

量子视域下粒子势垒贯穿的研究

周若菁¹ 杨 宣² 陈云洁¹ 杜慧涓¹ 郑兴荣^{1*}

1.陇东学院新能源学院, 甘肃 庆阳 745000

2.陇东学院经济管理学院, 甘肃 庆阳 745000

[摘要]结合改进的转移矩阵法, 本文利用理论推导和数值计算相结合的方法, 依托一维方形势垒, 重点研究了自由粒子在能量 E 大于势垒能量 U_0 情况下势垒贯穿的量子输运特性, 包括粒子的波函数, 几率流密度, 及其透射系数和反射系数等。结果表明: 粒子的势垒贯穿既有可能存在透射, 也有可能存在反射; 粒子透射系数 T 和反射系数 R 都小于 1, 且 T 与 R 之和等于 1; 随着粒子能量 E 、势垒能量 (势垒高度) U_0 和势垒宽度 a 的变化, 透射系数 T 和反射系数 R 呈现对数函数型变化, 且这种变化行为在粒子能量越大, 势垒高度越大, 或者势垒宽度越大的情况下越明显。另外, 在 $E > U_0$ 的情况下, 随着势垒宽度、势垒高度和粒子能量的增大, 透射系数和反射系数出现阻尼振荡行为, 表现出良好的导电性和量子信息的载体性。

[关键词]势垒贯穿; 改进的转移矩阵法; 输运特性; 透射系数; 反射系数

DOI: 10.33142/nsr.v3i2.20006

中图分类号: O4

文献标识码: A

Study on Barrier Penetration of Particle in Quantum Perspective

ZHOU Ruojing¹, YANG Xuan², CHEN Yunjie¹, DU Huijuan¹, ZHENG Xingrong^{1*}

1. College of New Energy, Longdong University, Qingyang, Gansu, 745000, China

2. School of Economics and Management, Longdong University, Qingyang, Gansu, 745000, China

Abstract: Combining the improved transfer matrix method, this paper uses a combination of theoretical derivation and numerical calculation, relying on a one-dimensional square potential barrier, to focus on the quantum transport characteristics of free particles penetrated by the potential barrier when the energy E is greater than the energy U_0 , including the particle's wave function, probability current density, transmission coefficient, and reflection coefficient. The results indicate that the potential barrier penetration of particles may involve both transmission and reflection; The particle transmission coefficient T and reflection coefficient R are both less than 1, and the sum of T and R is equal to 1; As the particle energy E , barrier energy (barrier height) U_0 , and barrier width a change, the transmission coefficient T and reflection coefficient R exhibit logarithmic function changes, and this change behavior becomes more pronounced as the particle energy increases, the barrier height increases, or the barrier width increases. In addition, in the case of $E > U_0$, as the barrier width, barrier height, and particle energy increase, the transmission coefficient and reflection coefficient exhibit damping oscillation behavior, demonstrating good conductivity and carrier of quantum information.

Keywords: barrier penetration; improved transfer matrix method; transportation characteristics; transmission coefficient; reflection coefficient

引言

近年来, 随着大数据、云计算、人工智能和互联网等技术的快速发展和加速创新, 信息技术, 尤其是信息安全和信息储存, 已经融入社会发展各领域全过程。信息技术发展速度之快、辐射范围之广、影响程度之深前所未有, 正在成为改变全球竞争格局的关键力量。随着自旋电子学这门新兴学科的出现, 半导体技术在信息安全和储存方面的应用价值, 使得其得到了快速的发展, 而粒子的势垒贯

穿 (隧道效应) 作为半导体技术必不可少的重要原理和机制之一, 有着重要的作用^[1-5]。势垒贯穿, 也叫隧道效应, 指的是在量子理论中, 如果粒子能量大于势垒能量时, 粒子有可能越过势垒, 也有可能被势垒反射回来; 如果粒子能量小于势垒能量时, 粒子有可能贯穿势垒运动到势垒右边的区域中, 也有可能被势垒反弹回来。势垒很宽或能量差 (势垒高度) 很大或粒子质量很大时, 贯穿系数 T 约为零, 隧道效应在实际上已经没有意义, 量子概念过渡到经

