第二章 波函数和薛定谔方程

§2.1 波函数的统计解释

描写粒子的波可以认为是概率波，反映微观客体运动的一种统计规律性，波函数Ψ(r, t)有时也称为概率幅。这就是首先由 Born 提出的波函数的概率解释，它是量子力学的基本原理。

（1）波函数

自由粒子的波函数 $\Psi = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\bullet\vec{r} - Et)\right]$

粒子处于随时间和位置变化的力场中运动，他的动量和能量不再是常量（或不同时为常量），波函数记为

$$\Psi(\vec{r}, t)$$

波函数有如下重要性质:

在t时刻，r点处，$d\tau=dxdydz$体积内，找到由波函数$\Phi(r,t)$描写的粒子的概率是:

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

其中，C是比例系数。

在t时刻r点处，单位体积内找到粒子的概率密度是:

$$\omega(r,t)=dW(r,t)/d\tau=C|\Phi(r,t)|^2$$

由于粒子在空间总要出现（不讨论粒子产生和湮灭情况），所以在全空间找到粒子的几率应为一，即:

$$C\int_{\infty}|\Phi(r,t)|^2 d\tau=1$$

$$C=1/\int_{\infty}|\Phi(r,t)|^2 d\tau$$

若 $\Psi(r,t)=\sqrt{C}\Phi(r,t)$ ，二者描写同一个状态，且有

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

$$\omega(r,t)=|\Psi(r,t)|^2$$

$$\int_\infty |\Psi(r,t)|^2 d\tau=1$$

称$\Psi(r,t)$为归一化波函数，$\sqrt{C}$为归一化因子。

注意：对归一化波函数仍有一个模为一的因子不定性。若 $\Psi(r,t)$是归一化波函数，那末，$\exp\{i\delta\}\Psi(r,t)$也是归一化波函数（其中δ是实数），与前者描述同一概率波。$\exp\{i\delta\}$称为相因子。

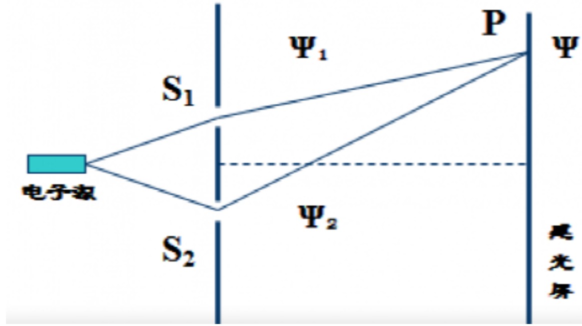
§2.2 态叠加原理

微观粒子具有波动性，会产生衍射图样。而干涉和衍射的本质在于波的叠加性，即可相加性，两个相加波的干涉结果产生衍射。因此，同光学中波的叠加原理一样，量子力学中也存在波叠加原理。

量子力学中的波函数决定体系的状态，所以称波函数为状态波函数，波的叠加原理称为态叠加原理。

考虑电子双缝衍射

一个电子有Ψ_1和 Ψ_2两种可能的状态，Ψ是这两种状态的叠加。



- $\Psi=C_1\Psi_1+C_2\Psi_2$ 也是电子的可能状态，其中C_1、C_2为复数
- 空间找到电子的几率则是:
- $|\Psi|^2=|C_1\Psi_1+C_2\Psi_2|^2$
- $=(C_1^*\Psi_1^*+C_2^*\Psi_2^*)(C_1\Psi_1+C_2\Psi_2)$
- $=|C_1\Psi_1|^2+|C_2\Psi_2|^2+(C_1^*C_2\Psi_1^*\Psi_2+C_1C_2^*\Psi_1\Psi_2^*)$

第三项为相干项，正是由于相干项的出现，才产生了衍射花纹。

态叠加原理一般表述:

若Ψ_1，Ψ_2,...，Ψ_n,...是体系的一系列可能的状态，则这些态的线性叠加

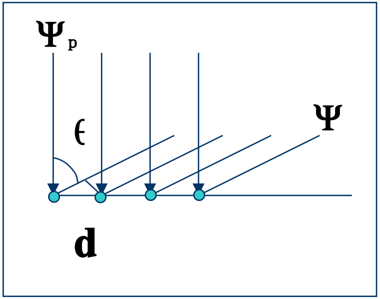
$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + ... + C_n\Psi_n + ...$$

(其中 C_1，C_2,...,C_n,...为复常数)。

也是体系的一个可能状态。

处于Ψ态的体系，部分的处于Ψ_1态，部分的处于Ψ_2态...，部分的处于Ψ_n，...

例： 电子在晶体表面反射后，电子可能以各种不同的动量 p 运动。具有确定动量的运动状态用de Broglie 平面波表示



$$\Psi_{\vec{p}} = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\bullet\vec{r} - Et)\right]$$

根据叠加原理，在晶体表面反射后，电子的状态Ψ可表示成 p 取各种可能值的平面波的线性叠加，即

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{\vec{p}} c(\vec{p})\Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t) \qquad \Psi(\vec{r},t) = \int c(\vec{p})\Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t)d\vec{p},$$

其中 $d\vec{p} = dp_x dp_y dp_z$　　由于 $\vec{p}$ 是连续变化的，

所以后式应用积分代替了求和。

衍射图样正是这些平面波叠加干涉的结果。

波函数Ψ(r, t)可用各种不同动量的平面波表示，下面给出简单证明。即证明下式成立：

$$\Psi(\vec{r},t)=\int_{-\infty}^{\infty} c(\vec{p},t)\Phi_{\vec{p}}(\vec{r})d\vec{p} \;=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty} c(\vec{p},t)\exp[\frac{i}{\hbar}\vec{p}\bullet\vec{r}]dp_x dp_y dp_z$$

$$\Phi_{\vec{p}}(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp[\frac{i}{\hbar}\vec{p}\bullet\vec{r}]$$

展开系数 $c(\vec{p},t)=\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*_{\vec{p}}(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)d\vec{r} =\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\vec{r},t)\exp[-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\bullet\vec{r}]dxdydz$

显然，二式互为 *Fourier* 变换式，故而总是成立 的。

所以 $\Psi(\vec{r},t)$ 与 $c(\vec{p},t)$ 一一对应，

是同一量子态的两种不 同描述方式。

- Ψ(r, t)是以坐标 r 为自变量的波函数，坐标空间波函数，坐标表象波函数；
- C(p, t)是以动量 p 为自变量的波函数，动量空间波函数，动量表象波函数；
- 二者描写同一量子状态。

