

一維雙壘勢透射係數的計算

Calculation of Transmission Coefficient of 1-D Double Barrier Potential

作者—柳銘哲

元培醫事科技大學 通識教育中心 助理教授

摘要

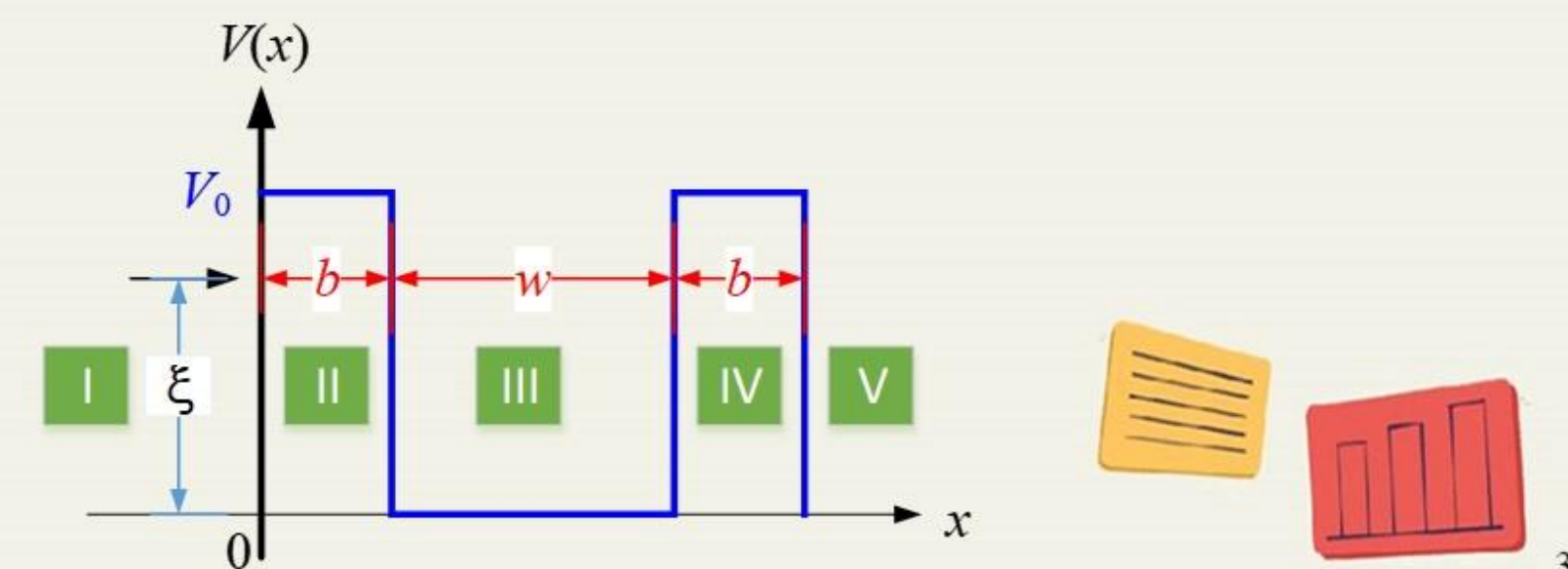
摘要

問題

現代科技一日千里，半導體先進製程不斷向微小尺寸邁進。其所依據的理論已非我們日常直觀所能理解。譬如一維雙壘勢穿透現象，就無法用古典物理的圖像來理解它，而必須用量子力學才能解釋。而這個現象的正確理解就迎來穿透式電子顯微鏡的問世，它對原子世界更深入的研究又提供了強而有力的實驗武器。總之，現代科技的昌明，量子這一概念扮演重要的角色。想要一窺量子現象的神祕，缺不了大量的數學演算，但這會嚇走許多非理工科的同儕，因此，我們藉由一款強大的數學軟體 **Mathematica**，像高中做理化實驗般的在同儕面前展示數學運算後的結果。並對結果作一番解釋。就如同1954年因在化學鍵方面的傑出工作取得諾貝爾化學獎的鮑林一樣，用經過他提煉過的知識、規則，方便以後的科學家解釋它們的實驗，而不必再陷入冗長的數學運算。

總之，我們的目的是藉著一門「物理與生活」的通識課，向同學展示量子這一新奇現象，並利用 **Mathematica**，跳過很多人覺得枯燥的數學運算，再利用前人總結的一些規律對這一現象給予現代的解釋。這樣的教學模式對不擅長理工的學生比較有吸引力，而且能學到比較新的知識，而不是一直在古典物理知識上打轉——當然它也很重要——只是現在的手機、量子傳輸、量子運算等都需要量子概念。

