一维 M 形势垒的不对称性对共振遂穿的影响*

赖菁霞　　吴仍来

（惠州学院电子信息与电气工程学院　广东 惠州　516007）

（收稿日期：2023－05－02）

摘　要：构建了不对称的 M 形势垒，用薛定谔方程和 airy 函数推导出电子的透射系数. 基于势垒的 3 种不对称模型，讨论了电子的透射系数和共振隧穿情况，系统地比较了不对称和对称 M 形势垒的共振隧穿，得出不对称性对共振隧穿的影响.

关键词：M 形势垒　透射系数　共振隧穿

1　引言

在经典力学中，粒子不可能跨越比其动能大的势垒. 而在量子力学中，实物粒子具有波粒二象性，微观粒子具有一定的几率跨越比其动能大的势垒，这种穿透比它动能更高的势垒的现象称为量子隧穿效应. 共振隧穿也称为共振透射，可理解为电子取特定能量时透射系数出现峰值.

很多的教材和文献都对势垒隧穿问题进行了讨论，最基础的有量子力学教材中方形势垒的贯穿问题[1-2]. 文献[3－4]求出了一维多个位势结构的透射系数，并对其中的共振隧穿现象进行了讨论，发现势垒数目越多，透射系数也会越小，多个方势垒结合等同于增加了势垒宽度，则粒子流的透射系数会减小甚至趋于零；文献[5]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[6]计算了一维三角形多势垒结构的共振透射系数；文献[7]将 M 形对称势垒与方势垒的透射系数进行比较和分析；文献[8]推导出了透射系数最大时对应的势垒间距表达式，并且给出了透射系数的振荡周期；文献[9]分析了双势垒量子隧穿特性，研究了电子在双势垒中隧穿过程的相干输运和非相干输运；文献[10]分析了势垒非对称性对隧穿的影响，发现势垒的对称性破坏得越严重，在低能区域发生共振隧穿的几率越小.

上述文献都以不同结构的势垒为基础，对一维体系的势垒贯穿现象和透射系数进行了分析和讨论. 共振隧穿往往发生在对称势垒中，对电子的输运性质具有重大的影响，但量子点内部可能由于缺陷存在种种不对称性. 本文构建非对称 M 形势垒，用来模拟量子点内部缺陷造成的势垒分布，讨论势垒的不对称性对透射系数和共振遂穿的影响，有助于理解电子通过量子点时的输运性质.

2　理论模型和求解

一维不对称 M形势垒的模型如图 1 所示，考虑能量为 E 的电子从 $x<0$ 处向右入射，M 形势垒的总宽度为 a，左右两边的势垒高度分别为 U_1 和 U_2. 将整个势垒分为 4 个区域：1 区（$x<0$），2 区（$0\leqslant x<b$），3 区（$b\leqslant x\leqslant a$），4 区（$x>a$）.

根据模型图 1，势能函数可表达为

$$U(x)=\begin{cases}0 & 1\text{ 区}\\ U_1-f_1x & 2\text{ 区}\\ f_2(x-b) & 3\text{ 区}\\ 0 & 4\text{ 区}\end{cases}\tag{1}$$

* 惠州学院校级教研项目，项目编号：2020JB009；广东省教育厅教研项目，项目编号：2021KTSCX130，2021KQNCX091.

作者简介：赖菁霞（1999－　），女，在读本科生.

通讯作者：吴仍来（1986－　），男，博士，副教授，主要从事物理教学和研究.

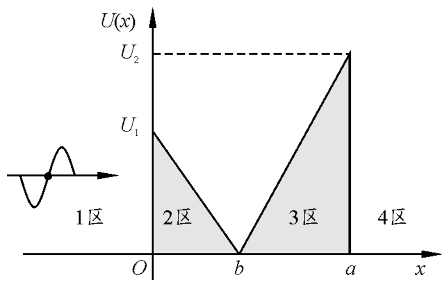


图 1 一维 M 形不对称势的模型图

式(1) 中

$$f_1=\frac{U_1}{b}\qquad f_2=\frac{U_2}{a-b}$$

用一维定态薛定谔方程描述粒子的运动状态，则有

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\Psi(x)=E\Psi(x)\tag{2}$$

其中 $m_e=9.1\times10^{-31}$ kg，$\hbar$ 为约化普朗克常量，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. 在 1 区和 4 区，$U=0$，令