§2.3 薛定谔方程

（1）引言
（2）建立方程的基本考虑
（3）自由粒子方程
（4）势场中运动粒子的一般方程
（5）多粒子体系的薛定谔方程

（1）引言

微观粒子量子状态用波函数完全描述，波函数确定之后，粒子的任何一个力学量的平均值及其测量的可能值和相应的几率分布也都被完全确定，波函数完全描写微观粒子的状态。因此量子力学最核心的问题就是要解决以下两个问题:

1) 在各种情况下，找出描述系统的各种可能的波函数;

2) 波函数如何随时间演化。

这些问题在1926年Schrodinger 提出了波动方程之后得到了圆满解决。

（2）建立方程的基本考虑

1）经典情况

$t=t_0$时刻，已知初态是： r_0， $\vec{p}_0 = m\left.\frac{d\vec{r}}{dt}\right|_{t=t_0}$

粒子满足的方程是牛顿 方程： $\vec{F} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$

已知初始时刻粒子的位移和速度（位移对时间的一阶导数），根据所满足的牛顿方程（位移对时间二阶导数的常微分方程），可以确定以后任何时刻t粒子的状态位移r和速度V（动量p）。

2）量子情况

① $t=t_0$ 时刻，已知的初态是 $\psi(r, t_0)$，且只知道这样一个初条件，所以，描写粒子状态的波函数所满足的方程只能含 ψ 对时间的一阶导数。

② ψ 要满足态叠加原理，即，若 $\psi_1(r, t)$ 和 $\psi_2(r, t)$ 是方程的解，那末 $\psi(r, t)=C_1\psi_1(r, t)+C_2\psi_2(r, t)$ 也应是该方程的解。这就要求方程应是线性的，也就是说方程中只能包含 ψ，ψ 对时间的一阶导数和对坐标各阶导数的一次项，不能含它们的平方或开方等项。

③方程系数不能包含状态参量，如 p, E 等，否则方程只能被粒子特定的状态所满足，而不能为各种可能的状态所满足。

（3）自由粒子方程

若描写自由粒子波函数: $\Psi = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\bullet\vec{r} - Et)\right]$

是所满足的方程的解，则求t的一阶微商，有

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi \quad \rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi \qquad (1)$$

但这不是所要寻找的方程，因为它包含状态参量E，继续 Ψ 对坐标二次微商，得:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}Ae^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)} = \frac{i}{\hbar}p_x\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2}\Psi,$$

同理有

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} = -\frac{p_y^2}{\hbar^2}\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = -\frac{p_z^2}{\hbar^2}\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2}[p_x^2 + p_y^2 + p_z^2]\Psi$$

$$\nabla^2\Psi = -\frac{1}{\hbar^2}p^2\Psi \quad \text{或} \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi = \frac{p^2}{2\mu}\Psi \qquad (2)$$

(1)−(2)：

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2)\Psi=(E-\frac{p^2}{2\mu})\Psi$$

对自由粒子，$E=\dfrac{p^2}{2\mu}$

所以 $$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi \qquad (3)$$

通过引出自由粒子波动方程的过程可以看出，如果能量关系式$E=p^2/2\mu$　写成如下方程形式:

$$(E-\frac{p^2}{2\mu})\Psi=0$$

$$\begin{cases} E \rightarrow i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla \\ \vec{p}^2 \rightarrow \hat{\vec{p}}^2=-\hbar^2\nabla^2 \end{cases} \qquad (4)$$

根据式（1）和（2）得算符替换（4），代入上式即得自由粒子满足的方程（3）

（4）势场中运动粒子的一般方程

若粒子处于势场 V(r) 中运动，则能动量关系变为:

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(\vec{r}) = H$$

$$E\Psi = [\frac{p^2}{2\mu} + V(\vec{r})]\Psi$$

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

$$= \hat{H}\Psi(\vec{r},t)$$

式中 $\hat{H}$ 是体系的 *Hamilton* 算符，亦常称为 *Hamilton* 量。

该方程称为 Schrodinger 方程，也常称为波动方程。它是量子力学的一个基本假设，正确与否需与实验结果比较来验证。

（5）多粒子体系的薛定谔方程

- 设体系由 N 个粒子组成，
- 质量分别为 μ_i (i = 1, 2,..., N)
- 体系波函数记为 $\psi(r_1, r_2, ..., r_N; t)$
- 第i个粒子所受到的外场 $U_i(r_i)$
- 粒子间的相互作用 $V(r_1, r_2, ..., r_N)$
- 则多粒子体系（非相对论）的 Schrodinger 方程可表示为:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N;t)=$$

$$=\left[\sum_{i=1}^{N}[-\frac{\hbar^2}{2\mu_i}\nabla_i^{\ 2}+U_i(\vec{r}_i)]+V(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N;t)$$

§2.4 粒子流密度和粒子数守恒定律

概率密度 $\omega(\vec{r},t)=\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)=|\Psi(\vec{r},t)|^2$

则 $\frac{\partial\omega}{\partial t}=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$

若V表示总的势能，则方程及其共轭形式分别为（5）和（6）式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V]\Psi \qquad (5)$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*=[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V]\Psi^* \qquad (6)$$

将$\Psi^*\times(5)-\Psi\times(6)$式得:

$$i\hbar\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi+i\hbar\Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*=-\frac{\hbar^2}{2\mu}[\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*]$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\bullet[\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi]$$

令 $\vec{J}=\frac{i\hbar}{2\mu}[\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi]$ 则根据上式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\bullet[\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi]$$

有 $$\frac{\partial}{\partial t}\omega+\nabla\bullet\vec{J}=0$$

此即概率（粒子数）守恒定律的微分形式，与流体力学中连续性方程的形式相同。

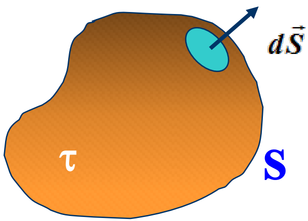
在空间闭区域 τ 中积分，则有：

$$\frac{d}{dt}\int_\tau \omega(\vec{r},t)d\tau=-\int_\tau \nabla\bullet\vec{J}d\tau$$

Gauss 定理 $$\frac{d}{dt}\int_\tau \omega(\vec{r},t)d\tau=-\oint_S \vec{J}\bullet d\vec{S} \qquad (7)$$

$\omega(\vec{r},t)=\Psi^*\Psi$

S是体积τ的表面。



$$\frac{d}{dt}\int_\tau \omega(\vec{r},t)d\tau = -\oint_S \vec{J}\bullet d\vec{S} \qquad (7)$$

$$\omega(\vec{r},t) = \Psi^*\Psi$$

S是体积τ的表面。

（7）式表示单位时间内通过 τ 的封闭表面S流入（面积分前面的负号）τ 内的概率.

$\vec{J}$ 可解释为概率流密度矢量，它在S面上法向分量可表示单位时间内流过S面上单位面积的概率.

令τ趋于 ∞，即让积分对全空间进行，考虑到任何真实的波函数应该是平方可积的，波函数在无穷远处为零，则式右面积分趋于零，于是（7）式变为:

$$\frac{d}{dt}\int_\infty \omega(\vec{r},t)d\tau = 0$$

$$\frac{d}{dt}\int_{\infty}\omega(\vec{r},t)d\tau = 0$$

上式表明，在整个空间内找到粒子的总概率与时间无关，当空间某处概率减少了，必然另外一些地方概率增加，使总概率不变，并伴随着某种流来实现这种变化;上式还表明波函数如果是归一的，则其归一化的性质不随时间改变。

以μ乘连续性方程等号两边，得到质量密度和质量流密度矢量:

$$\begin{cases}\omega_\mu \equiv \mu\omega = \mu|\Psi(\vec{r},t)|^2 \\ \vec{J}_\mu \equiv \mu\vec{J} = \dfrac{i\hbar}{2}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)\end{cases}$$

质量守恒定律: $\dfrac{\partial}{\partial t}\omega_\mu + \nabla\bullet\vec{J}_\mu = 0$

以e乘连续性方程等号两边，得到电荷密度和电流密度矢量:

$$\begin{cases} \omega_e \equiv e\omega = e\,|\Psi(\vec{r},t)|^2 \\ \vec{J}_e \equiv e\vec{J} = e\dfrac{i\hbar}{2\mu}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) \end{cases}$$

同理可得量子力学的电荷守恒定律:

$$\frac{\partial}{\partial t}\omega_e + \nabla \bullet \vec{J}_e = 0$$

在建立了薛定谔方程和证明了粒子数守恒定律之后，下面讨论波函数一般应满足的条件或波函数的性质。

波函数的性质

（1）波函数完全描述粒子的状态

1) 由 Born 的统计解释可知，描写粒子的波函数已知后，就知道了粒子在空间的几率分布，即

$$d\omega(r, t) = |\psi(r, t)|^2 d\tau$$

2) 已知 $\psi(r, t)$，则任意力学量的平均值、可能值及相应的几率就都知道了，也就是说，描写粒子状态的一切力学量就都知道了。所以波函数又称为状态波函数或态函数。

3) 知道体系所受力场和相互作用及初始时刻体系的状态后，由Schrodinger方程即可确定以后时刻的状态。

（2）波函数标准条件

1) 根据Born统计解释 $\omega(r, t) = \psi^*(r, t)\psi(r, t)$ 是粒子在t时刻出现在 r点的几率，这是一个确定的数，所以要求 $\psi(r, t)$ 应是 r, t的单值函数且有限。

（2）波函数标准条件

1)根据Born统计解释，$\omega(r,t)=\psi^*(r,t)\psi(r,t)$是粒子在t时刻出现在 r点的几率，这是一个确定的数，所以要求$\psi(r,t)$应是r, t的单值函数且有限。

2）根据粒子数守恒定律

$$\frac{d}{dt}\int_\tau \omega(\vec{r},t)d\tau = -\oint_S \vec{J}\bullet d\vec{S}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2\mu}\oint_S [\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi]\bullet d\vec{S}$$

- 式右含有ψ及其对坐标一阶导数的积分，由于积分区域τ是任意选取的，所以S是任意闭合面。要使积分有意义，ψ必须在变数的全部范围，即空间任何一点都应是有限、连续且其一阶导数亦连续。
- 概括之，波函数在全空间每一点通常应满足单值、有限、连续三个条件，该条件称为波函数的标准条件。

§2.5 定态薛定谔方程

讨论有外场（与时间无关）情况下的Schrodinger 方程:

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

V(r)与t无关时，可以分离变量，令

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})f(t)$$

$$i\hbar\psi(\vec{r})\frac{d}{dt}f(t)=f(t)[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V]\psi(\vec{r})$$

两边同除 $\psi(\vec{r})f(t)$

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{d}{dt}f(t)=\frac{1}{\psi(\vec{r})}[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V]\psi(\vec{r})=E$$

$$\begin{cases} i\hbar\frac{d}{dt}f(t)=Ef(t) \\ [-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \end{cases} \Longrightarrow f(t)\sim e^{-iEt/\hbar}$$

于是: $\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

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

此波函数与时间t的关系是正弦型的，其角频率 ω=2πE/h。 由de Broglie关系可知： 就是体系处于波函数Ψ(r, t)所描写的状态时的能量。也就是说，此时体系能量有确定的值，所以这种状态称为定态，波函数Ψ(r, t)称为定态波函数。

空间波函数ψ(r)可由方程和具体问题中应满足的边界条件得出

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

该方程称为定态 Schrodinger 方程，ψ(r)也可称为定态波函数，或可看作是t=0时刻ψ(r, 0)的定态波函数。

Hamilton算符和能量本征值方程

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{d}{dt} f(t) = Ef(t) \\ [-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \end{cases}$$

注意到 $\Psi = \psi \exp[-iEt/\hbar]$，得：

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi \\ [-\dfrac{\hbar}{2\mu}\nabla^2 + V]\Psi = E\Psi \end{cases}$$

二方程的特点：都是以一个算符作用于Ψ(r, t)等于EΨ(r, t)。所以这两个算符是完全相当的（作用于定态波函数上的效果一样）。

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

作用于任一波函数Ψ上的二算符是相当的。这两个算符都称为能量算符。

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V = \hat{H} \end{cases}$$

与经典力学相同，$\hat{H}$称为*Hamilton*量，亦称*Hamilton*算符。

将 $[-\frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2+V]\Psi=E\Psi$ 改写成 $\hat{H}\Psi=E\Psi$

（1）一个算符作用于一个函数上得到一个常数乘以该函数这与数学物理方法中的本征值方程相似。

数学物理方法中：微分方程+边界条件构成本征值问题;

（2）量子力学中：波函数要满足三个标准条件，对应数学物理方法中的边界条件，称为波函数的自然边界条件。因此在量子力学中称与上类似的方程为束缚的本征值方程。常量E称为算符H的本征值； Ψ 称为算符H的本征函数。

（3）由上面讨论可知，当体系处于能量算符本征函数所描写的状态（简称能量本征态）时，粒子能量有确定的数值，这个数值就是与这个本征函数相应的能量算符的本征值。

讨论定态问题就是要求出体系可能有的定态波函数 $\Psi(r,t)$ 和在这些态中的能量E。其具体步骤如下：

（1）列出定态Schrodinger方程

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

（2）根据波函数标准条件求解能量E的本征值

本征值： $E_1, E_2, \cdots, E_n, \cdots$

本征函数 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n, \cdots$

（3）写出定态波函数对应第n个本征值E_n 的定态波函数

$$\Psi_n(\vec{r},t) = \psi_n(\vec{r})\exp[-iE_n t/\hbar]$$

（4）通过归一化确定归一化系数 C_n

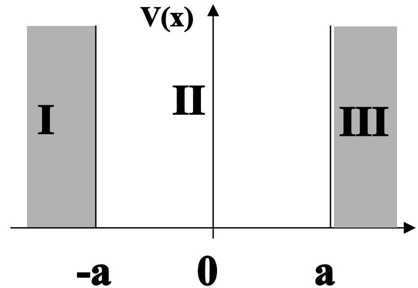
$$\int_{-\infty}^{\infty} |C_n\psi_n(\vec{r})|^2 d\tau = 1$$

作业

2.1
2.2

§2.6 一维无限深方势阱

$$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<a \\ \infty & |x|\geq a\end{cases}$$



- 求解薛定谔方程分四步:
- （1）写方程; （2）解方程; （3）定系数; （4）归一化

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi^{I}(x)-\frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E)\psi^{I}(x)=0 \qquad x\leq -a$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi^{II}(x)+\frac{2\mu}{\hbar^2}E\psi^{II}(x)=0 \qquad -a<x<a$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi^{III}(x)-\frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E)\psi^{III}(x)=0 \qquad x\geq a$$

根据波函数应满足的连续性和有限性条件，在势能无限大区域内波函数为零，即I和III区波函数

$$\psi^{I}=\psi^{III}=0,|x|>a$$

引入符号 $m=\mu,\alpha=\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$ 则II区方程写为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\alpha^2\psi=0$$

它的解是 $\psi=A\sin\alpha x+B\cos\alpha x$

根据波函数连续性知 $\psi(\pm a)=0$ 所以有

$$\psi(+a)=A\sin\alpha a+B\cos\alpha a=0$$

$$\psi(-a)=-A\sin\alpha a+B\cos\alpha a=0$$

补充：特征根法

设特征方程$r^2 - pr - q = 0$两根为r_1、r_2。

① 若实根r_1不等于r_2

$$y = c_1 e^{r_1 x} + c_2 e^{r_2 x}$$

② 若实根$r_1 = r_2$

$$y = (c_1 + c_2 x) e^{r_1 x}$$

③ 若有一对共轭复根$a \pm bi$

$$y = e^{ax}(c_1 \cos bx + c_2 \sin bx)$$

或 $$y = c_1 e^{(a+ib)x} + c_2 e^{(a-ib)x}$$

$$\psi(+a) = A\sin\alpha a + B\cos\alpha a = 0$$

$$\psi(-a) = -A\sin\alpha a + B\cos\alpha a = 0$$

则有 $A\sin\alpha a = 0$

$B\cos\alpha a = 0$

考虑A和B不能同时为零，否则，ψ在II区处处为零，没有意义

因此得到两组解

$$(1) A = 0, \cos\alpha a = 0$$

$$(2) B = 0, \sin\alpha a = 0$$

由此可得 $\alpha a = \frac{n}{2}\pi, n = 1,2,3,......$

对（1）组，n取奇数，（2）组取偶数，n=0对应ψ恒为零的解，n为负整数与正整数解线性相关（仅差一负号），故都不取。

由定义$\alpha=\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$ 和 $\alpha a=\frac{n}{2}\pi, n=1,2,3,\ldots\ldots$

有 $E_n=\frac{\alpha^2\hbar^2}{2m}=\frac{(\frac{n\pi}{2a})^2\hbar^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}, n=1,2,3,\ldots\ldots$

n取正偶数，求得En对应的波函数为

$$\psi_n=\begin{cases}A\sin\frac{n\pi}{2a}x, n\text{为正偶数}, & |x|<a\\ 0, & |x|\geq a\end{cases}$$

n取正奇数，求得En对应的波函数为

$$\psi_n = \begin{cases} B\cos\frac{n\pi}{2a}x, n为正奇数, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}$$

二者合并，求得En对应的波函数为

$$\psi_n = \begin{cases} A'\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a), n为正整数, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}$$

$$A' = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

一维无限深方势阱中粒子的定态波函数是

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)\ e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}=A'\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$\because \sin\theta=\frac{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}{2i}$$

$$\therefore \psi_n(x,t)=A'\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}=\frac{A'e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}{2i}[e^{i\frac{n\pi}{2a}(x+a)}-e^{-i\frac{n\pi}{2a}(x+a)}]$$

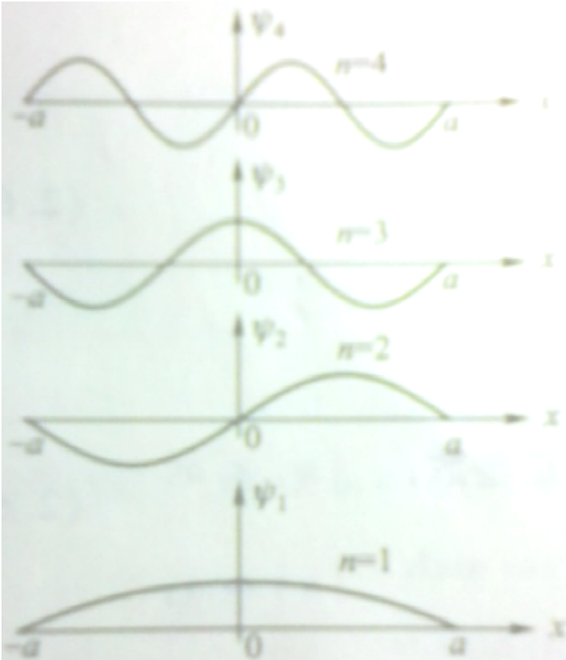
$$=\frac{A'}{2i}[e^{i\frac{n\pi}{2}}e^{i\frac{n\pi}{2a}x-\frac{i}{\hbar}E_n t}-e^{-i\frac{n\pi}{2}}e^{-i\frac{n\pi}{2a}x-\frac{i}{\hbar}E_n t}]$$

$$=\frac{A'}{2i}[e^{i\frac{n\pi}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}x-E_n t)}-e^{-i\frac{n\pi}{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}x+E_n t)}]$$

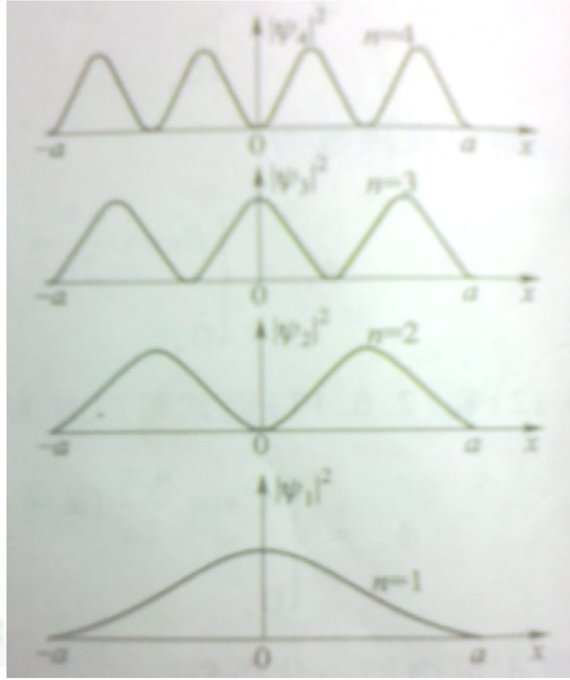
$$=\frac{A'}{2i}e^{i\frac{n\pi}{2}}\bullet e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}x-E_n t)}-\frac{A'}{2i}e^{-i\frac{n\pi}{2}}\bullet e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}x+E_n t)}$$

$$=C_1e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}x-E_n t)}+C_2e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}x+E_n t)} \longleftarrow$$

两个沿相反方向传播的平面波叠加而成的驻波



一维无限深方势
阱的能量本征函数



一维无限深方势阱中
粒子概率密度分布

(1) 波函数随n表现出确定的奇偶性，由势能对称性而来;

(2) 对应n的波函数有n-1个节点，节点处概率为零

作业

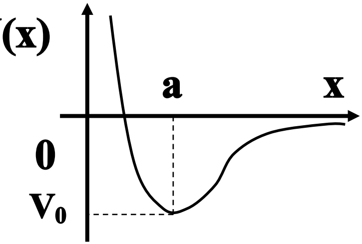
2.3

2.4

§ 2.7 线性谐振子

$$V(x)=V(a)+\frac{1}{1!}\frac{\partial V}{\partial x}\bigg|_{x=a}(x-a)+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\bigg|_{x=a}(x-a)^2+\cdots$$

$$\approx V_0+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\bigg|_{x=a}(x-a)^2=V_0+\frac{1}{2}k(x-a)^2$$



取新坐标原点为(a, V_0)，则势可表示为标准谐振子势的形式:

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2 \qquad k=m\omega^2=\mu\omega^2$$

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+[E-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2]\right\}\psi(x)=0 \quad 或: \left\{\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2]\right\}\psi(x)=0$$

令: $\xi=\alpha x$ 其中 $\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$, 则方程可改

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+[\lambda-\xi^2]\psi(x)=0 \qquad 其中 \qquad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

ξ → ± ∞时，此变系数二阶常微分方程写为

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\xi^2}-\xi^2\psi_\infty=0$$

其解φ ~ exp[± ξ²/2]，考虑有限性， φ ~ exp[− ξ²/2]

方程解记为 $\psi(\xi)=H(\xi)e^{-\xi^2/2}$

其中 H(ξ) 必须满足波函数的单值、有限、连续的标准条件。即:

- ① 当ξ有限时，H(ξ)有限;
- ② 当ξ → ∞时，H(ξ)的行为要保证φ(ξ)→ 0。

$$\frac{d\psi}{d\xi}=(-\xi H+\frac{dH}{d\xi})e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=(-H-\xi\frac{dH}{d\xi}+\frac{d^2H}{d\xi^2}+\xi^2H-\xi\frac{dH}{d\xi})e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$=(-H-2\xi\frac{dH}{d\xi}+\frac{d^2H}{d\xi^2}+\xi^2H)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$ 代入 $$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+[\lambda-\xi^2]\psi(x)=0$$

得

$$(-H-2\xi\frac{dH}{d\xi}+\frac{d^2H}{d\xi^2}+\xi^2H)e^{-\frac{\xi^2}{2}}+(\lambda-\xi^2)He^{-\frac{\xi^2}{2}}=0$$

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

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

简记为 $$H''-2\xi H'+(\lambda-1)H=0$$

以幂级数形式来解，令: $H=\sum_{k=0} b_k\xi^k$

$$H'=\sum_{k=0} b_k k\xi^{k-1} \qquad 2\xi H'=\sum_{k=0} 2b_k k\xi^k$$

$$H''=\sum_{k=0} b_k k(k-1)\xi^{k-2}=\sum_{k=2} b_k k(k-1)\xi^{k-2}$$

令 $k'=k-2$ 则:

$$H''=\sum_{k'=0} b_{k'+2}(k'+1)(k'+2)\xi^{k'}=\sum_{k=0} b_{k+2}(k+1)(k+2)\xi^k$$

则方程 $H''-2\xi H'+(\lambda-1)H=0$ 变成:

$$\sum_k [b_{k+2}(k+1)(k+2)-b_k 2k+b_k(\lambda-1)]\xi^k=0$$

$$\sum_k [b_{k+2}(k+1)(k+2) - b_k 2k + b_k(\lambda - 1)]\xi^k = 0$$

该式对任意ξ都成立，故ξ同次幂前的系数均应为零

即 $b_{k+2}(k+2)(k+1) - b_k 2k + b_k(\lambda - 1) = 0$

从而导出系数 b_k 的递推公式:

$$b_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+1)(k+2)} b_k$$

b_0 决定所有角标k为偶数的系数；b_1 决定所有角标k为奇数的系数。
方程是二阶微分方程，应有两个线性独立解。可分别令

$b_0 \neq 0,\ b_1 = 0 \rightarrow H^{even}(\xi)$
$b_1 \neq 0,\ b_0 = 0 \rightarrow H^{odd}(\xi)$.

则通解可记为:

$$H = c_o H^{odd} + c_e H^{even}$$
$$\psi = (c_o H^{odd} + c_e H^{even}) \exp[-\xi^2/2]$$

单值性和连续性二条件自然满足，只剩下第三个有限性条件需要进行讨论。

因为H(ξ)是一个幂级数，故应考虑他的收敛性。考虑一些特殊点，即势场有跳跃的地方以及x=0, x→±∞或ξ=0，ξ→±∞。

(I) ξ=0

$\exp[-\xi^2/2]=1$

$H^{even}(\xi)=b_0$

$H^{odd}(\xi)=0$

皆有限

(II) ξ→±∞ 需要考虑无穷级数H(ξ)的收敛性

考察相邻两项之比：

$$\frac{b_{k+2}\xi^{k+2}}{b_k\xi^k}=\frac{2k+1-\lambda}{(k+1)(k+2)}\xi^2 \xrightarrow[k\to\infty]{} \frac{2}{k}\xi^2$$

$$\exp[\xi^2]=1+\frac{\xi^2}{1!}+\frac{\xi^4}{2!}+\cdots+\frac{\xi^k}{(\frac{k}{2})!}+\frac{\xi^{k+2}}{(\frac{k}{2}+1)!}+\cdots$$

相继两项之比：

$$\frac{\dfrac{\xi^{k+2}}{(\frac{k}{2}+1)!}}{\dfrac{\xi^k}{(\frac{k}{2})!}}=\frac{(\frac{k}{2})!}{(\frac{k}{2}+1)!}\xi^2=\frac{1}{(\frac{k}{2}+1)}\xi^2 \xrightarrow[k\to\infty]{} \frac{2}{k}\xi^2$$

当ξ→±∞时，H(ξ)的渐近行为与exp[ξ²]相同。

总波函数有如下发散行为:

$$\psi(\xi)=H(\xi)\exp[-\tfrac{1}{2}\xi^2]\underset{\xi\to\infty}{\longrightarrow}\exp[\xi^2]\exp[-\tfrac{1}{2}\xi^2]=\exp[\tfrac{1}{2}\xi^2]\underset{\xi\to\infty}{\longrightarrow}\infty$$

为了满足波函数有限性要求，幂级数 H(ξ) 必须从某一项截断变成一个多项式。换言之，要求 H(ξ) 从某一项（比如第 n 项）起 以后各项的系数均为零，即 $b_n\neq 0$, $b_{n+2}=0$.

$$b_{n+2}=\frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)}b_n=0$$

因为 $b_n\neq 0$, 所以有:

$$2n+1-\lambda=0$$

因为 $\lambda=\dfrac{2E}{\hbar\omega}\quad\rightarrow\quad E=\tfrac{1}{2}\lambda\hbar\omega$

于是最后得: $\lambda=2n+1$

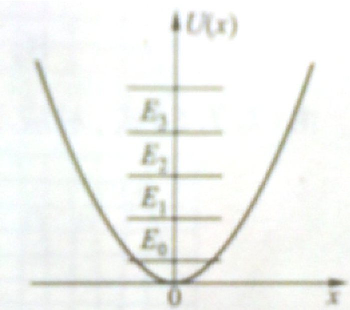
$$E=(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\qquad n=0,1,2,\cdots$$

结论:

基于波函数在无穷远处的有限性条件导致了能量必须取分立值。

$$E_{n+1}-E_n=\hbar\omega$$

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$$



线性谐振子的能级

对应于λ=2n+1 中不同的n，方程 $H''-2\xi H'+(\lambda-1)H=0$

有不同的解Hn（ξ），称之为厄米多项式，可表示为

$$H_n(\xi)=(-1)^n\exp[\xi^2]\frac{d^n}{d\xi^n}\exp[-\xi^2]$$

其最高次幂是n，它的系数为2^n，且满足如下递推关系：

$$\frac{dH_n}{d\xi}=2nH_{n-1}(\xi)$$

$$H_{n+1}-2\xi H_n+2nH_{n-1}=0$$

$H_0=1$，　$H_1=2\xi$，则根据上述递推关系得出：

$H_2=2\xi H_1-2nH_0=4\xi^2-2$

$H_3=2\xi H_2-2nH_1=8\xi^3-12\xi$

$H_4=2\xi H_3-2nH_2=16\xi^4-48\xi^2+12$

$H_5=2\xi H_4-2nH_3=32\xi^5-160\xi^3+120\xi$

厄米函数　$\psi_n = N_n \exp[-\frac{1}{2}\xi^2] H_n(\xi)$

由正交归一化条件 $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\psi_{n'}(x) = \delta_{nn'}$ 得：

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

考虑厄米函数 $\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$

则其奇偶性由Hn，即n决定，称为n宇称。

宇称

（1）空间反射：空间矢量反向的操作。

$$\vec{r} \Rightarrow -\vec{r} \qquad \psi(\vec{r},t) \Rightarrow \psi(-\vec{r},t)$$

（2）此时如果有： $\psi(-\vec{r},t) = \pm\psi(\vec{r},t)$

$\psi(-\vec{r},t) = +\psi(\vec{r},t)$ 称波函数具有正宇称（或偶宇称）；

$\psi(-\vec{r},t) = -\psi(\vec{r},t)$ 称波函数具有负宇称（或奇宇称）；

（3）如果在空间反射下，

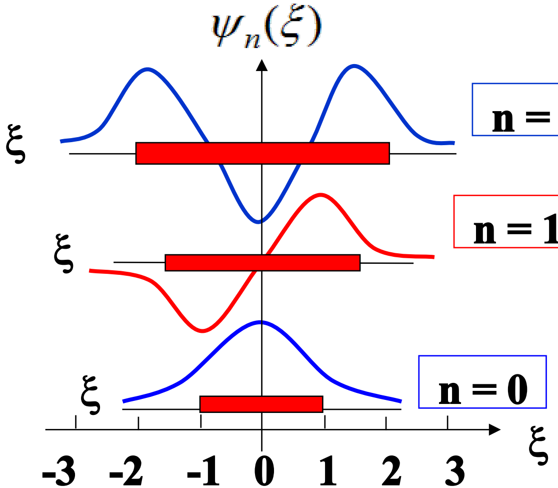
$$\psi(-\vec{r},t) \neq \pm\psi(\vec{r},t)$$

则波函数没有确定的宇称。

基于厄密多项式的递推关系可以导出谐振子波函数
Ψ (x) 的递推关系：

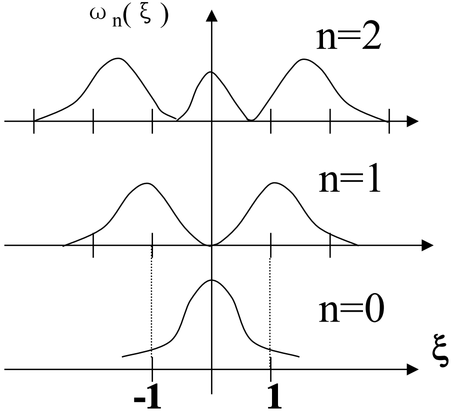
$$\xi\psi_n(\xi)=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi)+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi)$$

$$\frac{d}{d\xi}\psi_n(\xi)=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi)-\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi)$$

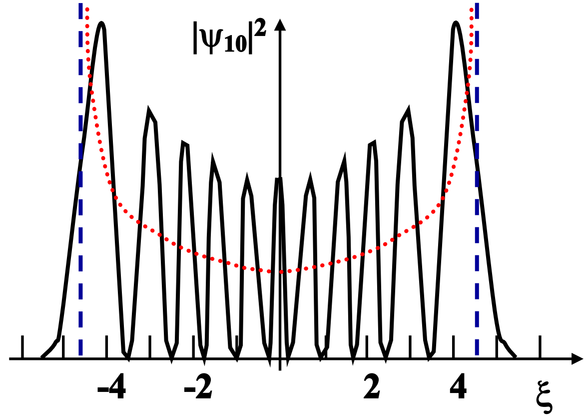


线性谐振子的前三个本征函数

左图中标红的粗红线表示具有相同能量的经典线性谐振子的振动范围，本征函数Ψn有n个节点（与横轴的交点）。



线性谐振子的概率密度



n=10 时线性谐振子的概率密度

在经典力学中，在ξ到ξ+dξ区域内找到质点的概率与其逗留的时间成比例，即ω(ξ)dξ=dt/T，则有

$$\omega(\xi)=\frac{1}{T\dfrac{d\xi}{dt}}=\frac{1}{vT}$$

考虑ξ=asin(ωt+δ)，则

$$v=\frac{d\xi}{dt}=a\omega\cos(\omega t+\delta)=a\omega\left(1-\frac{\xi^2}{a^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

所以 $\omega(\xi)=\dfrac{1}{vT}=\dfrac{1}{a\omega T}\left(1-\dfrac{\xi^2}{a^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$

如上图红色虚线所示，n=10 时量子和经典在平均上相当符合

作业

2.5

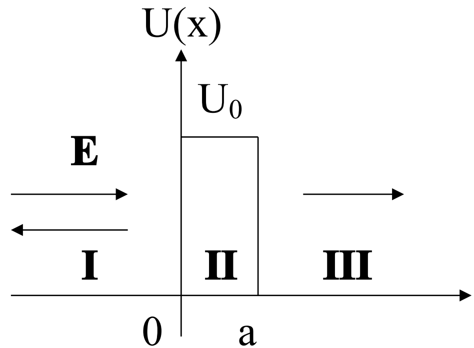
2.6

§2.8 势垒贯穿

对一维无限深方势阱和线性谐振子的束缚态情形，波函数在无限远处为零的有限性条件要求使得体系的能级是分立的。对粒子被势场散射，由无限远处来，散射后又到无限远处去的问题，能量可以取任意值，组成连续谱，如方势垒情形：

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

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 & x<0, x>a \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}[E-U_0]\psi=0 & 0<x<a \end{cases}$$



一维方势垒

（1）E ＞ U_0

令 $k_1=(\frac{2mE}{\hbar^2})^{\frac{1}{2}}$， $k_2=[\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}]^{\frac{1}{2}}$ 有

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

则解得

$$\begin{cases} \psi_1=Ae^{ik_1x}+A'e^{-ik_1x} \\ \psi_2=Be^{ik_2x}+B'e^{-ik_2x} \\ \psi_3=Ce^{ik_1x}+C'e^{-ik_1x} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Psi_1=\psi_1e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=Ae^{\frac{i}{\hbar}(k_1\hbar x-Et)}+A'e^{\frac{i}{\hbar}(-k_1\hbar x-Et)} \\ \Psi_2=\psi_2e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=Be^{\frac{i}{\hbar}(k_2\hbar x-Et)}+B'e^{\frac{i}{\hbar}(-k_2\hbar x-Et)} \\ \Psi_3=\psi_3e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=Ce^{\frac{i}{\hbar}(k_3\hbar x-Et)}+C'e^{\frac{i}{\hbar}(-k_3\hbar x-Et)} \end{cases}$$

因为 $p_{1,2}=\hbar k_{1,2}=mv_{1,2}$ 所以上式加号左边项表示与x轴同向，即由左向右传播的平面波（入射波），右边项表示与x轴反向，即由右向左传播的平面波（反射波）。x>a区只有向右传播的透射波，故C’=0.

所以 $\begin{cases} \psi_1 = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} \\ \psi_2 = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} \\ \psi_3 = Ce^{ik_1x} \end{cases}$ 由连续性条件有

$x=0:$

$\psi_1(0)=\psi_2(0) \Rightarrow A+A'=B+B'$

$x=0:$

$\psi_1'(0)=\psi_2'(0) \Rightarrow ik_1A-ik_1A'=ik_2B-ik_2B'$

$x=a:$

$\psi_2(a)=\psi_3(a) \Rightarrow$

$Be^{ik_2a}+B'e^{-ik_2a}=Ce^{ik_1a}$

$x=a:$

$\psi_2'(a)=\psi_3'(a) \Rightarrow$

$ik_2Be^{ik_2a}-ik_2B'e^{-ik_2a}=ik_1Ce^{ik_1a}$

$$\begin{cases} A'-B-B'=-A \\ Be^{ik_2a}+B'e^{-ik_2a}-Ce^{ik_1a}=0 \\ k_1A'+k_2B-k_2B'=k_1A \\ k_2Be^{ik_2a}-k_2B'e^{-ik_2a}-k_1Ce^{ik_1a}=0 \end{cases}$$

$$C=\frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}}A$$

$$A'=\frac{2i(k_1^2-k_2^2)\sin k_2a}{(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}-(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}}A$$

$$\vec{J}=\frac{i\hbar}{2m}[\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi] \qquad \vec{J}=\frac{i\hbar}{2m}[\psi\frac{d}{dx}\psi^*-\psi^*\frac{d}{dx}\psi]$$

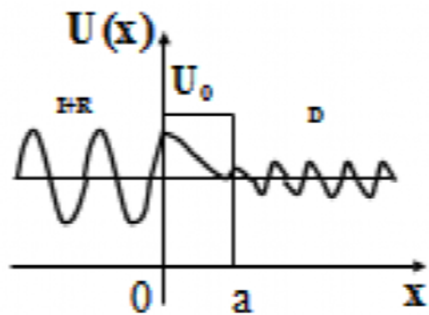
$$J_I=\frac{i\hbar}{2m}[Ae^{ik_1x}\frac{d}{dx}A^*e^{-ik_1x}-A^*e^{-ik_1x}\frac{d}{dx}Ae^{ik_1x}=\frac{k_1\hbar}{m}|A|^2$$

$$J_D=\frac{k_1\hbar}{m}|C|^2 \qquad D=\frac{J_D}{J_I}=\frac{|C|^2}{|A|^2}=\frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2k_2a+4k_1^2k_2^2}$$

$$J_R=-\frac{k_1\hbar}{m}|A'|^2 \quad R=\frac{J_R}{J_I}=\frac{|A'|^2}{|A|^2}=\frac{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2k_2a}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2k_2a+4k_1^2k_2^2}$$

D+R=1

在E>U_0情形下，入射粒子一部分贯穿势垒，一部分被反射回去



补充：http://en.wikipedia.org/wiki/Euler%27s_formula

欧拉公式 $e^{ix} = \cos x + i\sin x$

cos(iz)+isin(iz)=exp(i*iz)=exp(-z)   (1)

cos(-iz)+isin(-iz)=exp(i*-iz)=exp(z)   (2)

[(1)-(2)]/2i =>

sin(iz)=[exp(-z)-exp(z)]/2i=isinhz

sinhz=shz=[exp(z)-exp(-z)]/2

[(1)+(2)]/2 =>

cos(iz)=[exp(-z)+exp(z)]/2=coshz

coshz=chz=[exp(z)+exp(-z)]/2

（2）E ＜ U_0

令$k_2=ik_3$　则$k_3=[2m(U_0-E)/\hbar]^{1/2}$，为实数，则

$$C=\frac{2ik_1k_3e^{-ik_1a}}{(k_1^2-k_3^2)\mathrm{sh}k_3a+2ik_1k_3\mathrm{ch}k_3a}A \qquad D=\frac{4k_1^2k_3^2}{(k_1^2+k_3^2)^2\mathrm{sh}^2k_3a+4k_1^2k_3^2}$$

如果**E**很小，以致$\mathbf{k_3a>>1}$，则 $e^{k_3a}>>e^{-k_3a}$

$$\mathrm{sh}^2k_3a=\left(\frac{e^{k_3a}-e^{-k_3a}}{2}\right)^2\approx\frac{1}{4}e^{2k_3a}$$

$$D\approx\frac{4k_1^2k_3^2}{(k_1^2+k_3^2)^2\frac{1}{4}e^{2k_3a}+4k_1^2k_3^2}=\frac{4}{\frac{1}{4}[\frac{k_1}{k_3}+\frac{k_3}{k_1}]^2e^{2k_3a}+4}$$

$\frac{k_1}{k_3}+\frac{k_3}{k_1}>1$，且 $k_3a>>1$, $e^{2k_3a}>>4$

$$D\approx\frac{16}{[\frac{k_1}{k_3}+\frac{k_3}{k_1}]^2}e^{-2k_3a}=D_0e^{-2k_3a}=D_0e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}} \qquad D_0=\frac{16}{[\frac{k_1}{k_3}+\frac{k_3}{k_1}]^2}=16\frac{E(U_0-E)}{U_0^2}$$

$E = 1eV, U_0 = 2eV$

电子

$a = 2 \times 10^{-8}$ cm = 2Å,
$D \approx 0.51$

$a = 5 \times 10^{-8}$cm = 5 Å,
$D \approx 0.024$

质子

$m_p/m_e \approx 1840$
a = 2 Å
$D \approx 2 \times 10^{-38}$

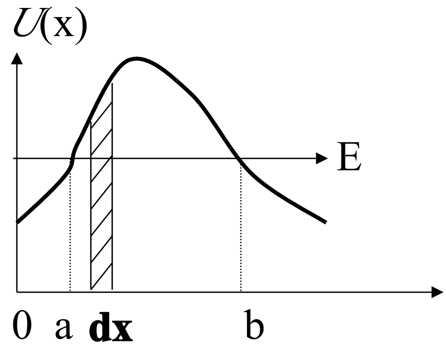
当势垒高度一定时，透射系数D 取决于粒子质量和势垒宽度

dx:

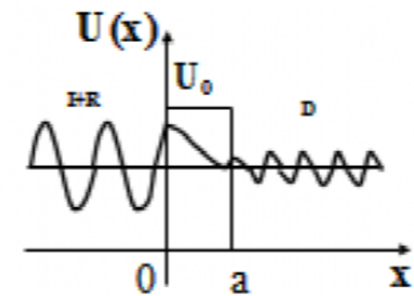
$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m[U(x)-E]}dx}$$

a~b:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m[U(x)-E]}dx}$$



粒子在能量E小于势垒高度时仍能贯穿势垒的现象称为隧道效应。它是粒子具有波动性的生动表现。当然，这种现象只在一定条件下才比较显著。右图给出了势垒穿透的波动图象。



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。