典力学情形。因此,粒子的隧道效应是微观粒子的量子力学行为,宏观粒子是不会发生隧道贯穿效应的^[6]。同时,势垒贯穿作为许多自然现象的基础,存在于各个领域,如核物理、材料物理,以及新型材料和电子半导体等领域^[7-10]。因此,对于势垒及其势垒贯穿的研究具有重要意义。本文从粒子的势垒贯穿这个方向来研究势垒及其相关特性。

粒子的势垒贯穿应用广泛,有很多用途。如根据势垒贯穿(隧道效应)原理,可以制成分辨率为0.1nm量级的扫描隧道显微镜,适用于半导体样品的观察;利用光纤探测头、压电陶瓷、光电倍增管、扫描控制跟踪系统和微机,可以构成光隧道显微镜,可以探测样品的表面形貌;利用量子势垒贯穿原理可以制成光纤中的分光器;借助光子辅助电子隧穿制备高速电子隧穿器件等。因此,在国内外,势垒贯穿(隧道效应)及其相关特性的研究趋于白热化。如Kuklin S N等人利用势垒贯穿提取了聚类放射性中的光谱因子^[11];骆敏等人计算了三角形多势垒结构的共振透射系数^[12];王焕友做了一维势垒贯穿时透射系数的计算与MATLAB分析^[13];柯常青和丁益民基于Matlab专门研究

了势垒贯穿的透射系数^[14];明庭尧研究了三势垒共振隧道结构中电子的几率分布和势垒贯穿系数^[15];秦玉娇等人给出了一种势垒贯穿的传输矩阵的计算方法^[16];李立等人运用MATLAB软件对势垒及其隧道效应做了可视化的教学探讨,重点研究了粒子波在一维势垒中的传播情况^[17]。尽管研究众多,但在众多的研究中只是单方面地进行理论研究或者数值计算,没有相关文献基础性地、系统性地、综合性地专门研究势垒贯穿及其特性。在前期工作的基础上,本文结合转移矩阵法^[18],利用理论推导和数值计算相结合的方法,依托一维方形势垒,重点研究了自由粒子势垒贯穿的基本特性,包括粒子波函数的入射波、反射波和透射波,透射系数和反射系数等。本文研究的势垒贯穿及其特性是最基础、最重要的,为与其相关的物理现象及其技术的研究奠定了基础,如磁势垒、复合磁势垒纳米结构中各种效应、电子自旋输运等特性。

1 理论模型与推导

在一维空间里,设一个质量为 m ,能量为 E 的粒子,沿 x 轴正方向向方势垒运动,如图1所示。

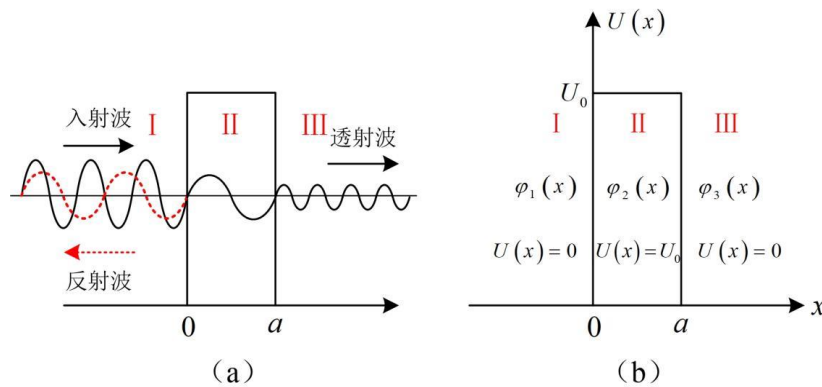


图1 一维方势垒模型图及其示意图

一维方势垒的势能为:

$$\begin{cases} U(x)=0, & x < 0 \\ U(x)=U_0, & 0 \leq x \leq a \\ U(x)=0, & x > a \end{cases} \quad (1)$$

其中 x 的三个范围分别对应图中的三个区域,即:

$$\begin{cases} x < 0, & \text{区域I} \\ 0 \leq x \leq a, & \text{区域II} \\ x > a, & \text{区域III} \end{cases} \quad (2)$$

由于势垒能量 $U(x)$ 与时间没有关系,所以是一个定态问题。因此,自由粒子在三个区域内的波函数分别为 $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$, $\varphi_3(x)$,分别满足对应的定态薛定谔方程为:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} = E \varphi_1(x), & x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + U_0 \varphi_2(x) = E \varphi_2(x), & 0 \leq x \leq a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_3(x)}{dx^2} = E \varphi_3(x), & x > a \end{cases} \quad (3)$$

通过整理,得:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi_1(x) = 0, & x < 0 \\ \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \varphi_2(x) = 0, & 0 \leq x \leq a \\ \frac{d^2 \varphi_3(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi_3(x) = 0, & x > a \end{cases} \quad (4)$$

对于粒子的能量大于势垒能量,即 $E > U_0$,根据量子

理论, 粒子能量大于势垒能量(高度)时, 粒子有可能越过势垒, 也有可能被势垒反弹回来。因此粒子既有可能存在透射, 也有可能存在反射。

令:

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, k_2^2 = \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2} \quad (5)$$

化简, 得:

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\varphi_1(x) = 0, & x < 0 \\ \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + k_2^2(E-U_0)\varphi_2(x) = 0, & 0 \leq x \leq a \\ \frac{d^2\varphi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\varphi_3(x) = 0, & x > a \end{cases} \quad (6)$$

利用二阶常微分方程的求解方法, 得到三个波函数的解分别为:

$$\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} \quad (7)$$

$$\varphi_2(x) = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} \quad (8)$$

$$\varphi_3(x) = Ce^{ik_1x} + C'e^{-ik_1x} \quad (9)$$

由于在区域 III 中, 粒子只有透射, 没有反射, 所以 $C' = 0$ 。再利用波函数的边界条件及其微分在边界处连续的条件可求得参数 A, A', B, B', C ^[6]。即可得到粒子透射波与入射波振幅、反射波和入射波振幅之间的关系:

$$C = \frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a} - (k_1-k_2)^2e^{ik_2a}} A \quad (10)$$

$$A' = \frac{2i(k_1^2 - k_2^2)\sin(ak_2)}{(k_1 - k_2)^2e^{ik_2a} - (k_1 + k_2)^2e^{-ik_2a}} A \quad (11)$$

$$B = \frac{2k_1(k_1 + k_2)e^{-ik_2a}}{(k_1 + k_2)^2e^{-ik_2a} - (k_1 - k_2)^2e^{ik_2a}} A \quad (12)$$

$$B' = \frac{2k_1(k_1 - k_2)e^{ik_2a}}{(k_1 - k_2)^2e^{ik_2a} - (k_1 + k_2)^2e^{-ik_2a}} A \quad (13)$$

$$C' = 0 \quad (14)$$

根据粒子数守恒定律及其粒子流密度公式:

$$J \equiv \frac{i\hbar}{2m} (\psi \cdot \nabla \psi^* - \psi^* \cdot \nabla \psi) \quad (15)$$

得到入射波的几率流密度为:

$$J = \frac{i\hbar}{2m} [Ae^{ik_1x} \frac{d}{dx} (Ae^{-ik_1x}) - Ae^{-ik_1x} \frac{d}{dx} (Ae^{ik_1x})] = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \quad (16)$$

透射波的几率流密度为:

$$J_T = \frac{i\hbar}{2m} [Ce^{ik_1x} \frac{d}{dx} (Ce^{-ik_1x}) - Ce^{-ik_1x} \frac{d}{dx} (Ce^{ik_1x})] = \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2 \quad (17)$$

反射波的几率流密度为:

$$J_R = \frac{i\hbar}{2m} [A'e^{ik_1x} \frac{d}{dx} (A'e^{-ik_1x}) - A'e^{-ik_1x} \frac{d}{dx} (A'e^{ik_1x})] = \frac{\hbar k_1}{m} |A'|^2 \quad (18)$$

所以, 透射系数为:

$$T = \frac{J_T}{J} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)\sin^2(ak_2) + 4k_1^2k_2^2} \quad (19)$$

反射系数为:

$$R = \frac{|J_R|}{|J|} = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2a)}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2a) + 4k_1^2k_2^2} \quad (20)$$

2 结果与讨论

根据粒子势垒贯穿的透射系数和反射系数的推导公式(19)(20), 运用 MATLAB 软件进行编程, 计算了 $E > U_0$ 时粒子的透射系数 T 随粒子能量 E 、势垒高度 U_0 、势垒宽度 a 变化关系, 得到了三种不同势垒宽度、三种不同势垒能量(高度)下的透射系数和反射系数随粒子能量的变化关系图, 如图 2 所示。图中⊕表示最大值, ⊗表示最小值。同理, 得到了反射系数 T 的变化图, 如图 3 所示。

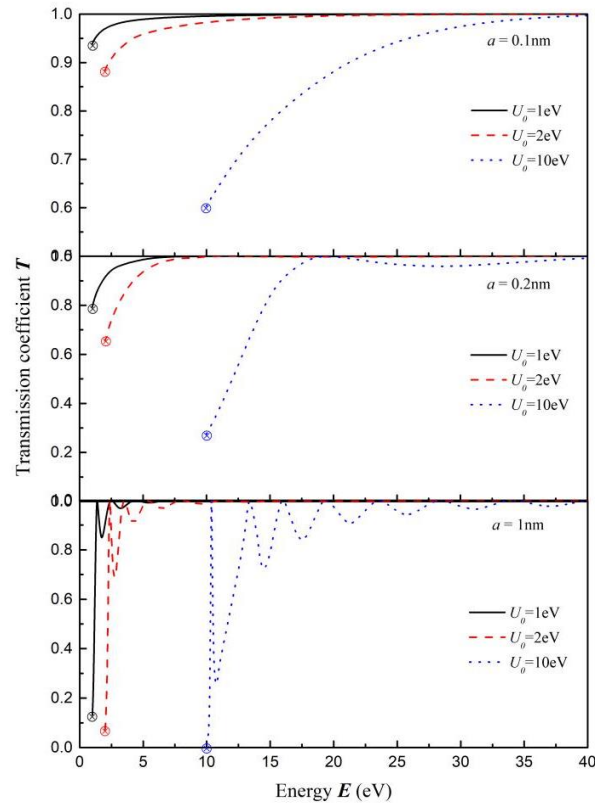


图 2 $E > U_0$ 时透射系数 T 随粒子能量 E , 势垒高度 U_0 和势垒宽度 a 的变化

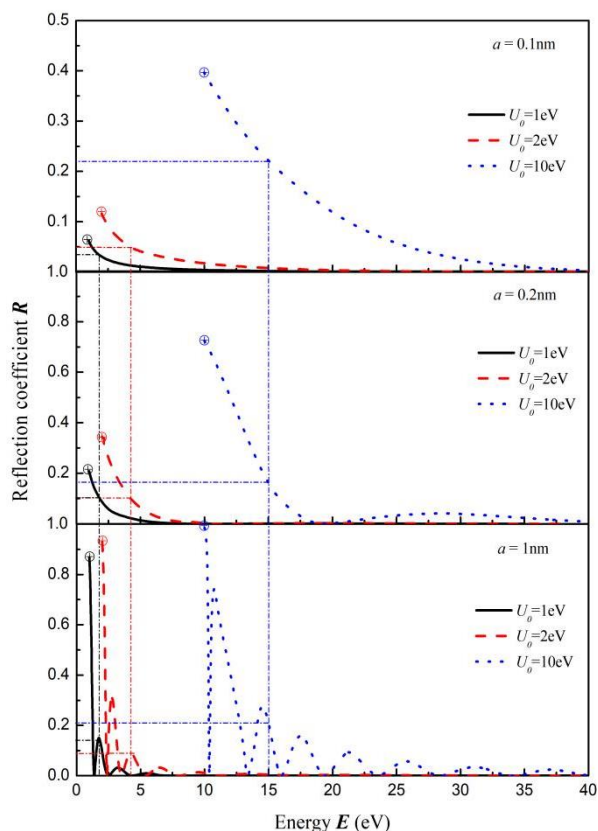


图3 $E > U_0$ 时反射系数 R 随粒子能量 E 、
势垒高度 U_0 和势垒宽度 a 的变化

从图2可以看出,当 $E > U_0$ 时,总体上看,当势垒高度 U_0 和势垒宽度 a 一定时,随着粒子能量 E 的增大,透射系数 T 和反射系数 R 呈对数函数型变化,透射系数 T 迅速增大,随后变化缓慢并趋向于1;当粒子能量 E 和势垒宽度 a 一定时,随着势垒高度 U_0 的增大, T 呈对数函数型变化,透射系数 T 变化缓慢,随后迅速减小。图3显示,当势垒高度 U_0 和势垒宽度 a 一定时,随着粒子能量 E 的增大,反射系数 R 呈对数函数型变化,反射系数 R 迅速减小,随后缓慢变化并趋于0;当粒子能量 E 和势垒宽度 a 一定时,随着势垒高度 U_0 的增大, R 也呈对数函数型变化,反射系数 R 变化缓慢,随后迅速增大。

结合图2和图3,当 $E > U_0$ 时,粒子势垒贯穿的透射系数 T 和反射系数 R 都小于1,且 T 与 R 之和等于1。结合三种不同势垒宽度 a 、不同势垒高度 U_0 的图形,随着 a 和 U_0 的增大,透射系数 T 的最小值越来越接近0;随着 a 和 U_0 的增大,透射系数 T 呈现阻尼振荡行为;随着 a 和 U_0 的增大,透射系数 T 的阻尼振荡行为越多,但周期变小,振幅变大。反射系数 R 的特性正好相反。这种可视化的结果与理论结果完全吻合^[6]。另外,从理论和数值计

算还发现,当粒子能量 E 趋近于势垒能量 U_0 时,区域II的波矢 k_2 趋于零。同时,粒子能够越过势垒,但还会发生反射。

这种图形的优点在于将四维、三维等高维空间转化成二维平面图,使得更加直观、具体地表现出来,有利于读者的理解。同时也为研究磁电势垒及其特性的研究奠定了坚实的基础。

3 结论

粒子的势垒贯穿作为量子理论中最基本、最重要的现象之一,在许多领域起到了重要的作用,尤其是新兴的半导体领域。基于此,本文利用理论推导和数值计算相结合的方法,依托一维方形势垒,重点研究了粒子的势垒贯穿及其基本特性,包括势垒贯穿模型、波函数、入射波、反射波、透射波及其几率流密度,透射系数和反射系数等。结合前期研究,结果表明:粒子既有可能存在透射,也有可能存在反射。粒子的透射系数 T 和反射系数 R 都小于1,且 T 与 R 之和等于1。透射系数 T 和反射系数 R 总体上呈对数函数型变化,且这种变化行为在粒子能量越大,势垒高度越大,或者势垒宽度越大的情况下越明显。 $E > U_0$ 的情况下,当势垒高度 U_0 和势垒宽度 a 一定时,随着粒子能量 E 的增大,透射系数 T 迅速增大,随后变化缓慢并趋向于1,反射系数 R 迅速减小,随后缓慢变化并趋于0;当 E 和 a 一定时,随着 U_0 的增大, T 和 R 也呈对数函数型变化,透射系数 T 变化缓慢,随后迅速减小,反射系数 R 变化缓慢,随后迅速增大。结合三种不同势垒宽度 a 、不同势垒高度 U_0 的图形,随着 a 和 U_0 的增大,透射系数 T 的最小值越来越接近0;随着 a 和 U_0 的增大,透射系数 T 出现阻尼振荡行为;随着 a 和 U_0 的增大,透射系数 T 的阻尼振荡数越多,但周期变小,振幅变大。反射系数 R 的特性正好相反。另外,当粒子能量 E 趋近于势垒能量 U_0 时,区域II的波矢 k_2 趋于零。

这种可视化的结果与理论结果完全吻合。这种可视化图形的优点在于将四维、三维等高维空间转化成二维平面图,使得更加直观、具体地表现出来,有利于读者的理解。同时也为下一步研究双、多磁电势垒及其特性的研究奠定了坚实的基础。本文中研究的势垒贯穿及其相关特性,不仅是研究半导体材料中电势垒、磁势垒,及其磁电垒结构的基础,同时也对实现半导体材料中电子自旋极化调控和自旋过滤现象的深入研究有一定的指导性意义。

资助项目:陇东学院2026年校级高等教育教学研究项目(LYJYJX2026A32),甘肃省2025年学校思想政治工作课题(2025XXSZGZYBKT075),甘肃省自然科学基

金 (23JRRM0755)。

[参考文献]

[1] Chen L J, Chen Y S, et al. Spatial electron-spin splitting in single-layered semiconductor microstructure modulated by Dresselhaus spin-orbit coupling[J]. Chinese Physics B, 2024,33(11):118501-118501.

[2]温丽,卢卯旺,陈嘉丽,等.电子在自旋-轨道耦合调制下磁受限半导体纳米结构中的传输时间及其自旋极化[J].物理学报,2024,73(11):383-390.

[3]Zheng X R, Li F F. Spin dependent conductance and magnetoresistance ratio in two magnetic barrier structures[J]. Canadian Journal Of Physics,2024,102(10):544-550.

[4]李春雷,郑军,王小明,等.光场辐照下稀磁半导体/半导体超晶格中自旋电子输运特性研究[J].物理学报,2023,72(22):254-260.

[5]张桂莲,卢卯旺,等.磁、电受限半导体异质结构中电子的滤波过滤效应[J].光电子,2020,10(4):123-132.

[6] Zhou S X. Quantum Mechanics Course [M]. Beijing: Higher Education Press,2008.

[7]李家全,宋先瑛,等.高温氘等离子体中的势垒贯穿[J].核聚变与等离子体物理,2003,23(4):210-214.

[8]陈赛艳,杨达莉,等.复合磁电垒纳米结构中的电子自旋过滤器[J].核聚变与等离子体物理,2017,54(1):119-123.

[9] Gautam M S. Effects of intrinsic degrees of freedom in enhancement of sub-barrier fusion excitation function data and energy-dependent one-dimensional barrier penetration

model[J].Indian Journal of Physics,2016,90(3):335-345.

[10] Tang Q, Lu M W, et al. Lateral Shifts for Spin Electrons in a Hybrid Magnetic-Electric-Barrier Nanostructure Modulated by Spin-Orbit Couplings[J]. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism,2018(31): 1383-1388.

[11] Kuklin S N, Adamian G G, et al. Spectroscopic Factors and Barrier Penetrabilities in Cluster Radioactivity[J]. Physics of Atomic Nuclei,2005,68(9):1443-1452.

[12]驼敏,余观夏,等.三角形多势垒结构的共振投射系数的计算[J].四川大学学报,2015(52):117.

[13]王焕友.一维势垒贯穿时透射系数的计算与 MATLAB 分析[J].科技创新导报,2016,13(12):70-72.

[14]柯常青,丁益民.基于 Matlab 的势垒贯穿透射系数研究[J].物理与工程,2015,25(1):76-77.

[15]明庭尧.三势垒共振隧道结构中电子的几率分布和势垒贯穿系数[J].西南师范大学学报,2014,39(11):56-61.

[16]秦玉娇,王宁,刘敏.势垒贯穿的传输矩阵计算方法[J].广西物理,2012,33(2):1-5.

[17]李立,张皓晶,等.基于 Matlab 的势垒与隧道效应可视化教学探讨[J].云南大学学报,2019,41(1):39-43.

[18]卢卯旺.粒子在任意势垒中的隧穿:转移矩阵法[J].零陵学院学报,2004,25(6):4-7.

作者简介:周若菁,女,研究方向为量子理论模型的数值计算与仿真;*通讯作者:郑兴荣,男,凝聚态理论物理与新能源、半导体材料的计算、仿真。