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

易求得 1 区波函数的解为

$$\Psi_1(x)=A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\tag{3}$$

$A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 表示电子的入射波函数；$B_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 表示电子的反射波函数. 由于电子从左边入射，到达右边 4 区后不会再有反射，因此，4 区电子的波函数可表示为

$$\Psi_4(x)=A_4\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\tag{4}$$

在 2 区，电子的波函数满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2(x)}{\mathrm{d}x^2}+(U_1-f_1x)\Psi_2(x)=E\Psi_2(x)\tag{5}$$

令

$$\kappa_1=\left(\frac{2mf_1}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\qquad \zeta=\frac{\kappa_1}{f_1}(U_1-E-f_1x)$$

式(5) 简化为

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2(\zeta)}{\mathrm{d}\zeta^2}-\zeta\Psi_2(\zeta)=0\tag{6}$$

上式为 airy 方程[5-6]，其解为第一类 airy 函数 $\mathrm{Ai}(\zeta)$ 和第二类 airy 函数 $\mathrm{Bi}(\zeta)$ 的线性组合

$$\Psi_2(\zeta)=A_2\mathrm{Ai}(\zeta)+B_2\mathrm{Bi}(\zeta)\tag{7}$$

式中 A_2 和 B_2 为 2 区电子波函数的待定系数.

在 3 区，与 2 区波函数的求解过程相同，令

$$\kappa_2=\left(\frac{2mf_2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\qquad \eta=\frac{\kappa_2}{f_2}[f_2(x-b)-E]$$

可求得其解

$$\Psi_3(\eta)=A_3\mathrm{Ai}(\eta)+B_3\mathrm{Bi}(\eta)\tag{8}$$

式中 A_3 和 B_3 为 3 区电子波函数待定系数.

根据以上 4 个势垒区波函数的通解，可以通过波函数的连续性条件得出待定系数之间的关系，并求出电子的透射系数. 波函数的 3 个边界点分别为 $x=0$、$x=b$、$x=a$. 在 $x=0$ 处时，根据波函数及波函数一阶导数的连续性，可以得出

$$A_1+B_1=A_2\mathrm{Ai}(\zeta_1)+B_2\mathrm{Bi}(\zeta_1)\tag{9}$$

$$\mathrm{i}kA_1-\mathrm{i}kB_1=-\kappa_1A_2\mathrm{Ai}'(\zeta_1)-\kappa_1B_2\mathrm{Bi}'(\zeta_1)\tag{10}$$

其中 $\zeta_1=\kappa_1\dfrac{b(U_1-E)}{U_1}$ 为 $x=0$ 处变量 ζ 的取值. 在 $x=b$ 处时，根据波函数及波函数一阶导数的连续性，可以得出

$$A_2\mathrm{Ai}(\zeta_2)+B_2\mathrm{Bi}(\zeta_2)=A_3\mathrm{Ai}(\eta_1)+B_3\mathrm{Bi}(\eta_1)\tag{11}$$

$$-\kappa_1A_2\mathrm{Ai}'(\zeta_2)-\kappa_1B_2\mathrm{Bi}'(\zeta_2)=\kappa_2A_3\mathrm{Ai}'(\eta_1)+\kappa_2B_3\mathrm{Bi}'(\eta_1)\tag{12}$$

其中 $\zeta_2=-\kappa_1b\dfrac{E}{U_1}$，$\eta_1=(b-a)\kappa_2\dfrac{E}{U_2}$ 分别为 $x=b$ 处变量 ζ 和 η 的取值. 在 $x=a$ 处时，根据波函数及波函数一阶导数的连续性，可以得出

$$A_4\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=A_3\mathrm{Ai}(\eta_2)+B_3\mathrm{Bi}(\eta_2)\tag{13}$$

$$\mathrm{i}kA_4\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=\kappa_2A_3\mathrm{Ai}'(\eta_2)+\kappa_2B_3\mathrm{Bi}'(\eta_2)\tag{14}$$

