

高功率半导体激光国家重点实验室

半导体激光器 原理

(修订版)

长春理工大学

杜宝勋 著

兵器工业出版社

高功率半导体激光国家重点实验室

半导体激光器原理

(修订版)

长春理工大学

杜宝勋 著

兵器工业出版社

内 容 简 介

本书全面深入地论述了半导体激光器的基本原理。主要包括：电子光跃迁和光子波发射的理论，光子波传播和光子波限制的理论，载流子注入和载流子限制的理论，以及半导体激光器的理论。该书第一版于2001年6月出版，为了更适合于研究生课程教学的需要，修订版对部分章节作了适当的增减。

本书可以作为光电子技术领域研究生学位课程的试用教材，也可以供有关专业的教师和科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

半导体激光器原理/杜宝勋著. —修订本. —北京:
兵器工业出版社, 2004. 8
ISBN 7-80172-278-7

I. 半... II. 杜... III. 半导体激光器—理论
IV. TN248. 4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 073181 号

出版发行：兵器工业出版社
责任编辑：郭 佳
邮编社址：100089 北京市海淀区车道沟 10 号
经 销：各地新华书店
印 刷：北京瑞达方舟印务有限公司
版 次：2004 年 8 月第 2 版第 1 次印刷
印 数：1—1000

封面设计：底晓娟
责任校对：郭 芳
责任印制：王京华
开 本：787 × 1092 1/16
印 张：13
字 数：323 千字
定 价：32.00 元

(版权所有 翻印必究 印装有误 负责调换)

吉林大学高鼎三院士为本书题词

祝贺《半导体激光器原理》出版

培养高技术人才

发展光电子产业

高鼎三 2001.05.26

序

20 世纪 60 年代初，半导体激光器问世，揭开了半导体光电子学发展的序幕。经过近 40 年的努力开拓，已经发展成为一门渗透面很广、交叉度很深的新兴学科。光电子学的应用，几乎遍及信息领域的各个方面，与微电子学一起成为当代信息技术的坚强支柱和国际高技术竞争的焦点，已经引起了世界各国对它的巨大关注。

半导体光电子学有其深厚的内涵，涉及诸多的功能器件和组件。然而，如同微电子学中的晶体管一样，半导体激光器是光电子学的核心。在半导体光电子学的应用中，首先必须掌握半导体激光器。熟悉了半导体激光器的基础知识，也能触类旁通地掌握其它光电子功能器件。因此，无论从人才培养还是从科研开发的角度看来，迫切需要一本比较严密地、系统地阐述半导体激光器基础知识的专门教科书。杜宝勋先生积累了近 40 年科研和教学的经验，在此基础上撰写的《半导体激光器原理》正是迎合了这一社会需求。

这本书的特点是：基础深厚，内容系统，概念清晰，分析透彻。这本书对物理问题的讨论，尽量采用数学分析表达式，以便读者深化对物理概念的理解，有利于收到举一反三和触类旁通的教学效果。这本书不仅系统地传授了半导体激光器的基础知识，而且使读者能够扎实地掌握分析和研究半导体激光器和其它半导体光电子器件的思路和手段，是一本很不多见的独具风格的著作。这本书尤其适合于作为研究生学位课程的基本教材，以及半导体光电子学研究 and 设计人员的主要参考读物，谨此向广大读者衷心地推荐。

中国科学院半导体研究所
王启明 院士



2001 年 5 月 26 日

前 言

半导体激光器是以半导体材料为光增益介质的一类激光器,其核心是一个本身具有光反馈结构的 p-n 结二极管芯片,因而通常称为激光二极管。由 p-n 结注入电流激发,在芯片内产生受激辐射并建立起光振荡。半导体激光器与其它激光器相比,具有体积小、效率高、寿命长、可以直接调制、可以单片集成等优点。然而,输出功率较低、单色性和方向性较差。半导体激光器的应用,主要包括光纤通信、光盘存取、光谱分析和光信息处理等重要领域。而且,特别适用于激光夜视、激光引信、激光测距、激光雷达等军事应用。光增益介质只能是直接带隙半导体,主要包括 III-V、IV-VI 和 II-VI 族化合物及其固溶体材料。通过选择半导体的带隙,就可以获得不同波长的激光。迄今,已经获得了从可见光到远红外波长的激光。

