

# 基于 Kwant 的量子隧穿数值模拟

罗俊宇 何璟

湖北师范大学 湖北黄石 435000

**摘要:** 量子隧穿效应是量子力学中有趣的现象,它描述了入射粒子能量小于势垒强度时穿过势垒的现象。在本研究中,我们采用数值模拟方法,基于一维紧束缚模型,对一维方势垒模型以及其他不同形状的势垒进行了隧穿概率的计算。首先,我们证明了对于单个方势垒情况,散射矩阵方法计算出的散射概率和教材上结果一致。基于此,我们详细研究了单个方势垒的宽度和高度对隧穿概率的影响。随后,我们还计算了不同势垒以及下的隧穿系数。本研究的结果不仅有利于理解量子隧穿效应,而且为设计新型量子器件提供理论支持。

**关键词:** kwant 包; 量子隧穿; 紧束缚模型; 数值模拟

## 引言

量子隧穿效应在科学技术的多个领域扮演着关键角色。在半导体技术中,隧穿二极管利用这一效应实现了快速开关功能;量子点系统中,隧穿对电子输运特性产生显著影响;在核物理领域,隧穿机制解释了特定放射性衰变过程;此外,它也是量子计算和量子信息处理领域的关键要素<sup>[1]</sup>。

然而,在应用中关于量子隧穿效应也同样面临挑战。在量子点系统中,精确控制电子隧穿行为极具挑战性,且对量子点的尺寸和形状极为敏感。在核物理中,放射性衰变过程的预测和隧穿时间的测量存在不确定性。集成电路的发展中,晶体管尺寸的不断减小导致栅极控制能力下降,增加了由量子隧穿引起的漏电流,这不仅降低了芯片性能,也影响了能效。为抑制隧穿效应,需要开发更高质量的绝缘材料和更精细的制造工艺,这无疑增加了技术难度和成本。接下来,本研究通过一维紧束缚模型,利用量子输运程序包 kwant 进行数值模拟,探索量子隧穿系数与势垒宽度、高度等参数的关系并计算一系列不同势垒下的隧穿系数<sup>[2]</sup>。

## 1 理论基础与原理

本实验主要是通过 kwant 来数值模拟量子隧穿现象,研究以下几个方面: 1. 一维有限方势垒的宽度,高度对于量子隧穿效应的影响并计算隧穿概率。 2. 计算一维不同种类的势垒的隧穿概率。 3. 利用数值模拟的图像分析各种不同的势垒的隧穿概率以及干涉现象。以一维方势垒情况为例:我们设势垒区域为:  $[0, L]$  势垒高度为  $U$ ,我们先考虑电子能量大于势垒高度的情况,下面的 A,B,F,G,C 如图 (1) a。

在一维方势垒情况中,定态薛定谔方程形式:

势垒内部为: (1)

势垒外部为: (2)

据此我们可以解得: 势垒外部的解为

$$\varphi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0) \quad (3)$$

$$\varphi(x) = Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} \quad (x > L) \quad \text{其中 } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (4)$$

势垒内部的解为

$$\varphi(x) = Fe^{ik_2x} + Ge^{-ik_2x} \quad \text{其中 } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}} \quad (5)$$

假设波从左边入射则  $D = 0$

由于波函数及其一阶导数的连续性,我们可以得到:

$$A + B = F + G \quad (6)$$

$$Fe^{ik_2L} + Ge^{-ik_2L} = Ce^{ik_1L} \quad (7)$$

$$k_1A - k_1B = k_2F - k_2G \quad (8)$$

$$k_2Fe^{ik_2L} - k_2Ge^{-ik_2L} = k_1Ce^{ik_1L} \quad (9)$$

我们透射概率表达式:

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (10)$$

反射概率表达式:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (11)$$

此时我们可以得到:

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2 k_2 L + 4k_1^2 k_2^2} \quad (12)$$

$$R = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 L}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 L + 4k_1^2 k_2^2} - 1 - T \quad (13)$$

同样的，在  $E < U$  时，我们只需要令  $k_2 = ik_3$ ，其中

$$k_3 = \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}}$$
 继续使用上面的方法消元可以得到：

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2 k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2) \sin^2 k_3 L + 4k_1^2 k_3^2} \quad (14)$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 - T \quad (15)$$

