

一维 M 形势垒透射系数的计算与分析*

吴仍来

(岭南师范学院物理科学与技术学院 广东 湛江 524048)

(收稿日期:2019-04-07)

摘要:构建了一维 M 形势垒的模型,探讨了微观尺度下 M 形势垒结构中电子的势垒贯穿问题.通过求解薛定谔方程给出了透射系数的表达式,数值分析了透射系数随入射电子的能量、势垒高度和宽度的变化情况,并系统地比较了 M 形和方形势垒的透射系数.

关键词:M 形势垒 薛定谔方程 透射系数

1 引言

在经典力学的范畴,宏观物体不能跨越比其动能大的势垒,该类经典力学案例最常见的有两种,其一,小球克服重力势能跨越斜木板问题:斜木板顶端和底端的重力势能差大于小球初始动能时,从底端出发的小球不可能跨过斜木板;其二,带电粒子克服电势能跨越电容器的两个极板问题:电容器两极板的电势能差值大于带电粒子的初始动能时,从极板低电势能一端出发的带电粒子不能到达另一极板.从上面两个案例可知经典力学表现出很强的因果定律,在力的作用下,物体具有决定性的运动状态.但是同样的两个案例,如果将物体的尺寸都减小到微观领域纳米量级,经典力学的决定性结果将不再成立.这时物体变成微观粒子,波粒二象性的特征非常显著,其运动状态服从量子力学中波函数描述的结果,并可能导致与经典力学完全相违背的结果出现^[1],即:微观物体能够贯穿比其动能大的势垒,这种势垒贯穿现象在量子力学领域被称为隧道效应.隧道效应在显微技术领域具有相当重要的应用价值,催生了扫描隧道电子显微镜的诞生^[1].针对势垒贯穿问题,很多教材和文献都进行了讨论,最典型的

有量子力学教材中方形势垒的贯穿问题^[1,2],此外,文献[3]分析了一维多个位势结构的透射系数,并对其中的谐振隧穿现象进行了讨论;文献[4]计算了一维梯形势垒的透射系数,并讨论了透射系数随势垒斜率的变化;文献[5]计算了一维三角形多势垒结构的共振透射系数.上述研究从不同结构出发,对一维体系的势垒贯穿现象进行了分析和讨论.基于上述研究结果,本文设计了一维 M 型势垒结构,该结构对应着部分量子点内部的势能分布情况,当微观粒子(如电子)透过 M 形势垒时,其透射系数的分析对其电导和输运特性非常重要,因此本文利用薛定谔方程对电子通过 M 形势垒时的透射系数进行了求解和数值分析.

2 理论模型和求解

一维 M 形势垒的模型如图 1 所示.考虑电子从势垒的左边入射, M 形势垒的宽度为 a , 高度为 U_0 . 将整个势垒分为 4 个区域: I 区 ($x < 0$), II 区 ($0 \leq x < \frac{a}{2}$), III 区 ($\frac{a}{2} \leq x \leq a$), IV 区 ($x > a$). 根据模型图, M 形势垒的空间分布函数可表示为

* 国家自然科学基金,项目编号:11647156;岭南师范学院校级项目,项目编号:ZL1618

作者简介:吴仍来(1986-),男,博士,讲师,主要从事理论物理教学及相关项目研究.

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{I 区} \\ U_0 - fx & \text{II 区} \\ fx - U_0 & \text{III 区} \\ 0 & \text{IV 区} \end{cases} \quad (1)$$

上式中 $f = \frac{2U_0}{a}$.