1961 年, N. G. Basov 指出了在半导体内能够产生受激辐射。1962 年, R. N. Hall 采用扩散技术在 GaAs 内形成 p-n 结,将垂直于结平面的两个平行的端面抛光形成法布里-珀罗谐振腔,获得了在低温下脉冲工作的 GaAs 同质结构激光器。此后,科学家们的的主要工作是研制在室温下连续工作的器件,这是半导体激光器实用化提出的最低要求。1963 年, N. Nelson 采用液相外延来生长 p-n 结, W. L. Bond 利用晶体的自然解理面来形成谐振腔。这两项技术,以后成为发展多种材料和多种结构的半导体激光器的基础技术。1967 年, J. C. Dyment 研制了电极条形激光器。此后,发展了各式各样的条形器件。

1963 年, H. Kroemer 提出了研制异质结构激光器的建议。1968 和 1969 年, Zh. Alferov 先后研制了以 GaAs 为光增益介质的 GaAs/AlGaAs 单异质结构和双异质结构激光器。异质结构器件以后成为半导体激光器的主流。1970 年, GaAs/AlGaAs 双异质结构激光器实现了在室温下连续工作。此后,各式各样的 GaAs/AlGaAs 双异质结构条形激光器,均可以在 100℃ 以上的温度下连续工作,这标志着半导体激光器开始成熟了。

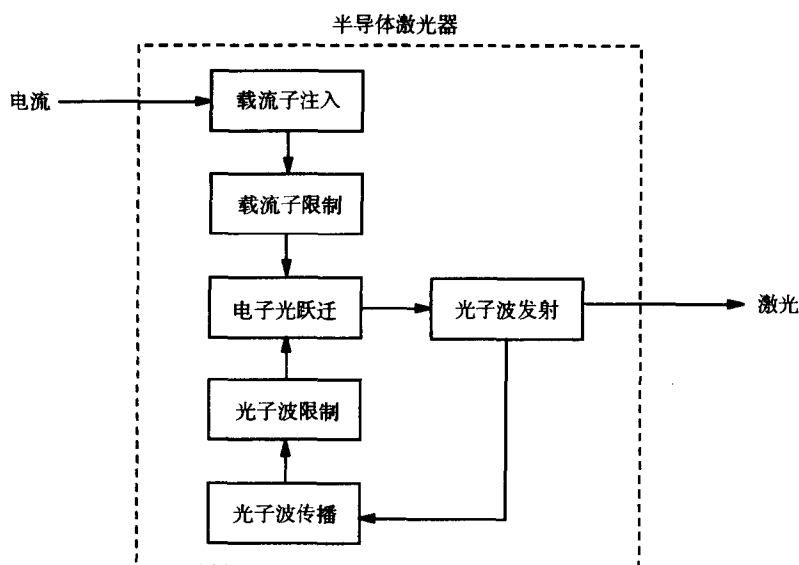
GaAs 的波长 $\sim 0.85\mu\text{m}$,恰巧与石英光纤的一个低损耗窗口 ($\sim 2\text{dB/km}$) 匹配,因而半导体激光器的主要应用是作为光纤通信系统的光源。显然,光纤通信系统提出的要求,就决定了半导体激光器的主要发展方向。这些要求是:①提高工作寿命;②控制激光模式;③扩展发射波长。20 世纪 70 年代,异质结构激光器迅猛发展,取得的主要成果是:①通过改进器件工艺,使器件的实测寿命超过了 10^5h ,由高温加速老化实验结果外推的寿命可达 $10^6 \sim 10^7\text{h}$;②研制了多种具有内建条形波导的异质结构激光器(特别是掩埋异质结构器件),以及量子阱激光器和分布反馈激光器,这些激光器都是单模器件;③为了使器件的波长与石英光纤的更低损耗窗口 $1.3\mu\text{m}$ ($\sim 0.5\text{dB/km}$) 和 $1.55\mu\text{m}$ ($\sim 0.2\text{dB/km}$) 匹配,研制了以 InGaAsP 为光增益介质的 InGaAsP/InP 异质结构激光器,其各项性能指标均与 GaAs/AlGaAs 器件相似。此外,为了满足其它方面应用的需要,还研制了可见光半导体激光器、远红外半导体激光器、高功率半导体激光器等。80 年代,上述多种异质结构激光器均已商品化了。特别应该指出的是,70 年代末和 80 年代初,超薄层材料生长技术(分子束外延、金属有机化学气相沉积)和超微细结构加工技术(电子束曝光、反应离子束刻蚀),不仅加速了异质结构激光器的商品化进程,而且还为研制新一代半导体激光器创造了条件。新一代半导体激光器包括垂直腔表面发射激光器和微腔半

