可以在势垒的右边出现, 入射波全部透射, 但在量子力学中, 尽管粒子的能量高于势垒高度, 但仍有被反射回来的可能, 即 $R \neq 0, T < 1$ 。

在 $E > U_0$ 但极接近 U_0 的情况时

$$T = \left[1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1} \rightarrow \left(1 + \frac{U_0 m a^2}{2 \hbar^2} \right)^{-1}$$

势垒越低 (U_0 小), 垒的厚度越窄 (a 小), 则越容易透射。

在 $0 < E < U_0$ 的情况下,

$$T = \left[1 + \frac{U_0^2 \operatorname{sh}^2 \alpha a}{4E(U_0 - E)} \right]^{-1}$$

此时, 按经典理论, 入射粒子根本无法穿过势垒透射到垒的另一边, 而是毫无例外地被折回, 这时反射系数为 1, 透射系数为 0, 但在量子力学中, 透射系数并不为 0, 粒子仍有可能穿过势垒而到达垒的另一边。这就是所谓的隧道效应。

当 $V_0 \gg E$ 时, 由前面对 α 的定义可得