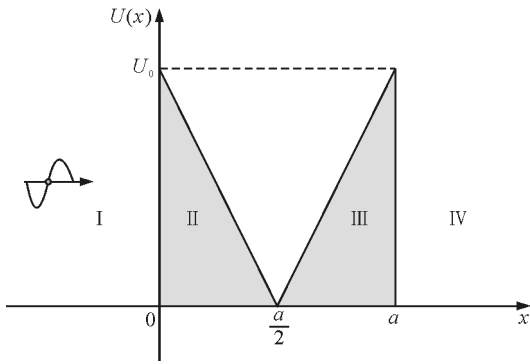


图1 M形势垒的模型图

从经典力学的角度,当电子的能量 E 小于势垒的高度 U_0 ,则电子不能到达势垒的 II, III, IV 区.但是经典力学只能求解宏观粒子低速运动问题,对于微观粒子,应该用量子力学方法求解.式(1)中势能分布与时间无关,反映微观粒子全部运动状态的波函数满足一维定态薛定谔方程^[1,2]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + U(x) \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (2)$$

式中 m 为电子的有效质量, \hbar 为普朗克常量, E 为电子的本征能量, $\Psi(x)$ 为属于本征能量 E 的本征波函数.这里为了简便,忽略势垒对电子有效质量的影响,默认电子的有效质量为其静止质量, $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$.

接下来在每个势垒区列出定态薛定谔方程,并分别进行求解.

在 I 区和 IV 区,电子的波函数均满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = E \Psi(x) \quad (3)$$

令

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

式(3)可简化为

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + k^2 \Psi(x) = 0 \quad (4)$$

则 I 区电子波函数的通解可表示为

$$\Psi_{\text{I}}(x) = A_{\text{I}} e^{ikx} + B_{\text{I}} e^{-ikx} \quad (5)$$

式(5)中 $\Psi_{\text{I}}(x)$ 的下标 I 表示波函数的取值范围在 I 区,下文波函数的表示方法均类似, A_{I} 和 B_{I} 为波函数的待定系数, $A_{\text{I}} e^{ikx}$ 表示 I 区向 x 正方向运动的电子的波函数,即电子的入射波函数; $B_{\text{I}} e^{-ikx}$ 表示 I 区向 x 负方向运动的电子的波函数,即电子的反射波函数.同理,IV 区电子的波函数可表示为

$$\Psi_{\text{IV}}(x) = A_{\text{IV}} e^{ikx} + B_{\text{IV}} e^{-ikx} \quad (6)$$

上式中 A_{IV} 和 B_{IV} 为 IV 区电子波函数的待定系数, $A_{\text{IV}} e^{ikx}$ 表示 IV 区向 x 正方向运动的电子的波函数,即透射后电子的波函数; $B_{\text{IV}} e^{-ikx}$ 表示 IV 区向 x 负方向运动的电子的波函数.由于电子是从左边入射,到达右边 IV 区后不会再有反射,所以 IV 区的电子只能向右运动,因此 $B_{\text{IV}} = 0$.

在 II 区,电子的波函数满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_{\text{II}}(x)}{dx^2} + (U_0 - fx) \Psi_{\text{II}}(x) = E \Psi_{\text{II}}(x) \quad (7)$$

令

$$\kappa = \left(\frac{2mf}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\xi = \frac{\kappa}{f} (U_0 - E - fx)$$

式(7)可简化为

$$\frac{d^2 \Psi_{\text{II}}(\xi)}{d\xi^2} - \xi \Psi_{\text{II}}(\xi) = 0 \quad (8)$$

上式为 Airy 方程^[5,6],其解为第一类艾里函数 $\text{Ai}(\xi)$ 和第二类艾里函数 $\text{Bi}(\xi)$ 的线性组合

$$\Psi_{\text{II}}(\xi) = A_{\text{II}} \text{Ai}(\xi) + B_{\text{II}} \text{Bi}(\xi) \quad (9)$$

式中 A_{II} 和 B_{II} 为 II 区电子波函数的待定系数.