导体激光器。1977 年, K. Iga 提出了垂直腔表面发射激光器的设想; 1988 年, 获得了在室温下连续工作的垂直腔表面发射激光器; 90 年代, 这种器件进入了市场。1985 年, T. Kobayash 提出了无阈值微腔激光器的概念; 1990 年, Y. Yamamoto 研制了微腔半导体激光器; 目前, 科学家们正在为获得接近于无阈值的器件而奋斗。

1998 年, 著者应高功率半导体激光国家重点实验室之邀讲授《半导体激光器原理》课程。听课的是该实验室的研究生和科技人员, 还有吉林大学的研究生。

《半导体激光器原理》是该实验室的研究生学位课程。课程计划要求, 只讲授器件理论, 而不涉及器件工艺和器件应用。关于器件工艺和器件应用, 已经另行授课。

半导体激光器是一种光振荡器。它是电流驱动的器件, 当工作电流超过阈值电流时发射激光。下图表示半导体激光器内部的物理过程。



著者讲授的内容就是根据这些物理过程安排的, 分为八章, 共 40 节。每节讲授 4 学时, 共 160 学时。

- 第一、二、五章, 电子光跃迁和光子波发射的理论。
- 第三、四章, 光子波传播和光子波限制的理论。
- 第六章, 载流子注入和载流子限制的理论。
- 第七、八章, 普通半导体激光器和特种半导体激光器的理论。

本书是根据当时撰写的讲义出版的。该讲义作为研究生学位课程的教材, 已经在长春光学精密机械学院试用。

在本书出版之际, 著者衷心感谢长春光学精密机械学院院长姜会林教授和高功率半导体激光国家重点实验室主任张兴德教授的支持和帮助, 诚恳希望读者提出批评和建议。

著者
2001 年 2 月, 北京

修订版前言

2001 年 6 月面世的《半导体激光器原理》第一版，深受同行和读者欢迎。在光电子技术领域里，一些研究所和高等学校将该书作为研究生课程的教材；具有一定理论基础和专业知识的年轻教师和科技人员将该书作为工作和进修的参考书。

为了更适合于研究生课程教学的需要，能够将主要内容在 80 学时内讲完，著者将该书进行了修订，同时对部分章节作了适当的增减。修订版共包括六章 26 节。

为了帮助读者在学习本书之前对半导体激光器有所了解，本书选择《高技术词典》（科学出版社、清华大学出版社，2000 年版）中的一些词条作为附录，在此谨向科学出版社、清华大学出版社和这些词条的撰稿人致意！

此外，感谢高功率半导体激光国家重点实验室的依托单位长春理工大学对本书出版的大力支持。

著者

2004 年 5 月

目 录

第一章 电子光跃迁

§ 1 光子和电子	1
1. 微观粒子	1
2. 光子	2
3. 电子	4
§ 2 电子光跃迁	6
1. 与时间有关的微扰	6
2. 跃迁几率	8
3. 动量矩阵元	9
4. 电偶极矩矩阵元	10
5. 相互作用系数	10
6. 跃迁速率分布	11
§ 3 介质电极化	11
1. 复电极化率	12
2. K—K 色散关系	14
3. 振子强度	16
4. “自由”电子的贡献	16
§ 4 光子吸收和发射	17
1. 共振吸收、受激发射和自发发射	17
2. 一个始态只对应一个终态	18
3. 一个始态对应所有的终态	20
4. 爱因斯坦关系	20
5. 折射率色散的效应	22
参考文献	23

第二章 半导体发光

§ 5 半导体知识	24
1. 能带	24
2. 载流子	27
§ 6 异质结构	32
1. p-N 异质结	32
2. p-P 异质结	36

3. i-P 异质结	38
4. 异质结构	39
§ 7 矩阵元计算	40
1. 本征半导体——有 k 选择条件	40
2. $k \cdot \hat{p}$ 微扰近似	41
3. 重掺杂半导体——无 k 选择条件	43
4. 常数矩阵元近似	43
§ 8 发光特性计算	45
1. 本征半导体发光	45
2. 重掺杂半导体发光	51
参考文献	53