其中 $\eta_2=\dfrac{\kappa_2(a-b)(U_2-E)}{U_2}$ 为 $x=a$ 时 η 的取值. 令

$$u=\mathrm{Ai}(\zeta_1)\qquad u'=\mathrm{Ai}'(\zeta_1)\qquad \sigma=\mathrm{Bi}(\zeta_1)$$
$$\sigma'=\mathrm{Bi}'(\zeta_1)\qquad c=\mathrm{Ai}(\zeta_2)\qquad c'=\mathrm{Ai}'(\zeta_2)$$
$$d=\mathrm{Bi}(\zeta_2)\qquad d'=\mathrm{Bi}'(\zeta_2)\qquad l=\mathrm{Ai}(\eta_1)$$
$$l'=\mathrm{Ai}'(\eta_1)\qquad s=\mathrm{Bi}(\eta_1)\qquad s'=\mathrm{Bi}'(\eta_1)$$
$$p=\mathrm{Ai}(\eta_2)\qquad p'=\mathrm{Ai}'(\eta_2)$$
$$q=\mathrm{Bi}(\eta_2)\qquad q'=\mathrm{Bi}'(\eta_2)$$

式(9) ～ (14) 可以简化为

$$A_1+B_1=uA_2+\sigma B_2\tag{15}$$

$$\mathrm{i}kA_1-\mathrm{i}kB_1=-\kappa_1u'A_2-\kappa_1\sigma'B_2\tag{16}$$

$$cA_2+dB_2=lA_3+sB_3\tag{17}$$

$$-\kappa_1c'A_2-\kappa_1d'B_2=\kappa_2l'A_3+\kappa_2s'B_3\tag{18}$$

$$A_4\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=pA_3+qB_3\tag{19}$$

$$\mathrm{i}kA_4\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=\kappa_2p'A_3+\kappa_2q'B_3\tag{20}$$

令

$$\alpha=\mathrm{i}ku-\kappa_1u'\qquad \chi=\mathrm{i}kp-\kappa_2p'$$
$$\beta=\mathrm{i}k\sigma-\kappa_1\sigma'\qquad \gamma=\mathrm{i}kq-\kappa_2q'$$
$$\delta=d'l\kappa_1+dl'\kappa_2\qquad \mu=c'l\kappa_1+cl'\kappa_2$$
$$\varepsilon=d's\kappa_1+ds'\kappa_2\qquad \nu=c's\kappa_1+cs'\kappa_2$$

根据 airy 方程的性质：对于任意的变量 x，airy 函数

满足朗斯基行列式

$$\mathrm{Ai}(x)\mathrm{Bi}'(x)-\mathrm{Ai}'(x)\mathrm{Bi}(x)=\frac{1}{\pi}$$

即有

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

$$ls'-l's=\frac{1}{\pi}\qquad pq'-p'q=\frac{1}{\pi}$$

利用 ik 乘以式(19) 再减去式(20) 得

$$A_3=-\frac{\kappa_2 q'-\mathrm{i}kq}{\kappa_2 p'-\mathrm{i}kp}B_3=-\frac{\gamma}{\chi}B_3 \tag{21}$$

将式(21) 代入式(19) 得

$$B_3=\frac{\mathrm{i}kp-\kappa_2 p'}{\kappa_2(pq'-p'q)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}A_4=\frac{\chi\pi}{\kappa_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}A_4 \tag{22}$$

将式(22) 代入式(21) 得

$$A_3=\frac{-\gamma\pi}{\kappa_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}A_4 \tag{23}$$

用$\frac{d'}{d}\kappa_1$ 乘以式(17) 再加上式(18) 得

$$A_2=\frac{\pi}{\kappa_1}(\delta A_3+\varepsilon B_3) \tag{24}$$

用$\frac{c'}{c}\kappa_1$ 乘以式(17) 再加上式(18) 得

$$B_2=\frac{-\pi}{\kappa_1}(\mu A_3+\nu B_3) \tag{25}$$

用 ik 乘以式(15) 再加上式(16) 得

$$A_1=\frac{1}{2\mathrm{i}k}(\alpha A_2+\beta B_2) \tag{26}$$

联立式(22) ～ (26) 整理可得

$$\frac{A_4}{A_1}=\frac{\kappa_1\kappa_2}{\pi^2}\frac{2\mathrm{i}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{(\alpha\varepsilon-\beta\nu)\chi-(\alpha\delta-\beta\mu)\gamma} \tag{27}$$

由式(27) 可以得出不对称 M 形势垒电子的透射系数

$$T=\left|\frac{A_4}{A_1}\right|^2=$$

$$\frac{4k^2\kappa_1^2\kappa_2^2}{\pi^4}\frac{1}{|(\alpha\varepsilon-\beta\nu)\chi-(\alpha\delta-\beta\mu)\gamma|^2} \tag{28}$$

3　数值计算与分析

以下讨论的不对称势垒分 3 种：等高不等宽势垒、等宽不等高势垒和不等宽不等高势垒. 下面通过数值求解出式(28) 的透射系数，并画出透射系数随入射电子能量和势垒宽度的变化图像.

图 2 为透射系数 T 随入射电子能量 E 的变化图像.

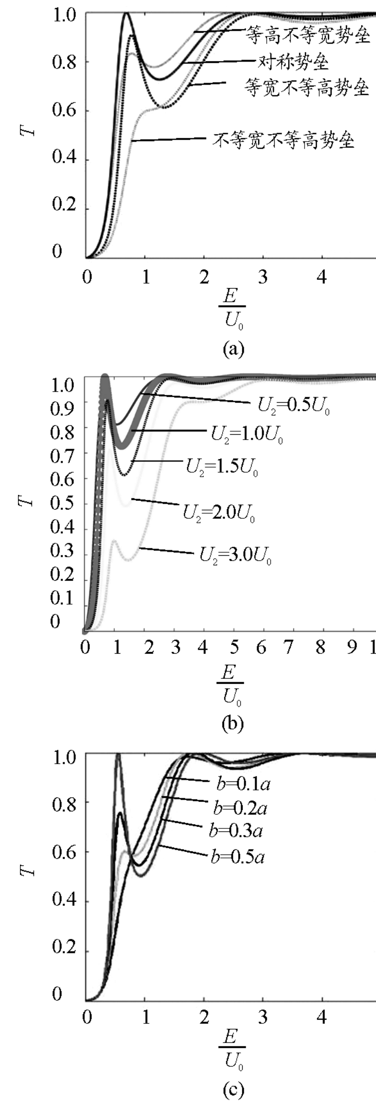


图 2　透射系数随电子能量的变化

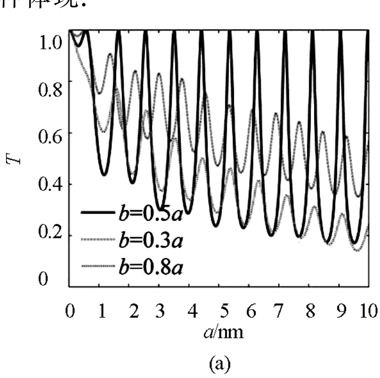
图 2(a) 描述了 M 形对称势垒、M 形等高不等宽势垒、M 形等宽不等高势垒以及 M 形不等高不等宽势垒的对比情况. 其中 M 形对称势垒的高度 $U_0=$ 1.0 eV，势垒总宽度 $a=$ 0.8 nm；M 形等高不等宽势垒高度 $U_0=U_1=U_2=$ 1.0 eV，势垒宽度 $a=$ 0.8 nm，$b=$0.2 nm；M 形等宽不等高势垒高度 $U_1=U_0=$1.0 eV，$U_2=$2.0 eV，势垒宽度 $a=2b=$0.8 nm；M 形不等高不等宽势垒高度 $U_1=U_0=$1.0 eV，$U_2=$2.0 eV，势垒宽度 $a=$0.8 nm，$b=$0.2 nm. 观察图(a) 透射系数的峰值，发现出现等于 1 和不等于 1 的情况，透射系数等于 1 时说明没有电子被反射，称为完全共振透射；小于 1 的，电子不能完全通过势垒，只能称为部分共振透射. 完全共振透射时电子的透射系数为 1，观察图中透射系数为 1 时入射电子的能量，可发现只有对称势垒在入射电子能量 E 小于 U_0 时发生了完全共振透射. 其余 3 种不对称势垒都

必须在电子能量大于U_0时才能发生完全共振隧穿，其中等高不等宽势垒在$E=1.76U_0$时发生完全共振透射；等宽不等高势垒在$E=1.86U_0$时发生完全共振透射；不等高不等宽势垒在$E=3.5U_0$入射电子的能量远大于势垒高度时发生完全共振透射.明显说明势垒对称性破坏程度越大，对电子的透射系数影响越大；不对称性越高，则电子的透射系数越小，越难实现完全共振透射.

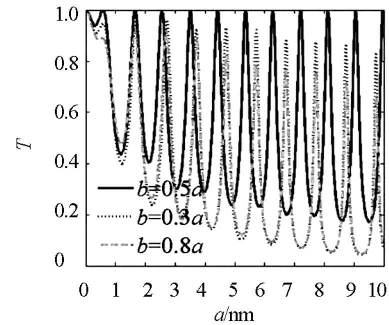
图 2(b) 描述了 5 种等宽不等高 M 形势垒的透射系数，两侧势垒宽度均为 0.4 nm，U_1与U_2调换不会改变透射系数的大小，势垒一侧高度固定为$U_1=U_0=1$ eV.图中显示，远离峰值区域入射电子的透射系数随着另一侧势垒U_2的减小而增加.但观察第一个透射峰，不是U_2越小，透射系数的峰值就越大，而是$U_2=U_1$时有最大峰值，且此时透射系数为 1.图 2(b) 中给出在电子能量小于势垒高度时，只有对称势垒才发生了完全共振透射.对于其他非对称势垒情形，势垒对大能量的电子也具有很强的反射作用，表现为电子能量大于势垒高度时透射率也总是小于 1.

图 2(c) 描述了 4 种等高不等宽 M 形势垒的透射系数，势垒两边高度$U_2=U_1=1$ eV，总宽度$a=1.0$ nm.图中可见，达到第一个极大值之前，随着b增加透射系数逐渐增大.b增大到为a的一半时，透射系数的第一个峰值逐渐增加到 1.图中结果说明势垒两边越对称，透射系数的第一个峰值越大，越容易达到完全共振透射，再次说明势垒的对称性对共振隧穿的影响非常大.

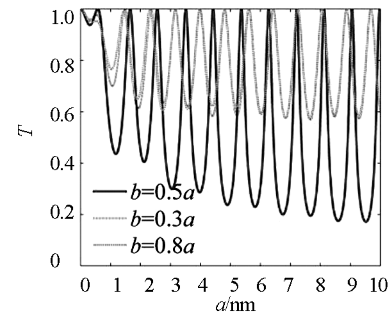
在不同宽度的 M 形势垒中，为了探讨电子能量小于势垒高度时，是否能发生完全共振透射，图 3 给出电子透射系数随势垒宽度a的变化图像.其中入射电子的能量$E=1$ eV.图 3(a)～图 3(c) 透射系数随势垒变宽出现周期性的振荡，这正是粒子波粒二象性的一种体现.



(a)



(b)



(c)

图 3　透射系数随势垒宽度的变化

图 3(a) 中$U_2=1.1$ eV，$U_1=0.5$ eV；此时电子能量高于U_1小于U_2，可发现$b=0.5a$的等宽不等高势垒在多个势垒宽度发生共振透射；$b=0.3a$的不等高不等宽势垒在$a=0.52$ nm时发生共振透射，且透射系数为 1.说明电子能量就算只低于一侧势垒高度时还是能发生完全共振透射.但也可发现不等高不等宽势垒除了一个透射峰的透射系数为 1，其他时候就算出现透射峰，其透射系数都是小于 1 的，此时电子不能完全通过势垒，只能称为部分共振透射；更加普遍的情况如此图中$b=0.8a$的情形，有透射率峰值，但却始终没有 100% 的透射率.说明完全共振透射的条件非常严格，一般要求势垒两侧宽度相等，否则在电子能量小于势垒高度时，不对称势垒一般只有部分共振透射，很少出现完全共振透射.