在 III 区,电子的波函数满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \Psi_{\text{III}}(x)}{dx^2} + (fx - U_0) \Psi_{\text{III}}(x) = E \Psi_{\text{III}}(x) \quad (10)$$

令

$$\zeta = \frac{\kappa (fx - U_0 - E)}{f}$$

式(10)亦可简化为 Airy 方程

$$\frac{d^2 \Psi_{\text{III}}(\zeta)}{d\zeta^2} - \zeta \Psi_{\text{III}}(\zeta) = 0 \quad (11)$$

则 III 区电子的波函数可表示为 $\text{Ai}(\zeta)$ 和 $\text{Bi}(\zeta)$ 的线性组合

$$\Psi_{\text{III}}(\zeta) = A_{\text{III}} \text{Ai}(\zeta) + B_{\text{III}} \text{Bi}(\zeta) \quad (12)$$

式中 A_{III} 和 B_{III} 为 III 区电子波函数的待定系数.

上面已经求完 4 个势垒区波函数的通解, 随后根据波函数的连续性条件得出待定系数间的关系, 并求出透射率. 波函数有 3 个边界, 分别在 $x=0$, $x = \frac{a}{2}$, $x=a$ 处. 在 $x=0$ 处, 根据波函数及其一阶导数

连续, 有

$$A_{\text{I}} + B_{\text{I}} = A_{\text{II}} \text{Ai}(\xi_{\text{I}}) + B_{\text{II}} \text{Bi}(\xi_{\text{I}}) \quad (13)$$

$$ikA_{\text{I}} - ikB_{\text{I}} =$$

$$-\kappa A_{\text{II}} \text{Ai}'(\xi_{\text{I}}) - \kappa B_{\text{II}} \text{Bi}'(\xi_{\text{I}}) \quad (14)$$

上面两式中

$$\xi_{\text{I}} = \frac{\kappa(U_0 - E)}{f}$$

对应 $x=0$ 时变量 ξ 的取值. $\text{Ai}'(\xi_{\text{I}})$ 和 $\text{Bi}'(\xi_{\text{I}})$ 分别表示第一类和第二类艾里函数的一阶导数在 ξ_{I} 处的取值. 在 $x = \frac{a}{2}$ 处, 根据波函数及其一阶导数连续, 有

$$A_{\text{II}} \text{Ai}(\xi_{\text{II}}) + B_{\text{II}} \text{Bi}(\xi_{\text{II}}) =$$

$$A_{\text{III}} \text{Ai}(\zeta_{\text{II}}) + B_{\text{III}} \text{Bi}(\zeta_{\text{II}}) \quad (15)$$

$$-\kappa A_{\text{II}} \text{Ai}'(\xi_{\text{II}}) - \kappa B_{\text{II}} \text{Bi}'(\xi_{\text{II}}) =$$

$$\kappa A_{\text{III}} \text{Ai}'(\zeta_{\text{II}}) + \kappa B_{\text{III}} \text{Bi}'(\zeta_{\text{II}}) \quad (16)$$

在式(15)和(16)中

$$\xi_{\text{II}} = \zeta_{\text{II}} = -\frac{\kappa E}{f}$$

对应 $x = \frac{a}{2}$ 时变量 ξ 和 ζ 的取值. 在 $x=a$ 处, 根据波函数及其一阶导数连续, 有

$$A_{\text{IV}} e^{iku} = A_{\text{III}} \text{Ai}(\zeta_{\text{I}}) + B_{\text{III}} \text{Bi}(\zeta_{\text{I}}) \quad (17)$$

$$ikA_{\text{IV}} e^{iku} =$$

$$\kappa A_{\text{III}} \text{Ai}'(\zeta_{\text{I}}) + \kappa B_{\text{III}} \text{Bi}'(\zeta_{\text{I}}) \quad (18)$$

式(17)和(18)中

$$\zeta_{\text{I}} = \frac{\kappa(U_0 - E)}{f}$$

对应 $x=a$ 时 ζ 的取值, 根据对比有

$$\xi_{\text{I}} = \zeta_{\text{I}}$$

令

$$u = \text{Ai}(\xi_{\text{I}}) \quad \sigma = \text{Bi}(\xi_{\text{I}})$$

$$u' = \text{Ai}'(\xi_{\text{I}}) \quad \sigma' = \text{Bi}'(\xi_{\text{I}})$$

$$c = \text{Ai}(\xi_{\text{II}}) \quad d = \text{Bi}(\xi_{\text{II}})$$

$$c' = \text{Ai}'(\xi_{\text{II}}) \quad d' = \text{Bi}'(\xi_{\text{II}})$$

式(13)~(18)可分别简化为

$$A_{\text{I}} + B_{\text{I}} = uA_{\text{II}} + \sigma B_{\text{II}} \quad (19)$$