第三章 光子波传播

§ 9 电磁辐射	54
1. 麦克斯韦方程	54
2. 玻印廷矢量	56
3. 相速度和群速度	57
§ 10 界面反射和折射	58
1. 斯涅耳定律	58
2. TE 波的非涅耳公式	59
3. TM 波的非涅耳公式	61
4. 界面全内反射	64
§ 11 薄膜内多次反射	66
1. 上下界面的反射率和透射率	66
2. 介质薄膜的反射率和透射率	68
3. 合成波分析	69
4. 有损耗介质薄膜	71
§ 12 高斯光束	72
1. 波函数	72
2. 光束性质	74
3. 厄米—高斯光束	76
参考文献	78

第四章 介质光波导

§ 13 介质光波导特性	79
1. 光子波横向限制	79
2. 光子波端面反射	81
3. 光子波端面出射	83

§ 14 阶跃折射率平板波导	86
1. 三层波导分析	87
2. 五层波导分析	90
3. 模式厚度	92
§ 15 渐变折射率平板波导	93
1. 等效波导厚度	93
2. 线性波导分析	94
3. 平方波导分析	96
4. 高斯近似	98
5. 光增益平板波导	99
§ 16 折射率长条波导	101
1. 矩形波导分析	101
2. 圆形波导分析	105
参考文献	108

第五章 速率方程分析

§ 17 稳态分析	109
1. 速率方程	109
2. 单纵模分析	111
3. 多纵模分析	114
§ 18 瞬态分析	116
1. 延迟时间和启动时间	116
2. 弛豫振荡	118
3. 小信号调制	120
§ 19 不均匀效应	123
1. 光增益空间烧孔	123
2. 自脉动和双稳态	125
§ 20 激光谱线宽度	129
1. 自然展宽	130
2. 相位涨落和强度涨落	130
3. 噪声展宽	133
4. 瞬态现象	135
参考文献	136

第六章 半导体激光器

§ 21 半导体激光器特性	137
1. 光振荡条件	137
2. 主要特性参数	139

§ 22	双异质结构激光器	144
1.	阈值电流密度	144
2.	载流子侧向扩散和电流侧向扩展	147
3.	近场图形和远场图形	151
§ 23	分布反馈激光器	154
1.	耦合波分析	154
2.	光振荡条件	157
3.	耦合系数	158
4.	光增益耦合	160
§ 24	量子阱激光器	161
1.	能带分裂为一系列子带	161
2.	能带状态密度分布	163
3.	载流子密度	164
4.	电偶极矩矩阵元	165
5.	量子阱半导体发光	167
6.	阈值电流密度	169
7.	SCH 量子阱激光器	170
8.	载流子在能带内弛豫的效应	173
§ 25	垂直腔表面发射激光器	174
1.	工作特性	174
2.	布拉格反射镜	177
§ 26	微腔激光器	179
1.	有效光子状态密度分布	180
2.	载流子寿命减小和光放大本领增大	184
3.	速率方程分析	184
参考文献		187
附录		188

第一章 电子光跃迁

§1 光子和电子

激光器是以光子系统和电子系统相互作用为基础的。当然,半导体激光器也不例外。因此,我们首先复习一下光子和电子的性质。

1. 微观粒子

光子和电子均为微观粒子,具有波动性和粒子性,称为波粒二象性。在强调粒子性时,分别称为光子和电子;在强调波动性时,分别称为光子波和电子波。

令 p 和 E 分别表示粒子的动量和能量, k 和 ω 分别表示粒子波的波矢和频率,将粒子性和波动性联系起来的的关系是:

$$p = \hbar k \quad (1-1)$$

$$E = \hbar \omega \quad (1-2)$$

其中 $\hbar = h/2\pi$, h 是普朗克常量。

粒子的速度是:

$$v = \frac{p}{m} = \frac{dE}{dp} \quad (1-3)$$

其中 m 是粒子的质量。

粒子波由波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 来描述,它是空间 $\mathbf{r}$ 和时间 t 的复函数。

自由粒子的波函数是平面波:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (1-4)$$

其中振幅 A 为常数。

(1-4)式为元波。任何波函数,均可以写成许多元波线性叠加。

波数和频率分别为:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1-5)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{T} \quad (1-6)$$

其中 λ 和 T 分别是波长和周期。

因此,粒子波的速度是:

$$u = \frac{\lambda}{T} = \frac{\omega}{k} \quad (1-7)$$

在有限体积 V 内,波矢和频率均取一系列分立值,即本征值 k_n 和 ω_n ,这是由边界条件决定的。因此,我们有一系列本征波函数 $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ 。