散射問題在量子物理中是一個重要的問題。我們探討一維散射的例子，其勢函數如圖所示，電子從左邊向右入射，計算電子的透射係數。圖中有兩個勢壘，中間夾一個勢阱。勢壘寬度用 b 表示，勢阱寬度用 w 表示，勢壘的高度為 V_0 ，勢阱內及兩邊的勢能均是 0。設電子的入射能量小於勢壘高度。按經典物理，這樣的電子只能 100% 反射，但量子力學求解的結果是：電子有部分透射，部分反射，而且透射係數與入射能量有微妙的關係。



關鍵詞：一維雙壘勢，穿透，透射係數，量子、Mathematica

Mathematica 的符號運算和公式化簡

各區波函數

求一次導函數連續

經驗顯示，在固體內部，電子的質量用“有效質量”代替，電子的運動仍可以用薛丁格方程描寫。對於圖中這樣的規則勢函數模型，透射係數的計算有解析解。但對討厭手算的學生，我們用 **Mathematica** 的符號運算和公式化簡功能，並用化簡後的結果求得透射係數與入射能量的關係。

區域 I 內（原點以左，自由傳播區），設入射電子為平面波，反射電子也是平面波，總的波函數可寫為

$$\psi_1 = a_1 * e^{i\alpha x} + a_2 * e^{-i\alpha x}$$

第一項為入射波，第二項為反射波， $\alpha = \sqrt{2mE}/\hbar$

在區域 II 即左邊勢壘區，波函數可寫為

$$\psi_2 = b_1 * e^{\beta x} + b_2 * e^{-\beta x}$$

依此類推，可以寫出其他區域的波函數。

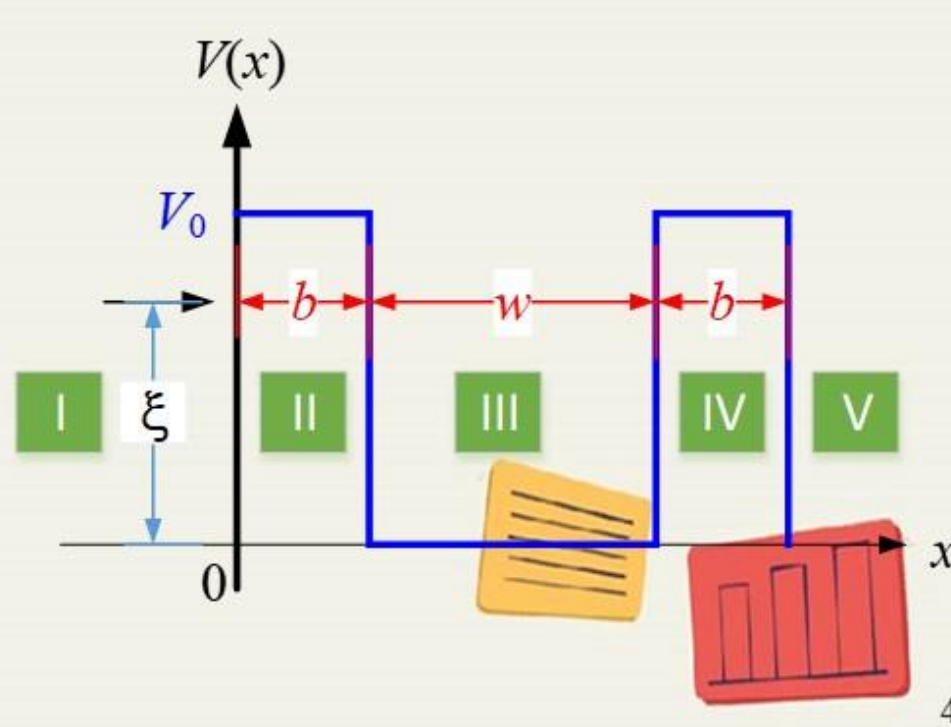
ψ 只有第一項，表示電子透過勢壘區，正向右邊傳播。透射係數定義為

$$T = \left| \frac{f_1}{a_1} \right|^2$$

如果取 $a_1 = 1$ ，則

$$T = |f_1|^2$$

我們可將全部空間從左到右分成 5 個區域，分別命名為區域 I~區域 V；在每個區域內都寫出薛丁格方程並求其通解，然後用邊界條件（波函數及其一次導函數連續）把它們連接起來。



$\psi_3 = c_1 * e^{i\alpha x} + c_2 * e^{-i\alpha x}$
 $\psi_4 = d_1 * e^{\beta x} + d_2 * e^{-\beta x}$
 $\psi_5 = f_1 * e^{i\alpha x}$

以 $x=0$ 為例，一次導函數連續的 Mathematica 語法為

$$(D[\text{Log}[\psi_1], x] /. x \rightarrow 0) == D[\text{Log}[\psi_2], x] /. x \rightarrow 0$$

為了建立係數比值之間的關係，我們令

$$k_1 = \frac{d_1}{d_2}, \quad k_2 = \frac{c_1}{c_2}, \quad k_3 = \frac{b_1}{b_2}, \quad k_4 = \frac{a_1}{a_2}$$

替換運算符號 /. u -> v

將 8 個係數確定

解聯立方程式

以 $x=2b+w$ 為例，要解 k_1 的 Mathematica 語法為

$$\text{Solve}\left[\frac{-e^{-(2b+w)\beta} \beta + k_1 e^{(2b+w)\beta} \beta}{e^{-(2b+w)\beta} \beta + k_1 e^{(2b+w)\beta} \beta} == i \alpha, k_1\right]$$

以 $x=b+w$ 為例，要解 k_2 的 Mathematica 語法為

$$\text{Solve}\left[\frac{-i e^{-i(b+w)\alpha} \alpha + i k_2 e^{i(b+w)\alpha} \alpha}{e^{-i(b+w)\alpha} \alpha + k_2 e^{i(b+w)\alpha} \alpha} == \dots\right]$$

再利用波函數的邊界連續性，確立四個係數關係式。連同前面求得的 k_1, k_2, k_3, k_4 ，就可以把 $a_2, b_1, b_2, c_1, c_2, d_1, d_2, f_1$ 8 個係數確定（只要令 $a_1 = 1$ ）。

以 $x=b$ 為例，波函數連續的 Mathematica 語法為

$$(\psi_2 /. x \rightarrow b) == (\psi_3 /. x \rightarrow b)$$

我們令所有的長度都以納米 (nm) 為單位，能量以電子伏特為單位。在固體內，電子的有效質量不再等於電子的“裸質量”，例如在砷化鎵材料中，電子有效質量只有“裸質量”的 0.067 倍。取勢壘高度為 1.355 eV，勢壘寬度為 2nm，勢阱寬度為 5nm。這樣一來， $\alpha = \text{const} \cdot \sqrt{E}$ ， $\beta = \text{const} \cdot \sqrt{V_0 - E}$ ，其中 $\text{const} = 1.32521$

Do loop 中，expr 就是你要重複做的計算，重複幾次由 i 決定，i 從 i_{\min} 一直進行到 i_{\max} ，每次跳 di 步。

解 $\begin{cases} 1 + \frac{1}{k_4} = b_1 + b_2 \\ b_1 = b_2 \times k_3 \end{cases}$ 聯立方程式，將 b_1, b_2 用 k_3, k_4 表示。/. s[[1]] 表示將 k_3, k_4 之值帶入 b_1, b_2 。

Mathematica 指令

違背古典物理的認知

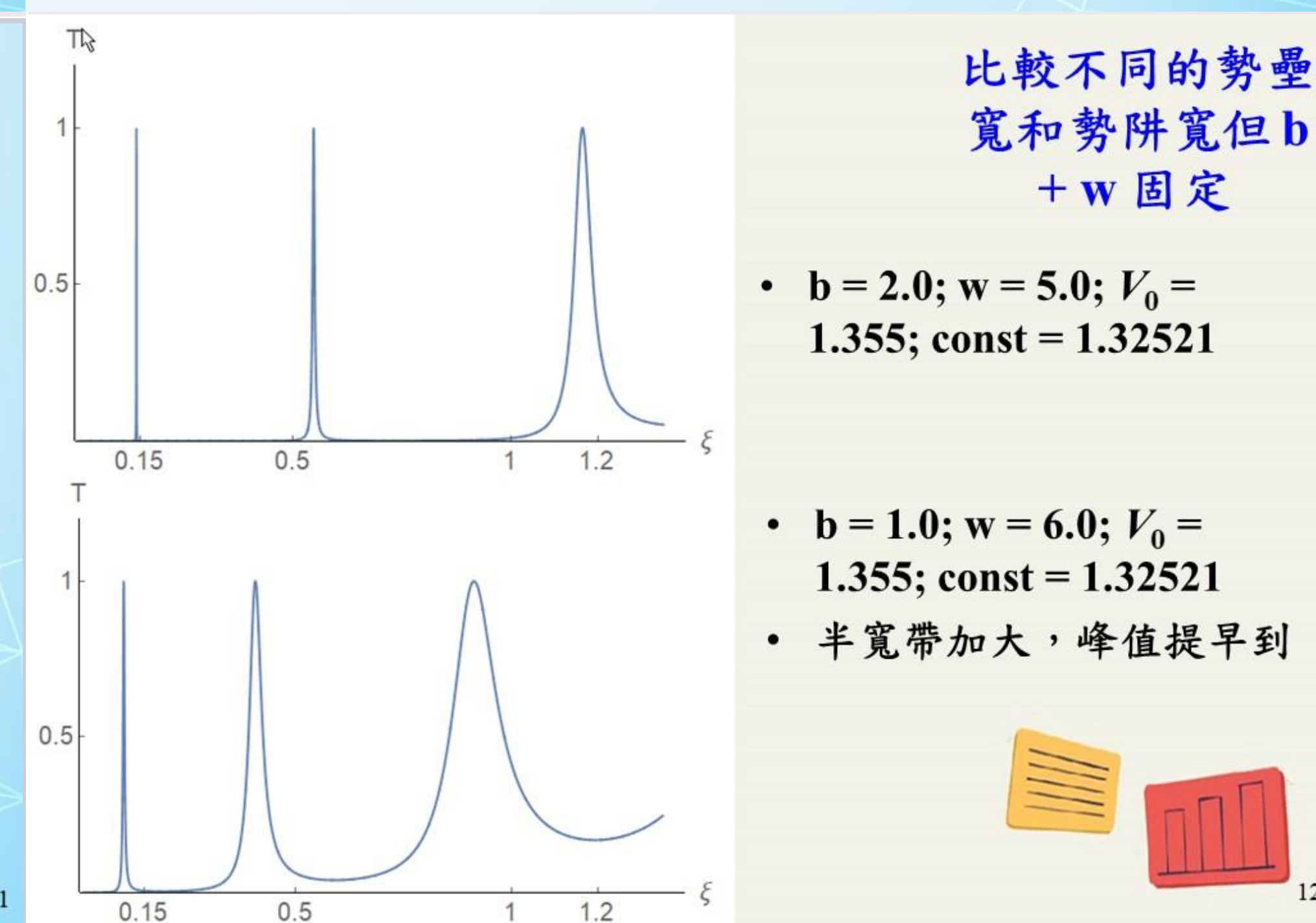
比較不同的勢壘寬和勢阱寬但 b+w 固定

- Export["e:/data/onewell.dat", T]; 輸出資料到某檔案
- ListLinePlot[T, PlotRange -> {{0, 1.4}, {0, 1.2}}]; 畫 x-y 圖，PlotRange 橫、縱座標範圍
- AxesOrigin -> {0, 0}; 圖的起點
- PlotStyle -> Thickness[0.004]; 曲線的粗細
- AxesStyle -> Thickness[0.003]; 軸的粗細
- BaseStyle -> {FontSize -> 13}; 軸文字大小
- AxesLabel -> 軸的名稱
- Ticks -> {{0.15, 0.5, 1, 1.2}, {0.5, 1}}; 軸尺寸標示
- Clear[b1, b2, c1, c2, d1, d2, f1]; 清除變數內容

$b = 2.0; w = 5.0; V_0 = 1.355; \text{const} = 1.32521$

透射係數不是單調的函數，而是在三個能量值下達到峰值，峰值恰好為 1，即電子全部透射，好像一點阻力也沒有。我們把這種現象叫做“共振隧道穿透”，簡稱共振隧穿，是一種重要的物理現象。打開資料檔案查看，3 個峰值的位置分別是 0.140、0.547 和 1.165 eV。

每個峰值都有不同的寬度，能量大的寬度大。在峰值區域之外，透射係數很快下降為幾乎不可覺察的程度，最低的為 10^{-8} 的量級。



比較不同的勢壘寬和勢阱寬但 b+w 固定

比較不同的 V_0 但 b 和 w 相同

參考文獻

$b = 2.0; w = 5.0; V_0 = 1.355; \text{const} = 1.32521$

$b = 3.0; w = 4.0; V_0 = 1.355; \text{const} = 1.32521$

半寬帶變窄，峰值延後到，第三個峰值已經超出 V_0

$b = 2.0; w = 5.0; V_0 = 1.355; \text{const} = 1.32521$

$b = 2.0; w = 5.0; V_0 = 2.000; \text{const} = 1.32521$

半寬帶更窄（銳利），峰值延後到，

- [1] 董健. Mathematica 與大學物理計算 [M]. 清華大學出版社, 2010
- [2] 周勇. 用 Mathematica 繪制分子間相互作用力示意圖 [J]. 中學物理教學參考, 2010(12)
- [3] 于鳳梅, 王克強, 張麟. 運用 Mathematica 軟件輔助大學物理教學 [J]. 中國現代教育裝備, 2011(15)
- [4] 馬軍. Mathematica 交互功能在物理教學中的應用 [J]. 中國現代教育裝備, 2011(21)
- [5] 藍軍. 普通物理實驗中 Mathematica 軟件的應用 [J]. 中國教育技術裝備, 2006(01)
- [6] 柳冠凡, 陳顯盈. Mathematica 軟件在物理極值問題上的應用 [J]. 教師, 2010(15)