$$ikA_{\text{I}} - ikB_{\text{I}} = -\kappa u' A_{\text{II}} - \kappa \sigma' B_{\text{II}} \quad (20)$$

$$cA_{\text{II}} + dB_{\text{II}} = cA_{\text{III}} + dB_{\text{III}} \quad (21)$$

$$-c' A_{\text{II}} - d' B_{\text{II}} = -c' A_{\text{III}} - d' B_{\text{III}} \quad (22)$$

$$A_{\text{IV}} e^{iku} = uA_{\text{III}} + \sigma B_{\text{III}} \quad (23)$$

$$ikA_{\text{IV}} e^{iku} = \kappa u' A_{\text{III}} + \kappa \sigma' B_{\text{III}} \quad (24)$$

利用 ik 乘以式(23)再减去式(24)得

$$A_{\text{III}} = -\frac{\beta}{\alpha} B_{\text{III}} \quad (25)$$

上式中

$$\alpha = \kappa u' - iku$$

$$\beta = \kappa \sigma' - ik\sigma$$

将式(25)代入式(23)得

$$B_{\text{III}} = \frac{iku - \kappa u'}{\kappa(u\sigma' - u'\sigma)} e^{iku} A_{\text{IV}} =$$

$$-\frac{\pi\alpha}{\kappa} e^{iku} A_{\text{IV}} \quad (26)$$

上式中利用了艾里函数的性质: 对于任意的变量 ξ , 艾里函数满足朗斯基行列式

$$W[\text{Ai}(\xi), \text{Bi}(\xi)] = \begin{vmatrix} \text{Ai}(\xi) & \text{Bi}(\xi) \\ \text{Ai}'(\xi) & \text{Bi}'(\xi) \end{vmatrix} = \frac{1}{\pi}$$

即有

$$u\sigma' - u'\sigma = \frac{1}{\pi}$$

$$cd' - c'd = \frac{1}{\pi}$$

将式(26)代入式(25)得

$$A_{\text{III}} = \frac{\pi\beta}{\kappa} e^{iku} A_{\text{IV}} \quad (27)$$

利用 $\frac{c'}{c}$ 乘以式(21)再加上式(22), 并利用

$cd' - c'd = \pi^{-1}$ 简化得

$$B_{\parallel} = -2\pi cc'A_{\parallel} - \pi(c'd + cd')B_{\parallel} \quad (28)$$

利用 $\frac{d'}{d}$ 乘以式(21) 再加上式(22) 得

$$A_{\parallel} = \pi(cd' + c'd)A_{\parallel} + 2\pi d'dB_{\parallel} \quad (29)$$

利用 ik 乘以式(19) 再加上式(20) 得

$$2ikA_{\perp} = -\alpha A_{\parallel} - \beta B_{\parallel} \quad (30)$$

将式(28)和(29)代入式(30)得

$$\begin{aligned} 2ikA_{\perp} = & \\ & -\alpha[\pi(cd' + c'd)A_{\parallel} + 2\pi d'dB_{\parallel}] + \\ & \beta[2\pi cc'A_{\parallel} + \pi(cd' + c'd)B_{\parallel}] \end{aligned} \quad (31)$$

将式(26)和(27)代入式(31), 并整理公式可得

$$\frac{A_{IV}}{A_I} = \frac{1}{\pi^2} \frac{ick e^{-iak}}{cc'\beta^2 + d'd\alpha^2 - (cd' + c'd)\alpha\beta} \quad (32)$$

由式(32)可得 M 形势垒电子的透射系数

$$\begin{aligned} T = & \left| \frac{A_{IV}}{A_I} \right|^2 = \\ & \frac{1}{\pi^4} \frac{\kappa^2 k^2}{|cc'\beta^2 + d'd\alpha^2 - (cd' + c'd)\alpha\beta|^2} \end{aligned} \quad (33)$$

对于宽度为 a , 高度为 U_0 的方形势垒, 透射系数的表达式为^[1]

$$T = \begin{cases} \frac{4\theta^2 k^2}{(k^2 - \theta^2)^2 \sin^2(\theta a) + 4\theta^2 k^2} & E > U_0 \\ \frac{4}{4 + 4k^2 a^2} & E = U_0 \\ \frac{4\vartheta^2 k^2}{(k^2 + \vartheta^2)^2 \sinh^2(\vartheta a) + 4\vartheta^2 k^2} & E < U_0 \end{cases} \quad (34)$$

上式中

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \\ \vartheta &= \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \end{aligned}$$

3 数值计算与分析

基于式(33)和(34), 下面通过数值求解画出透射系数随入射电子的能量、势垒的高度和宽度的变化图像。

图2给出透射系数随电子能量的变化, 其中势

垒高度 $U_0 = 1.0$ eV, 势垒宽度 $a = 0.8$ nm. 实线 M 形势垒的结果显示: 当电子的能量为 0.68 eV 时, 透射系数为 1, 此时电子发生了谐振隧穿, M 形势垒相对电子的运动来说是透明的; 在谐振隧穿前, 透射系数会随电子能量的增加而增加; 在谐振隧穿后, 透射系数随电子能量的增加会有个减小的过程. 虚线方形势垒的结果给出, 只有电子的能量大于势垒的高度 1.0 eV 时, 方形势垒才会出现谐振隧穿. 这意味着 M 形势垒比方形势垒更方便电子谐振隧穿, 因为 M 形势垒比方形势垒中间多了个 V 形势阱, 所以能在入射电子的能量小于势垒高度时就发生谐振隧穿. 图2结果还显示, 即使入射电子的能量大于势垒的高度, M 形和方形势垒电子的透射率也可能小于 1, 只有当入射电子的能量远远大于势垒的高度时, 透射系数才会一直接近于 1.

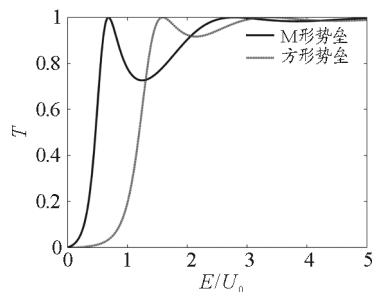


图2 透射系数随电子能量的变化

图3给出透射系数随势垒高度的变化, 其中入射电子的能量 $E = 1.0$ eV, 势垒宽度 $a = 0.8$ nm. M 形势垒的结果显示, 在 $U_0 = 1.97E$ 时电子会发生谐振隧穿, 在谐振隧穿前, 随着势垒高度的增加透射系数先减小后增加, 在谐振隧穿后, 透射系数随势垒高度的增加单调下降, 直到透射系数接近于零.

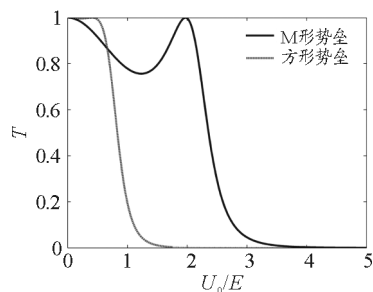


图3 透射系数随势垒高度的变化

对比图3中 M 形势垒和方形势垒的结果, 可发现: 在 $U_0 < 0.66E$ 时, M 形势垒的透射系数一直比

方形势垒的更小;在 $U_0 > 0.66E$ 时, M 形势垒的透射系数一直比方形势垒的更大. 这说明在低势垒区, 电子更容易透射方形势垒, 而在高势垒区, 电子更容易透射 M 形势垒.

图 4 给出透射系数随势垒宽度的变化, 其中入射电子的能量 $E = 1.0 \text{ eV}$. 不同小图中, 势垒的高度 U_0 不同. 结果显示, $U_0 = 0.8E$ 时, 无论 M 形势垒还是方形势垒, 透射系数随着势垒宽度的增加都近乎呈现周期性的谐振隧穿, 且最小透射系数大于 0.5; $U_0 = E$ 时, 随势垒宽度的增加, 方形势垒的透射系数迅速单调下降, 但 M 形势垒的透射系数还是近乎周期性地呈现谐振隧穿, 再次反映 M 形势垒相比方形势垒更容易发生谐振隧穿; 在 $U_0 = 1.5E$ 和 $U_0 = 2E$ 时, M 形势垒的透射系数发生谐振隧穿的次数相比 $U_0 = E$ 时减少很多, 且透射系数的部分峰值已经小于 1, 对应着没有谐振隧穿产生; 在 $U_0 = 4E$ 时, M 形势垒中虽然有透射峰的出现, 但已经不会出现谐振隧穿; 在 $U_0 = 5E$ 时, 更是连透射峰都消失了, 透射系数随势垒宽度的增加迅速单调衰减至零. 上述结果表明, 势垒高度与电子的能量差不多大时, M 形势垒中才容易出现谐振隧穿, 随着势垒高度的增加, M 形势垒中发生谐振隧穿的次数会越来越少, 直至没有谐振隧穿产生.

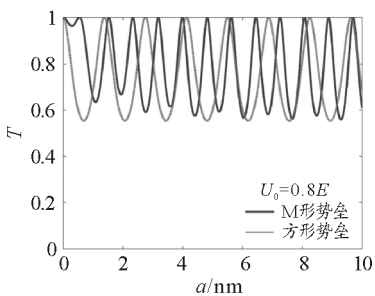
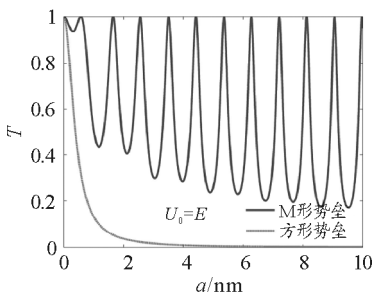
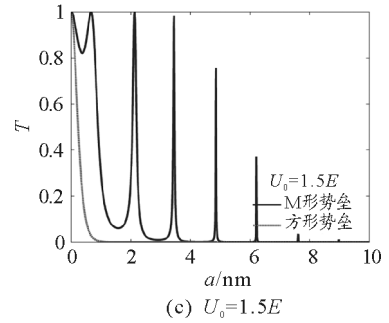
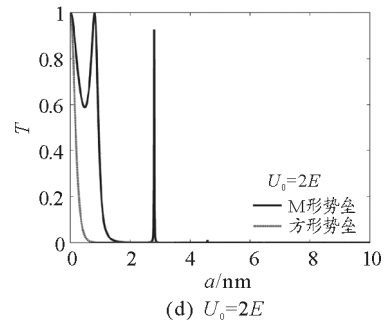
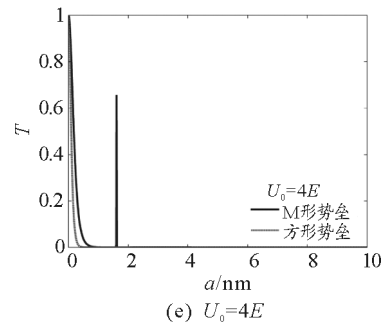
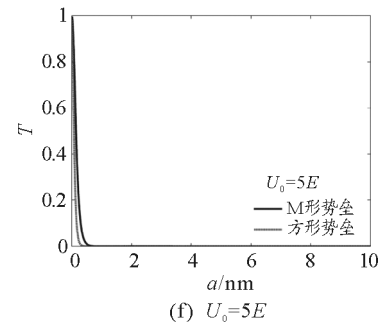
(a) $U_0 = 0.8E$ (b) $U_0 = E$ (c) $U_0 = 1.5E$ (d) $U_0 = 2E$ (e) $U_0 = 4E$ (f) $U_0 = 5E$

图 4 透射系数随势垒宽度的变化

4 结论

本文构造了一维 M 形势垒的模型, 基于薛定谔方程的求解, 给出了 M 形势垒中透射系数的表达式, 并数值分析了透射系数随入射电子的能量、势垒高度和宽度的变化情况. 结果表明, 在势垒高度不变时, 达到谐振隧穿前, 透射系数会随入射电子的能量

(下转第 30 页)

过习题巩固学习成果,但微视频没有包含习题讲解部分.下一步工作考虑在课堂上通过提问的方式检验学生预习情况;另外,扩大视频资源库,增设习题讲解模块,满足学生对微视频的需求.

参考文献

- 1 周战荣,马进,沈晓芳.大学物理微课教学的探索与实践.物理与工程,2016,26(Z1):121~124
- 2 雒向东.微时代大学物理教学模式研究——微课教学的有效应用.赤峰学院学报,2015,31(1):230~232

- 3 王祖源,倪忠强,吴天刚,等. MOOC 起步,从微课开始.物理与工程,2014,24(2):17~19
- 4 Shieh,D. These Lectures Are Gone in 60 Seconds. Chronicle of Higher Education,2009(26):1~13
- 5 魏英智,张晓兰,徐宝玉,等.“机械波”的大学物理课堂教学设计.物理通报,2015(1):18~20
- 6 何克抗.我国教育信息化理论研究新进展.中国电化教育,2011(1):1~19
- 7 周丹,胡玉才,牛雪莲,等.大学物理微课建设的实践与思考.高教学刊,2017(10):38~40

Practice and Result Analysis on Micro Course in the Teaching of University Physics

Zhang Lin Jiang Hongxi Li She Yang Mingzhu Zhou Bo

(College of Science, Heilongjiang University of Science and Technology, Harbin, Heilongjiang 150022)

Abstract: In view of the present in the teaching of university physics that the contents are more but the lecture periods are less, and the basic of physics is not uniform for the college students, this article carried out the research on micro-course of the teaching of university physics, and applied the production process of a micro-video, then summarized concrete applications and effects. Practice showed that the application of micro-video could help students to prepare and review the courses, and widen the students' field of vision and improve the students' ability of autonomous learning.

Key words: university physics; micro course; micro-video; resource sharing

(上接第 26 页)

的增加而增加,且当电子的能量小于势垒的高度时, M 形势垒中依然会出现谐振隧穿. 在入射电子的能量不变时,达到谐振隧穿前,随着势垒高度的增加透射系数会先减小后增加,在谐振隧穿后,随势垒高度的增加透射系数单调下降直至为零. 在入射电子的能量不变时,若势垒高度与电子能量相当,透射系数随着势垒宽度的增加会近乎呈现周期性的谐振隧穿,当势垒的高度逐渐变大, M 形势垒中发生谐振隧穿的次数会越来越少,最后会没有谐振隧穿产生. 进一步,本文将 M 形势垒的透射系数和方形势垒的透射系数做了比较,发现 M 形势垒比方形势垒更容易出现谐振隧穿,在低势垒区,电子更容易透射方形势垒,而在高势垒区,电子更容易透射 M 形势垒.

参考文献

- 1 张永德.量子力学(第2版).北京:高等教育出版社,2008.55~59
- 2 周世勋.量子力学教程(第2版).北京:高等教育出版社,2009.19~21
- 3 井孝功,赵永芳,吕天全,等.一维位势透射系数的计算与谐振隧穿现象的研究.计算物理,2000,17(6):649~654
- 4 胡来喜.一维多阶梯势垒的透射系数.数学教学研究,2011,30(1):50~53
- 5 罗强,姜玉梅,沈榴,等.一维梯形势垒透射系数的计算.大学物理,2014,33(12):42~46
- 6 骆敏,余观夏,林杨帆,等.三角形多势垒结构的共振透射系数的计算.四川大学学报(自然科学版),2015(1):117~122