这些本征波函数满足正交条件:

$$\int_V \Psi_m^*(\mathbf{r}, t) \Psi_n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 0 \quad (1-8)$$

其中 Ψ^* 是 Ψ 的共轭复数。

现在考虑各边长均为 L 的立方体介质,令其中心为坐标原点。波函数满足周期性边界条件,求出 $\mathbf{k}$ 的三个分量的本征值为:

$$k_i = n_i \left(\frac{2\pi}{L} \right) \quad (1-9)$$

其中 $i = x, y, z, n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

就粒子性而言,不同的 $\mathbf{k}$ 值表示粒子处于不同的状态;就波动性而言,不同的 $\mathbf{k}$ 值表示粒子波具有不同的模式。显然,状态和模式是一一对应的,只是对一件事情的两种说法而已。

在 $\mathbf{k}$ 空间内, $\mathbf{k}$ 的每个本征值表示一个状态,因而每个状态占有的 $\mathbf{k}$ 空间体积是:

$$\delta_v = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{8\pi^3}{V} \quad (1-10)$$

半径为 k 的球体积是:

$$\Delta_v = \frac{4}{3} \pi k^3 \quad (1-11)$$

由(1-10)和(1-11)式求出该体积内的状态数为:

$$N = 2 \left(\frac{\Delta_v}{\delta_v} \right) = \frac{V k^3}{3\pi^2} \quad (1-12)$$

其中因子数 2 表示粒子具有两个自旋状态。

因此,单位体积单位波数的状态数为:

$$\rho(k) = \frac{1}{V} \left(\frac{dN}{dk} \right) = \left(\frac{k}{\pi} \right)^2 \quad (1-13)$$

在后面的分析中,通常采用单位体积单位能量的状态数:

$$\rho(E) = \frac{1}{V} \left(\frac{dN}{dE} \right) = \rho(k) \left(\frac{dk}{dE} \right) \quad (1-14)$$

$\rho(k)$ 和 $\rho(E)$ 均称为粒子状态密度分布。

2. 光子

对于光子, ν 保持不变。由(1-1)、(1-2)和(1-3)式求出:

$$E = \nu p = \nu \hbar k \quad (1-15)$$

$$\nu = \frac{\omega}{k} = u \quad (1-16)$$

(1-15)和(1-16)式表明,光子的 E 和 k 是直线关系,光子的速度等于光子波的速度。

$$\text{令} \quad u = \frac{c}{n} \quad (1-17)$$

则有:

$$k = n k_0 \quad (1-18)$$

$$k_0 = \frac{\omega}{c} \quad (1-19)$$

其中 n 是介质的折射率, c 和 k_0 分别是光子在真空中的速度和波数。

由(1-4)式得到:

$$\frac{1}{k^2} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-20)$$

其中

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1-21)$$

由(1-18)、(1-19)和(1-20)式求出光子的波动方程:

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{n}{c} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-22)$$

这是经典波动方程。

对于光子波,采用经典波描述,它只能是 $\mathbf{r}$ 和 t 的实函数。因此,我们约定,光子波场 $U(\mathbf{r}, t)$ 由 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 的实部来表示。在习惯上,我们将光子波函数写作:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (1-23)$$

因此

$$U(\mathbf{r}, t) = A \cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (1-24)$$

光子波沿传播方向通过单位面积的平均功率为:

$$I = \langle U^2(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{2} A^2 \quad (1-25)$$

这是光子波的强度,其中符号 $\langle \dots \rangle$ 表示对时间取平均值。

由(1-23)和(1-25)式求出:

$$I = \frac{1}{2} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-26)$$

$$A = \sqrt{2I} \quad (1-27)$$

因此,光子的本征波函数满足归一化条件:

$$\int_V \Psi_n^*(\mathbf{r}, t) \Psi_n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 2IV \quad (1-28)$$

由(1-8)和(1-28)式组合成为正交归一化条件:

$$\int_V \Psi_m^*(\mathbf{r}, t) \Psi_n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \delta_{mn} (2IV) \quad (1-29)$$