图 3(b) 中$U_2=U_1=1.1$ eV，此时电子能量同时小于U_1和U_2，$b=0.5a$的对称势垒在多个势垒宽度发生完全共振透射；等高不等宽势垒在$b=0.3a$时，在$a=1.68$ nm 处透射率取得最大值为 0.984 6；在$b=0.8a$时，在$a=1.65$ nm 处透射率取得最大值为 0.919.说明电子能量小于所有势垒高度时，透射系数能趋近 1，但很难发生完全共振透射的情况.

图 3(c) 中$U_2=U_1=1$ eV，此时电子能量同时等于U_1和U_2.在$b=0.3a$时，等高不等宽势垒在$a=1.68$

nm 处透射率取得最大值为 0.995，基本能达到 100% 隧穿；在 $b=0.8a$ 时，在 $a=2.54$ nm 透射率取得最大值为 0.975 7，接近完全共振透射. 说明电子能量等于势垒高度时，不对称势垒能发生完全共振透射.

4 结论

通过定态薛定谔方程求解，推导了一维 M 形非对称势垒的透射系数公式. 考虑势垒的各种不对称性模型，数值计算了透射系数随入射粒子能量和宽度的变化情况. 结果给出，M 形非对称与对称势垒的透射系数随入射粒子能量和宽度的变化类似. 同时 M 形势垒的对称性对透射系数的影响程度很大，对称性被破坏得越严重，入射电子的透射系数就越小，越难出现共振隧穿. 除此之外，不同宽度的 M 形势垒中，可发现透射系数随着势垒宽度呈现出周期性振荡. 在入射电子能量小于势垒高度时，完全共振透射的条件非常严格，一般要求势垒两侧宽度相等，等宽势垒在多个宽度出现完全共振透射；不等宽势垒则很难出现完全共振透射，一般只有部分共振透射，对应透射系数虽有极大值，但极大值小于 1. 文中 M 形势垒中间的 V 形破缺口可以理解为一个量子阱，当微观粒子进入势阱界面后会发生多次反射，微观粒子透射波保持相位相干性使透射系数达到 1. 合理调控势垒的高度和宽度，能使微观粒子达到理想的透射系数，从而实现共振隧穿. 共振隧穿对电子的输运性质具有重大的影响，本文的研究有助于理解量子点内部缺陷对电子输运性质的影响.

参考文献

[1] 张永德. 量子力学[M]. 2 版. 北京：高等教育出版社，2008:55－59.

[2] 周世勋. 量子力学教程[M]. 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[J]. 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[J]. 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[J]. 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[J]. 四川大学学报(自然科学版)，2015(1)：117－122.

[7] 吴仍来. 一维 M 形势垒透射系数的计算与分析[J]. 物理通报，2019，38(7)：22－30.

[8] 李海凤，王欣茂. 一维双方势垒量子隧穿的研究及其数值模拟[J]. 大学物理，2022，41(1)：15－18.

[9] 杨军，武文远，龚艳春，等. 电子双势垒量子隧穿的散射矩阵方法及其数值模拟[J]. 大学物理，2008，27(7)：6－11.

[10] 李春雷，肖景林. 势垒的非对称性对隧穿几率的影响[J]. 内蒙古民族大学学报(自然科学版)，2006，21(3)：253－256.

The Effect of Asymmetry of One-Dimensional M-Shaped Potential Barrier on Resonant Transmission

LAI Jingxia　WU Renglai

(School of Electronic Information and Electrical Engineering, Huizhou University, Huizhou, Guangdong　516007)

Abstract: By constructing an asymmetric M-shaped potential barrier model, we derived the electron transmission coefficient by using the Schrödinger equation and Airy function. Based on three asymmetric models of potential barriers, we discussed the transmission coefficient and resonant tunneling of electrons, and systematically compared the resonant tunneling of asymmetric and symmetric M-shaped potential barriers, and declared the influence of asymmetry on resonant tunneling.

Key words: M-shaped potential barrier; transmission coefficient; resonant transmission