

## 2.4 一维势垒贯穿

到此为止我们遇到不含时薛定谔方程的两种解. 一种是束缚态, 可以归一化, 能量不连续, 一种是散射态, 也称游离态, 不能归一化, 能量连续. 虽然后者本身不对应可以实现的真实状态, 但是可以叠加成‘真实’的波包.

在经典物理里面, 束缚态粒子在  $E < V(x)$  的区域运动. 如果粒子能量在左边大于  $V(x)$ , 它可以从左边来, 在  $E = V(x)$  的地方停下, 然后回到无穷远处. 这两种运动状态就对应束缚态和散射态.

但是满足量子力学的粒子, 由于‘隧穿效应’, 只要  $E > V(\pm\infty)$ , 就处于散射态, 即可以到达无穷远处. 这是不同于经典粒子的地方.

参考图2.4.

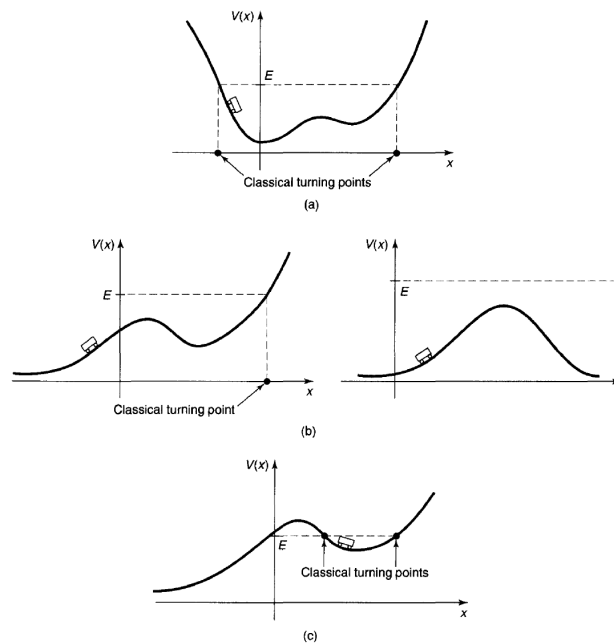


Figure 2.7: (a) A bound state. (b) Scattering states. (c) A classical bound state, but a quantum scattering state.

Figure 2.5: 经典与量子束缚态和散射态.(c) 经典的束缚态, 量子的散射态.

考虑一个质量为  $m$  的粒子在以下势垒中的运动

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > a \\ V_0 > 0, & 0 \leq x \leq a \end{cases} \quad (2.118)$$

显然势垒没有办法束缚粒子, 我们研究所谓‘散射’态.

我们假设粒子是从左边入射来的. 假设它的能量  $E > 0$ , 但是低于  $V_0$ . 根据经典力学粒子不可能穿过势垒到达  $x > a$  的区域, 它会在  $x = 0$  处反弹回去. 如果你发射大量这样的粒子, 百分之百都会被发弹回去. 那么量子力学对这个问题会给出什么样的答案呢?

我们考虑定态. 由于粒子能量  $E > 0$ , 我们实际上在处理一个游离态问题(粒子会在无穷远处出现). 波函数可以写成

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.119)$$

空间波函数满足定态薛

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x)'' = E\psi(x) \quad (2.120)$$

在  $x < 0, x > a$  的区域, 就是

$$\psi(x)'' + k^2\psi(x) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2.121)$$

在  $0 \leq x \leq a$ ,

$$\psi(x)'' - \beta^2\psi(x) = 0, \quad \beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (2.122)$$

这样定义  $k, \beta$  保证了  $k^2 > 0, \beta^2 > 0$ .

Eq.(2.121)的通解为  $\exp(\pm ikx)$ . 考虑到初始条件: 粒子从左边入射, 也就是说, 无论如何粒子在右边  $x > a$  段不会有向左的动量几率, 我们取解为

$$\psi(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \quad x < 0, \quad (2.123)$$

$$\psi(x) = Se^{ikx}, \quad x > a. \quad (2.124)$$

从物理上看,  $\exp(ikx)$  为具有动量  $\hbar k$  的入射波, 记为  $\psi_i$ ,  $R\exp(-ikx)$  为动量为  $-\hbar k$  的反射波  $\psi_R$ ,  $S\exp(ikx)$  为动量为  $\hbar k$  的透射波  $\psi_S$ . 对**游离态**波函数无法归一化, 重要的是相对强度, 所以 我们把入射波的振幅取为1. 至于  $S$ , 如果它等于零, 就意味着粒子并不会出现在势垒之右.

势垒内部的波函数是Eq.(2.122)的解,

$$\psi(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}, \quad 0 \leq x \leq a. \quad (2.125)$$

我们注意到, 由于非束缚态, 即使选择坐标系使得势垒对称, 定态解也并无宇称要求. 想要知道粒子的反射与透射情况 就要求出  $R, S$ , 这可以利用波函数及其导数在  $x = 0, a$  两处连续求出.

首先, 在  $x = 0$  处,

$$\begin{aligned} 1 + R &= A + B, \\ ik(1 - R) &= (A - B)\beta. \end{aligned} \quad (2.126)$$

在  $x = a$  处,

$$\begin{aligned} Ae^{\beta a} + Be^{-\beta a} &= Se^{ika}, \\ \beta Ae^{\beta a} - \beta Be^{-\beta a} &= ikSe^{ika} \end{aligned} \quad (2.127)$$

由Eq.(2.126),

$$\begin{aligned} 2\beta A &= \beta + ik + R(\beta - ik) \\ 2\beta B &= \beta - ik + R(\beta + ik). \end{aligned} \quad (2.128)$$

由Eq.(2.127),

$$\begin{aligned} 2\beta A &= e^{ika-\beta a} S(\beta + ik) \\ 2\beta B &= e^{ika+\beta a} S(\beta - ik). \end{aligned} \quad (2.129)$$

以上两式可以写成

$$\begin{aligned} \gamma + R &= S\gamma e^{ika-\beta a}, \\ \gamma^* + R &= S\gamma^* e^{ika+\beta a}. \end{aligned} \quad (2.130)$$

其中

$$\gamma = \frac{\beta + ik}{\beta - ik}, \quad \gamma^* = \frac{\beta - ik}{\beta + ik} = \frac{1}{\gamma}, \quad |\gamma| = 1. \quad (2.131)$$

容易得到

$$S = \frac{\gamma - \gamma^*}{\gamma e^{-\beta a} - \gamma^* e^{\beta a}} e^{-ika}, \quad R = \frac{e^{\beta a} - e^{-\beta a}}{\gamma e^{-\beta a} - \gamma^* e^{\beta a}}. \quad (2.132)$$

我们得到

$$|S|^2 = \frac{|\gamma - \gamma^*|^2}{4 \sinh^2 \beta a - (\gamma - \gamma^*)^2}, \quad (2.133)$$

注意到

$$-(\gamma - \gamma^*)^2 = |\gamma - \gamma^*|^2, \quad (2.134)$$

再利用

$$\gamma - \gamma^* = \frac{4ik\beta}{\beta^2 + k^2}, \rightarrow |\gamma - \gamma^*|^2 = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \quad (2.135)$$

有

$$|S|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \beta a}{4E(V_0 - E)}}. \quad (2.136)$$

类似地,

$$|R|^2 = \frac{\sinh^2 \beta a}{\sinh^2 \beta a + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2}}. \quad (2.137)$$

在以上计算的基础上, 我们来讨论些物理问题.

首先我们看到  $S$  不等于零! 这意味着我们可以在势垒的右边找到粒子! 这一完全不同于经典力学的结论称为 **隧道效应(tunneling effect)**.

下面作更详细的分析. 在势垒左边,  $x < 0$  区域, 我们可以计算几率流密度  $j$ .

$$j = \frac{1}{2m} (\psi^* \hat{p} \psi - \psi \hat{p} \psi^*), \quad (2.138)$$

其中  $\psi(x) = \psi_i + \psi_R$ . 交叉项互相抵消, 我们发现  $j = j_i + j_R$ , 其中

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{1}{2m} (\psi_i^* \hat{p} \psi_i - \psi_i \hat{p} \psi_i^*) = \frac{\hbar k}{m} \\ j_R &= \frac{1}{2m} (\psi_R^* \hat{p} \psi_R - \psi_R \hat{p} \psi_R^*) = -|R|^2 \frac{\hbar k}{m} \end{aligned} \quad (2.139)$$

在势垒右边,  $x > a$  区域, 几率流密度  $j_S = |S|^2 \frac{\hbar k}{m}$ .

几率流密度的物理意义是单位时间通过单位截面的几率, 在一维时约化为单位时间通过截面的几率. 考虑到波函数没有作归一化, 所以算出的  $j$  实际上是正比于几率流密度, 量纲与速度相同. 设想有  $N$  个粒子以能量  $E$  入射, 单位时间通过一个截面的数目正比于  $j_i N$ , 而反射回去的数目正比于  $j_R N$ , 贯穿过去的正比于  $j_S N$ . 因此我们定义反射系数  $r = |j_R/j_i|$ , 在本问题里  $r = |R|^2$ , 透射系数  $t = |j_S/j_i|^2$ , 在本问题里等于  $|S|^2$ .

我们看到在实际问题里一般  $2\beta a \gg 1$ . 比如一个电子遇到一个势垒宽度为  $a = 1nm$ , 高度为  $V_0 - E = 1eV$ , 则  $2\beta a \approx 10$ . 在这种情况下,  $\sinh^2 \beta a \approx \exp(2\beta a)$ , 透射系数可以近似为

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\beta a}. \quad (2.140)$$

我们看到, 质量越大, 势垒相对于能量越高, 势垒越宽, 透射系数越小.

对于宏观物体, 比如  $m = 1kg = m_e/(9 \times 10^{-31}) \approx 10^{30} m_e$  ( $m_e$  是电子质量),  $V_0 - E = 1eV, a = 1nm$ , 则  $2\beta a \approx 10^{17}$ , 可以设想透射可能有多小, 可以说不可能发生隧道效应. 但在微观世界, 这一效应却不容忽视. 历史上, Gamov 利用隧穿效应成功解释了  $\alpha$  衰变: 在  $^{238}U$  衰变成  $^{234}Th$  的过程中,  $\alpha$  粒子从铀核中飞出. 虽然  $\alpha$  粒子本身的能量没有铀核的势垒高, 但是由于隧穿效应, 它仍然可以脱离铀核.

如果  $E > V_0$ .

$$\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} < 0. \quad (2.141)$$

那么 $\beta$ 改写为 $i\alpha$ ,  $\alpha = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$ 实数。注意

$$\sinh(\beta a) = i \sin(\alpha a) \quad (2.142)$$

那么

$$|S|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2 \alpha a}{4E(E-V_0)}}. \quad (2.143)$$

我们应该可以观察到所谓的共振透射。当 $\alpha a = n\pi$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $|S|^2 = 1$ .

如果粒子遇到一个势井,  $V_0 < 0$ , 会怎样? (2.143)仍然适用。唯一要注意的是: 当 $E \rightarrow 0$ ,  $T \rightarrow 0$ . 如图2.6.

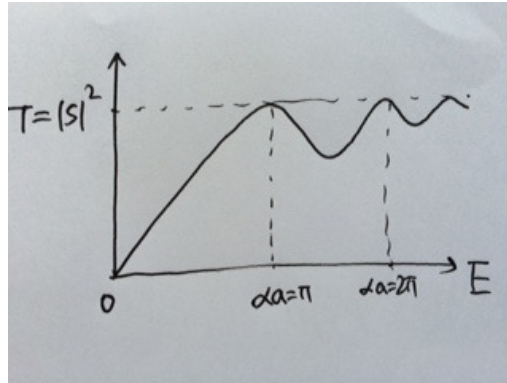


Figure 2.6: 一维方势阱的透射系数

我们再来考虑一个极限情况, 即 $\delta$ 势垒(或势阱)的隧穿问题。势井写为 $V(x) = -\gamma\delta(x)$ . (实际上 $\gamma > 0$ 为井,  $\gamma < 0$ 为垒).

粒子从左边来, 势垒左边波函数为 $\exp(ikx) + R \exp(-ikx)$ , 右边波函数为 $S \exp(ikx)$ .  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ . 在 $x = 0$ 处, 波函数连续给出

$$1 + R = S. \quad (2.144)$$

波函数的一阶导数跳跃, 根据 Eq.(2.82)

$$ikS - ik(1 - R) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2} S. \quad (2.145)$$

定义 $\beta = \frac{m\gamma}{\hbar^2 k}$ , 解出

$$S = \frac{1}{1 - i\beta} \quad (2.146)$$

和

$$R = \frac{i\beta}{1 - i\beta} \quad (2.147)$$

由此

$$|S|^2 = \frac{1}{1 + \beta^2}, \quad (2.148)$$

$$|R|^2 = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2}. \quad (2.149)$$

根据 $\beta^2 = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 E}$ , 我们容易看到 $m$ ,  $\gamma$ 和入射能量 $E$ 对透射系数的影响。

最后我们要注意, 以上讨论的都是不可归一化的散射态波函数, 不是可实现的状态. 但是我们可以把散射波函数叠加起来, 形成可以归一化的波函数, 即波包. 波包在空间移动, 遇到势垒后非常两个波包: 投射和反射波包. 大家可以参考我的主页上的动画.

波包本身的能量不确定，但是会围绕平均能量在一定幅度内涨落。我们可以用平均能量下的投射与反射系数来近似波包的反射和投射系数。

也可以这么看：如果波包非常长，其实它就非常接近平均能量对应的散射态了。这个近似就是非常好的。