令平面波沿 z 方向传播,则(1-23)、(1-24)和(1-25)式分别改写为:

$$\Psi(z, t) = A e^{i(\omega t - kz)} \quad (1-30)$$

$$U(z, t) = A \cos(\omega t - kz) \quad (1-31)$$

$$I = \langle U^2(z, t) \rangle = \frac{1}{2} A^2 \quad (1-32)$$

在有损耗介质内,采用复折射率:

$$\tilde{n} = n - in' \quad (1-33)$$

其虚部 n' 表示损耗。

因此,(1-18)和(1-22)式分别改写为:

$$\tilde{k} = k - ik' = (n - in') k_0 \quad (1-34)$$

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\tilde{n}}{c} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-35)$$

(1-30)、(1-31)和(1-32)式分别改写为:

$$\Psi(z, t) = Ae^{-k'z} e^{i(\omega t - kz)} \quad (1-36)$$

$$U(z, t) = Ae^{-k'z} \cos(\omega t - kz) \quad (1-37)$$

$$I(z) = \frac{1}{2} A^2 e^{-\alpha z} \quad (1-38)$$

在(1-38)式中

$$\alpha = 2k' = 2n'k_0 \quad (1-39)$$

α 是介质的损耗系数。

由(1-12)、(1-15)和(1-17)式求出光子状态数:

$$N_s = \frac{V n^3 E^3}{3 \pi^2 c^3 \hbar^3} \quad (1-40)$$

代入(1-14)式中求出光子状态密度分布:

$$\rho_s(E) = a_s E^2 \quad (1-41)$$

其中

$$a_s = \frac{n^3}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \quad (1-42)$$

光子是玻色子,服从玻色—爱因斯坦统计规律。能量为 E 的一个状态容纳的平均光子数为:

$$f_s(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} \quad (1-43)$$

其中 μ 是光子系统的化学势, T 是热力学温度, K 是玻耳兹曼常数。

$\mu=0$ 对应绝对黑体的情况。 $\mu \geq E$ 对应玻色—爱因斯坦凝聚,即一个状态可以容纳许多光子,这是产生激光的情况。

由(1-41)和(1-42)式求出光子密度分布,即单位体积单位能量的光子数:

$$S(E) = \rho_s(E) f_s(E) = a_s \frac{E^2}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} \quad (1-44)$$

3. 电子

对于电子, m 保持不变。令势场为 0, 由(1-1)、(1-2)和(1-3)式求出:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1-45)$$

$$v = \frac{d\omega}{dk} \neq u \quad (1-46)$$

(1-45)和(1-46)式表明,电子的 E 和 k 是抛物线关系,电子的速度不等于电子波的速度。

在习惯上,我们将电子波函数写作:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (1-47)$$

利用(1-2)和(1-45)式,由(1-20)和(1-47)式求出:

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-48)$$

将(1-48)式改写为:

$$\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla)^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-49)$$

由该式得到能量算符和动量算符:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1-50)$$

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla \quad (1-51)$$

在(1-51)式中

$$\nabla = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z} \quad (1-52)$$

这里 i, j 和 k 分别是 x, y 和 z 方向的单位矢量。

当有势场 V 存在时,根据(1-45)式写出:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \quad (1-53)$$

在(1-53)式的两边乘以 $\Psi(r, t)$, 并将(1-50)和(1-51)式代入其中, 得到电子的波动方程, 即薛定谔方程:

$$\hat{H}\Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) \quad (1-54)$$

其中

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V \quad (1-55)$$

$\hat{H}$ 也是能量算符, 称为哈密顿算符。

对于电子波, 引入统计波概念, 在 r 处找到电子的几率为:

$$W = |\Psi(r, t)|^2 = \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) \quad (1-56)$$

因此, 电子的本征波函数满足归一化条件:

$$\int_V \Psi_n^*(r, t) \Psi_n(r, t) dr = 1 \quad (1-57)$$

由(1-8)和(1-57)式组合成为正交归一化条件:

$$\int_V \Psi_m^*(r, t) \Psi_n(r, t) dr = \delta_{mn} \quad (1-58)$$

由(1-47)和(1-57)式求出:

$$A^2 V = 1 \quad (1-59)$$

如果势能为常数 V_0 , 则由(1-53)式求出:

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (1-60)$$

当 $E > V_0$ 时, 电子波函数由(1-47)式来表示。

当 $E < V_0$ 时, 将(1-60)式改写为:

$$k \Rightarrow ik' = i \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (1-61)$$

由(1-47)和(1-61)式得到:

$$\Psi(r, t) = A e^{-k' \cdot r} e^{-i\omega t} \quad (1-62)$$

注意: 这里的 k' 不是表示损耗, 而是表示无功衰减。

由(1-12)和(1-45)式求出电子状态数: