

# 势垒中粒子波包的运动

曹丽娜,刘 红

(南京师范大学物理科学与技术学院,江苏 南京 210023)

[摘要] 本文用高斯波包对粒子的运动进行描述,通过数值求解含时薛定谔方程对二维电子气中波包的运动进行研究.通过对不同能量时波包透射性的研究,阐明了其粒子性和波动性.在我们的工作中,波包宽度不同,透射率与能量的关系不同.

[关键词] 薛定谔方程,波包,递推迭代,透射率

[中图分类号] O413.1 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2013)03-0037-05

## Wave Packet Dynamics of Particles in Potential Barriers

Cao Lina, Liu Hong

(School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

**Abstract:** We use Gauss wave packet to describe the dynamics of charged particle in a limited two-dimensional electron gas by sloving time-dependent Schrödinger equation. The particle character and wave character of wave packet with different energy are illustrated by the transmission of wave packet. In the present work, for different wave packet width the transmission shows different relationship with the input energy.

**Key words:** Schrödinger equation, wave packet, recursive iterative, transmission

在量子力学中,微观粒子的运动状态用波函数进行描述,薛定谔方程决定粒子的状态变化.通过求解含时薛定谔方程,研究在一定条件下有限区域内波包的运动是一个很重要的课题,因为通过求解含时薛定谔方程,可以准确描述粒子状态随时间的演化,更准确地分析势场、边界和尺寸对粒子运动演化的影响,并且可以模拟任意尺寸结构和势场下的粒子运动,能更好地与实验结果相比较,对实际应用中纳米尺寸器件的设计有一定的指导作用.近年来采用含时薛定谔方程对波包运动的研究已经有很多的研究报道, Kh Yu RaKhimov<sup>[1]</sup>等人研究了存在势场和磁场的有限区域的二维电子气内薛定谔粒子的波包散射,并进一步模拟计算了石墨烯中 Dirac 粒子的波包运动. Andre Chaves 等人<sup>[2]</sup>研究了有限宽度的半导体量子环内高斯波包随时间的演化;他们也采用紧束缚模型下的薛定谔方程研究了石墨烯中的波包运动<sup>[3]</sup>. G. M. Maksimova 等人<sup>[4]</sup>利用高斯波包对单层石墨烯中的带电粒子从理论分析和数值求解上进行研究. B. Szafran 等人<sup>[5]</sup>研究了在存在均匀外磁场情况下,电子高斯波包通过量子环的运动;他们也研究了电子波包在三维半导体量子环内 Aharonov-Bohm 效应下洛伦兹力诱导的不对称性<sup>[6]</sup>.

在有限尺寸的实空间中,对复杂且对称性低的哈密顿量的含时薛定谔方程的数值求解方法有多种,如差分法、矩阵法、分段微扰法、级数展开法和格林函数法等,其中利用分裂算符与差分相结合的方法最为常用<sup>[4]</sup>,因其具有简单高效性.邵和助<sup>[7]</sup>通过该方法很好地处理了一维含时薛定谔方程.由于在实际的材料中不存在绝对的一维,所以我们研究了有限尺寸下的二维 Klein 隧穿效应<sup>[8]</sup>.粒子波包的运动有别于经典粒子,当经典粒子遇到高于自身能量的势垒时,将完全被反射回去,当遇到低于自身能量的势垒时,将透射过去.而微观粒子波包能够透射入高于自身能量的高势垒区,即所谓的 Klein 隧穿效应.在利用该方法求解过程中,一般通过二阶有限差分得到三对角矩阵后利用 LU 分解<sup>[9,10]</sup>方法求解,但当运算尺寸越大、格点

收稿日期:2013-03-13.  
基金项目:国家自然科学基金(10947004)、江苏省自然科学基金(BK2008427)、高校博士学位点专项基金(200803190004).  
通讯联系人:刘 红,副教授,研究方向:低维凝聚态物理理论. E-mail: liuhong3@ njnu. edu. cn

数越多的情况下,LU 分解所占用的计算机的内存越大,运算时间越长,所以在本文中对求解过程进行改进,采用递推迭代的方法进行求解.

本文研究的具体工作如下:第一部分主要对所运用的理论方法进行说明;第二部分研究了不同的势垒高度下,波包进入势垒区的概率与波包能量和波包宽度的变化关系.第三部对本文的研究内容进行总结.

# 1 分裂算符方法在含时薛定谔方程中的应用

二维情况下,势场  $V$  不显含时间,则其薛定谔方程的形式如下:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, y, t) = \hat{H} \varphi(x, y, t), \quad (1)$$

波函数随着时间的演化可以表达为

$$\varphi(x, y, t_{n+1}) = \exp\left(-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{H}\right) \varphi(x, y, t_n), \quad (2)$$

其中  $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x, y)$ ,  $\exp\left(-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{H}\right)$  称为时间演化算符. 求解方程(2),应用分裂时间演化算符方法<sup>[11]</sup>:

$$\exp\left(-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{H}\right) = \exp\left(-i \frac{\Delta t}{2\hbar} V(x, y)\right) \exp\left[i \frac{\Delta t \hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right] \exp\left(-i \frac{\Delta t}{2\hbar} V(x, y)\right) + O(\Delta t^3), \quad (3)$$

并采用 Cayley 形式<sup>[11]</sup>:

$$\exp\left(i \frac{\Delta t \hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}\right) = \frac{1 + i \frac{\Delta t \hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}}{1 - i \frac{\Delta t \hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}}, \quad (4)$$

通过引入辅助函数  $\xi(x, y, t_{n+1})$ 、 $\phi(x, y, t_{n+1})$  和  $\eta(x, y, t_{n+1})$ ,对薛定谔方程进行分步求解<sup>[11]</sup>,表述如下:

$$\xi(x, y, t_{n+1}) = \exp\left(-i \frac{\Delta t}{2\hbar} V(x, y)\right) \varphi(x, y, t_n), \quad (5a)$$

$$\left(1 - i \frac{\Delta t \hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \phi(x, y, t_{n+1}) = \left(1 + i \frac{\Delta t \hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \xi(x, y, t_{n+1}), \quad (5b)$$

$$\left(1 - i \frac{\Delta t \hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \eta(x, y, t_{n+1}) = \left(1 + i \frac{\Delta t \hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \phi(x, y, t_{n+1}), \quad (5c)$$

$$\varphi(x, y, t_{n+1}) = \exp\left(-i \frac{\Delta t}{2\hbar} V(x, y)\right) \eta(x, y, t_{n+1}), \quad (5d)$$

计算过程中可以采用小的时间步长和空间步长,并且满足  $\Delta t < \Delta x^2$ <sup>[11]</sup>.

运算过程中我们发现,(5b)、(5c)即  $x$  方向、 $y$  方向的运算过程是相对独立的,在(5a)求得  $\xi(x, y, t_{n+1})$ 后,对于(5b)有:

$$-D\phi_{i+1} + (1+2D)\phi_i - D\phi_{i-1} = (1-2D)\xi_i + D\xi_{i+1} + D\xi_{i-1}, \quad (6)$$

其中  $B = i \frac{\Delta t \hbar}{4m (\Delta y)^2}$ ,  $D = 1 + i \frac{\Delta t \hbar}{2m (\Delta y)^2}$ ,  $\xi_{i-1}$ 、 $\xi_i$ 、 $\xi_{i+1}$  分别代表  $\xi(x_i, y_{j-1}, t_{n+1})$ 、 $\xi(x_i, y_j, t_{n+1})$  和  $\xi(x_i, y_{j+1}, t_{n+1})$ ,下述符号  $C_j$ 、 $U_j$ 、 $\phi_j$ 、 $k_j$ 、 $\eta_j$  同理于  $\xi_i$  的表示. 可以看出在求解过程中,式(6)等号右侧可直接计算出,令其等于  $C_j$ ,式(6)等号左侧的系数若表示为三对角矩阵形式,则矩阵中零元很多,采用 LU 分解必然会做过多无用的计算,所以想到利用递推迭代进行处理,令初始  $U_n = D$ ,  $K_n = \frac{\phi_n}{D}$ ,具体如下:

$$U_j = D - \frac{B^2}{U_{j+1}}, \quad (7)$$

$$K_j = \frac{C_j + BK_{j+1}}{U_j}, \quad (8)$$

$$\phi_j = K_j + \frac{B}{K_j} \cdot \phi_{j-1}, \quad (9)$$

经过上述过程,最后得到  $\phi_1$ ,将  $\phi_1$  反向代入式(9)后可求出任意  $\phi_j$ ,即可求出  $\phi(x, y, t_{n+1})$ . 同理,利用

(5c)可求出任意  $\eta(x, y, t_{n+1})$ . 我们采用上述递推迭代公式研究波包透射到势垒区的概率与能量的关系, 所得结果与采用 LU 分解方法的计算结果一致, 说明我们的递推迭代公式和程序的正确性. 通过比较, 我们发现, 采用递推迭代方法后, 对计算机内存占用很小, 运算非常快, 并能对更大的二维尺寸结构进行计算模拟.

在本文中初始波函数采用高斯波包的形式<sup>[1]</sup>如下:

$$\varphi(x, y, t_0) = \frac{1}{d\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2d^2} + i\mathbf{k}^0 \cdot \mathbf{r} \right], \quad (10)$$

$d$  为波包宽度,  $\mathbf{k}^0$  为波矢, 其与粒子的能量有关, 由  $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}$ ,  $E = \frac{\mathbf{P}^2}{2m}$ , 得  $k^0 = |\mathbf{k}^0| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , 有  $k_x^0 = k^0 \sin\theta$ ,  $k_y^0 = k^0 \cos\theta$ ,  $\theta$  是粒子射入方向与  $y$  方向的夹角. 在本文中均采用  $\theta=0$  进行运算. 本文以 GaAs 的二维电子气中单个粒子的参数为例进行研究, 其有效质量为电子的 0.067 倍, 用高斯波包对其进行描述.

本文具体研究的有限区域内的阶梯势垒不随  $x$  值改变,  $x=80 \text{ \AA}$ , 对于  $y$  方向而言, 以  $y/2$  为分界线, 其上部分  $V$  为常量, 其下部分  $V=0$ , 波包初始中心位于  $(x/2, y/4)$  处. 为避免上下边界反射造成的人为干涉, 在本文中, 我们将  $y$  方向的尺寸取足够大, 所以当进入势垒区的波包的概率第一次达到最大值时, 能准确地反映波包透射率与波包能量和势垒高度的关系.

## 2 势垒区内的波包透射概率

首先我们研究了  $y=1800 \text{ \AA}$ , 宽度分别为  $d=10 \text{ \AA}$ ,  $d=90 \text{ \AA}$  的波包在  $V=0.50 \text{ eV}$  的情况下, 能量不同时其进入势垒区的概率随时间的变化, 分别取波包能量为  $E=0.01 \text{ eV}$ ,  $E=0.50 \text{ eV}$ ,  $E=1.00 \text{ eV}$ , 改变波包的宽度, 如图 1(a)、(b) 所示.

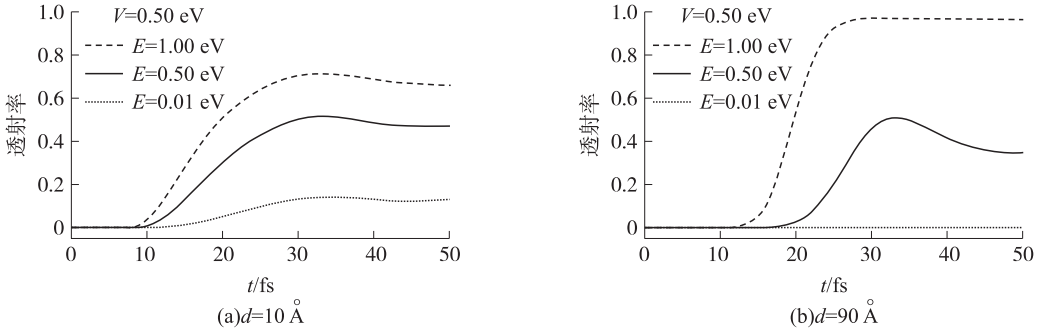


图 1 不同能量下势垒区的透射率随时间的变化曲线

Fig. 1 The transmission with different energies varies with time under two different wave packet widths

通过图 1 可以看出, 当能量远低于势垒高度时, 宽度小的波包进入势垒区的概率更高, 当能量略高于势垒高度时, 宽度大的波包进入势垒区的概率更大且接近于 1, 而宽度小的波包进入的概率低于 1. 从以上两点可以看出, 波包宽度的大小可以用来表示粒子的波动性和粒子性的特征, 宽度小的波包波动性更强, 宽度大的波包粒子性更明显. 通过图 1 还可以看出, 无论波包宽度大或小, 波包进入势垒区的概率随波包能量的增大而增加; 波包进入势垒区的概率随时间的演化均为先增加再降低. 这些现象均应与粒子的波动性和粒子性有关, 即与波包宽度有关.

为了更清楚地知道波包宽度对波包进入势垒区的影响, 接下来在图 1 条件的基础上, 具体研究了势垒高度一定时, 不同能量下, 波包进入势垒区的概率随其宽度的变化关系, 得到结果如图 2 所示.

通过图 2 可以看出, 波包能量远小于势垒能量的条件下, 波包进入势垒的概率随其宽度的增加而降低; 当波包宽度  $d>50 \text{ \AA}$  后, 其进入势垒区的概率接近于 0. 当波包能量高于势垒时, 波包进入势垒区的概率随其宽度的增大而增加; 当波包宽度  $d>50 \text{ \AA}$  后, 其概率接近于 1. 而当波包能量与势垒高度持平时, 波包进入势垒区的概率在  $d=50 \text{ \AA}$  时出现了最大值,  $d<50 \text{ \AA}$  时, 随着波包宽度的增大其进入势垒区的概率增加;  $d>50 \text{ \AA}$  时, 随着波包宽度的减小其进入势垒区的概率降低.

通过图 1 与图 2 对比可以更加明确, 波包在运动过程中有两种因素在同时作用, 一是波动性强弱的影响

响,即波包的自身扩散作用,它是向各个方向进行的;二是波包所具有的能量大小影响.(1)图 1 中无论波包宽度大或小,波包进入势垒区的概率均为先增加再降低,这是因为开始时能量作用表现明显,随着时间增长,波包能量主要克服势垒的阻碍作用,波包自身的扩散作用表现明显,使得进入势垒区的概率减少,所以表现出现一定程度的降低.(2)当波包的能量小于势垒高度的时候,宽度较小的波包仍然有一定的概率进入势垒区,而宽度较大的波包进入势垒区的概率接近于零,这是因为波包宽度较小的情况下,波包的范围相对集中,所以透射性较强,而波包较大时,分布范围较大,粒子性明显,更像是经典粒子,而又由于所具有能量过小所以进入势垒区的概率接近于零.(3)在增大波包能量的情况下,对于宽度大的波包而言,粒子性明显,扩散相对较弱,所以波包能量略高于势垒高度后其进入势垒区的概率接近于 1;对于宽度小的波包,扩散仍然起很大的作用,所以当能量并不是特别大时,也不会像大宽度的波包一样进入势垒区的概率接近于 1,只有当能量足够大时,即使波包宽度较小,但其扩散作用不再明显,则进入势垒区的概率也将接近于 1,详见图 3(a). (4)对波包能量  $E=0.5\text{ eV}$  等于势垒高度时,由于其能量作用与扩散作用相互影响,就会出现一个扩散与能量相互作用下的极值,因为波包宽度较小时扩散作用更加明显,宽度较大的波包能量作用更加明显,见图 2.

基于以上的研究,接下来分析在势垒高度一定时,宽度不同的波包在不同的能量作用下,势垒区域内的波包的透射率的最大值随时间的变化与粒子能量  $E$  的关系,这里取  $y=800\text{ \AA}$  的区域,因为考虑到要研究波包能够进入势垒区的最大概率与波包能量的关系,不必选择过大尺寸. 这里波包宽度  $d=10\text{ \AA}$ ,  $d=200\text{ \AA}$ , 对于采用 4 种不同高度的势垒,其大小分别为  $V_1=0.05\text{ eV}$ ,  $V_2=0.2\text{ eV}$ ,  $V_3=0.5\text{ eV}$ ,  $V_4=0.8\text{ eV}$ . 研究情况如图 3(a)、(b)所示.

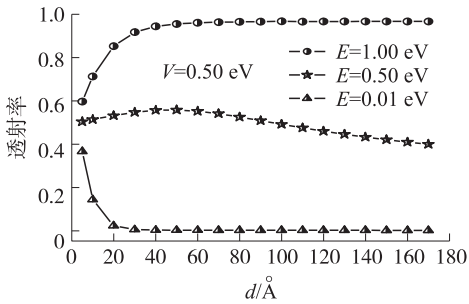


图 2  $V=0.5\text{ eV}$  时,不同的能量下透射率与波包宽度的关系

Fig. 2 The variety of transmission with the wave packet width under  $V=0.5\text{ eV}$  and different energies

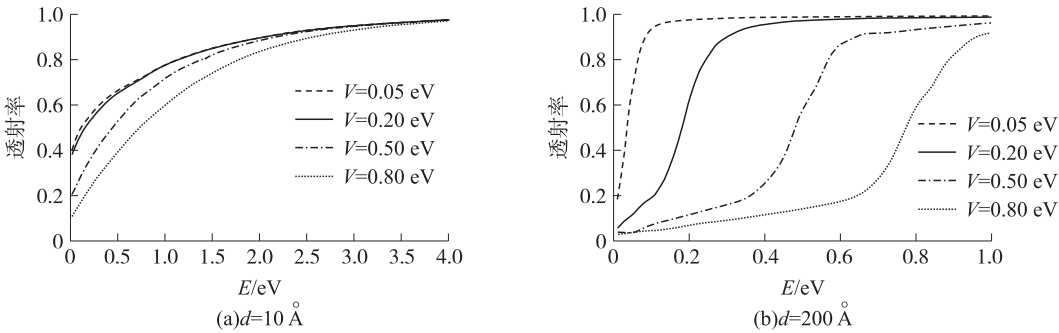


图 3 不同势垒下粒子进入势垒区的总概率与能量的关系图

Fig. 3 Under different height of barrier the total probability in the region of barrier vary with energy

通过图 3(a)、(b)对比可以看出,势垒高度一定时,波包进入势垒区的概率随能量的增大而增加. 波包的能量低于势垒的高度时,比较进入势垒区的概率,宽度较小的波包要大于宽度大的波包;波包能量与势垒高度相同时,其透射率均接近 0.5;波包的能量略高于势垒高度时,宽度大的波包进入势垒区的概率增加的幅度要大于宽度小的波包,宽度大的波包的透射率接近于 1,而宽度小的波包要在能量足够大的情况下才接近于 1,可以看出能量大约为宽度大的波包的 4 倍. 这样的结果并不难理解,主要是因为宽度小的波包除了能量的作用外,自身的扩散作用也是有很大的影响,当能量较小时,扩散起了决定性的作用,所以同等条件下宽度小的波包透射率更大. 而对于能量较高时,波包在能量的作用下透射率增大,但对于小波包而言,扩散作用仍不可忽略,由于扩散作用是向各个方向的,所以导致同等条件下宽度小的波包的透射率比宽度大的波包的透射率小很多,当能量足够大的情况下,波包的自身扩散作用才不再明显,才能使进入势垒区的概率接近于 1. 但无论宽度大或小的波包在能量高于势垒并且时间足够长的条件下,粒子进

入势垒区的概率接近于 1,但仍存在小概率不能进入势垒区,这是因为即使波包的平均能量 $E>V$ 时,波包中仍有小部分能量低于势垒,不能够进入势垒区. 对于图 3 中的曲线转折点意义将在下一步工作中继续研究.

### 3 结论

本文运用分裂算符和有限差分的方法对含时薛定谔方程进行求解,采用递推迭代的方法进行计算,利用其研究了存在势垒的有限区域内,宽度一定的波包在不同能量下进入势垒区的概率随时间的变化关系;势垒高度一定下波包能量不同时进入势垒区的概率与波包宽度的关系;波包宽度一定的波包在不同势垒高度下进入势垒区的概率随波包能量的变化关系等 3 个方面研究并得到一定的规律,并对下一步的研究工作给出了方向.

#### [参考文献]

- [1] Rakhimov K Y, Chaves A, Farias G A, et al. Wavepacket scattering of Dirac and Schrodinger particles on potential and magnetic barriers[J]. Phys: Condens Matter, 2011, 23: 275 801(1-16).
- [2] Chave A, Farias G A, Peeters F M, et al. Wave packet dynamics in semiconductor quantum rings of finite width[J]. Physical Review B, 2009, 80: 125 331(1-14).
- [3] Chaves A, Covaci L, Rakhimov Kh Yu, et al. Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene[J]. Physical Review B, 2010, 82: 205 430(1-11).
- [4] Maksimova G M, Demikhovskii V Ya, Frolova E V. Wave packet dynamics in a monolayer graphene[J]. Physical Review B, 2008, 78: 235 321(1-7).
- [5] Szafran B, Peeters F M. Time-dependent simulations of electron transport through a quantum ring: effect of the Lorentz force[J]. Physical Review B, 2005, 72: 165 301(1-8).
- [6] Szafran B, Peerers F M. Lorenta-force-induced asymmetry in the Aharonov-Bohm effect in a three-terminal semiconductor quantum ring[J]. Europhy Letter, 2005, 70(6): 810-816.
- [7] 邵和助. Schorodinger 方程的数值解法上[D]. 上海: 上海大学理学院物理系, 2010: 109-110.
- [8] 曾谨言. 量子力学教程[M]. 2 版. 北京: 科学教育出版社, 2008: 36-40.
- [9] 纪坤, 陈建平. LU 分解分块算法的研究与实现[J]. 南京师大学报: 自然科学版(计算机专辑), 2008, 31: 55-60.
- [10] 陈建平. LU 分解递归算法的研究[J]. 计算机科学, 2004, 31(6): 141-142.
- [11] Watanabe N, Tsukada M. Fast and stable method for simulating quantum electron dynamics[J]. Phys Rev E, 2000, 62: 2 914-2 923.

[责任编辑: 顾晓天]