除了传统教科书中使用的消元方法得到透射与反射概率外，我们还可以使用在量子输运中的散射矩阵方法来计算透射概率和反射概率，下面我们将展示这种方法。

对于上述的方势垒而言，我们同样先考虑电子能量大于势垒高度的情况：此时存在两个散射矩阵：

$$S_1 = \begin{pmatrix} r_1 & t_1' \\ t_1 & r_1' \end{pmatrix}, S_2 = \begin{pmatrix} r_2 & t_2' \\ t_2 & r_2' \end{pmatrix} \quad (16)$$

其中对于出射波与入射波振幅而言  $a = s1I, o2 = s2I2$ ，其中  $O$  为界面上的出射波振幅的向量， $I$  为界面上的入射波振幅的向量，其中  $I$  与  $O$  的形式为：

$$I = \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}, O = \begin{pmatrix} B \\ F \\ C \end{pmatrix} \quad (17), I_2 = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}, O_2 = \begin{pmatrix} G \\ C \end{pmatrix} \quad (18)$$

根据前面我们可以得到散射矩阵的具体形式为：

$$S_1 = \begin{pmatrix} k_1 - k_2 & 2k_2 \\ k_1 + k_2 & k_1 + k_2 \\ 2k_1 & k_2 - k_1 \\ k_1 + k_2 & k_2 + k_1 \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$S_2 = \begin{pmatrix} (k_2 - k_1)e^{2ik_1 L} & 0 \\ k_1 + k_2 & 0 \\ 2k_2 e^{i(k_2 - k_1)L} & 0 \\ k_1 + k_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (20)$$

通过矩阵乘法我们可以得到总的散射矩阵，现在我们可以得到：

$$T = |t|^2 (1 - |r|^2)^{-1} |t|^2 \quad (21)$$

写出具体形式可以得到：

$$T = \frac{4k_1 k_2 e^{i(k_1 - k_2)L}}{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2 e^{2ik_2 L}} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2 k_2 L + 4k_1^2 k_2^2} \quad (22)$$

可以发现散射矩阵方法可以得到和传统消元法一样的结果。同样的，在  $E < U$  时，我们只需要令  $k_2 = ik_3$ ，

其中  $k_3 = \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}}$  仿照上述散射矩阵的方法可以得到与消元法一样的结果。

现在我们要利用 kwant 并使用紧束缚模型和散射矩阵方法来计算透射概率，先简要介绍一下一维紧束缚模型，紧束

缚模型 (Tight-binding model) 是固体物理学中用于近似描述电子在周期性晶格势场中量子行为的模型。该模型通过将电子的波函数视为主要局域在晶格的特定格点上，从而简化了对电子行为的量子力学描述<sup>[3]</sup>。紧束缚模型的核心理论框架包括：

1.1 波函数的局域化：电子的波函数  $\psi(a)$  被近似为在晶格的每个格点  $i$  上具有显著幅度，而在格点之间则迅速衰减至零。

1.2 散化的量子态：电子的量子态被离散化，每个格点  $i$  都有一个与之相关的量子态  $|\varphi_i\rangle$ 。

1.3 Onsite 能量：每个格点  $i$  都有一个 onsite 能量，代表了电子在该格点上的局域能量。

1.4 跃迁项：电子可以在相邻格点之间跃迁，跃迁能量  $t$  描述了最近邻跃迁的能量。现在我们在—维情况下离散化哈密顿量到紧束缚模型：

哈密顿算符：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (23)$$

接下来我们利用中心差分写出离散化二阶导数算符：

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \Big|_{x=x_i} = \frac{1}{a^2} (\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) \quad (24)$$

代入哈密顿算符形式我们得到：

$$\hat{H} = \sum_i [(V(x_i) + 2t)|\psi_i\rangle\langle\psi_i| - t(|\psi_{i+1}\rangle\langle\psi_i| + |\psi_i\rangle\langle\psi_{i+1}|)] \quad (25)$$

其中  $t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$  所以此时 onsite 能为  $2t$ , hopping 能为  $t$ , 势垒能为  $v(x_i)$ 。

现在我们可以利用 kwant 进行编程，计算透射概率和绘图。步骤如下：

步骤 1: 导入库

- import kwant, numpy as np, matplotlib.pyplot

- 引入进行量子模拟的核心库 kwant，用于数值计算的 numpy，以及数据可视化的 matplotlib.pyplot。这些工具是构建和分析量子系统的基础。

步骤 2: 设置系统参数

定义晶格常数  $a$ 、跃迁积分、系统尺寸、势垒的高度、宽度和数量，这些参数是构建量子系统模型的关键。晶格常数  $a$  设定了晶格的间距，跃迁积分  $t$  决定了相邻格点间的耦合强度，而势垒参数则决定了隧穿障碍的特性。

步骤 3: 创建晶格结构

构建—维晶格结构，这是量子粒子移动的周期性势场。

晶格为粒子提供了有序的潜在能量环境，是量子力学中粒子波动性的支撑结构。

#### 步骤 4: 构建哈密顿量

利用 kwant.Builder 构建量子系统的哈密顿量，描述粒子在晶格中的动力学。局域能量和跃迁项定义了粒子的局域化行为和相邻格点间的量子耦合。在特定区域增加势能，形成势垒，模拟了量子粒子在传输过程中可能遇到的能障。

#### 步骤 5: 创建与连接引线

创建引线，它们作为电子的注入和收集通道，模拟实际量子器件中的电极。连接引线至主系统，确保电子可以流入和流出系统，完成量子运输的闭环。

#### 步骤 6: 可视化系统布局

使用 kwant.plot(syst) 绘制系统的结构图，直观展示量子系统的布局，包括晶格、势垒和引线的位置。这一步骤帮助我们理解系统的几何结构和各组成部分的空间排布。

#### 步骤 7: 完成系统构建

结束系统构建过程，确保所有参数正确设置，完成量子系统的最终配置。这一步骤标志着系统准备就绪，可以开始进行数值计算。

#### 步骤 8: 计算散射矩阵与透射概率

设定能量范围，使用 kwant.smatrix 在一系列能量下计算粒子透射概率，这是量子隧穿效应的关键量化指标，反映了粒子穿透势垒的能力。通过分析不同能量下的透射概率，可以揭示势垒参数对隧穿过程的影响。

#### 步骤 9: 数据绘图与分析

收集能量和对应的透射概率数据，使用 matplotlib 进行数据绘图。通过图形展示不同能量下量子隧穿效应的特性，分析势垒参数对隧穿过程的影响。图形化结果帮助研究者直观理解量子隧穿现象，并为进一步的理论研究和器件设计提供数据支持。

## 2. 结果展示与分析

单个矩形势垒的情况：我们观察到，当电子能量小于势垒高度时，透射概率不为 0，这体现了量子隧穿现象，势垒宽度增加导致透射概率降低，这与量子隧穿概率随势垒宽度增加而减少的理论相符。振荡现象在所有宽度下均出现，它是干涉现象的体现，但随着势垒宽度的增加，振荡幅度增加。宽度较小时振荡不明显，这可以用公式 (12) 解释， $\sin^2(k_2L)$  这一项决定了会有振荡的产生，但是宽度很小时该项

会趋于 0，导致振荡几乎消失，而宽度增加会导致振荡幅度的增大。势垒高度从 0.1 增加到 0.3 时，透射概率下降。这表明势垒的高度是影响隧穿概率的关键因素。在  $(E-U)/U$  接近 0 时，透射概率开始出现振荡现象。随着势垒高度的增加，振荡幅度增加，这是因为  $k_2$  减小的原因，同样由方程 (12) 可以得到  $k_2$  减小振幅会增大<sup>[4]</sup>。

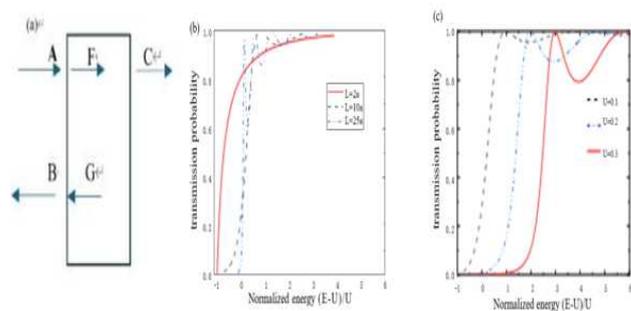


图 1 (a) 展示了波从左边入射的各波方向 (b),(c) 展示了矩形势垒宽度和高度变化所引起的电子能量与透射概率之间图像的变化。(b)L 为宽度，高度为 0.1，(c) 宽度为 10a，高度为 U。

出现的干涉现象可以以法布里 - 珀罗干涉来类比，法布里 - 珀罗干涉仪是一种光学干涉装置，由两个平行的反射面（通常是部分反射镜）构成，它们之间的空间被称为干涉腔。当光波入射到干涉仪时一部分光会在两个反射面之间来回反射，形成多个光程差不同的光波。这些光波之间会发生干涉，根据它们的相位关系，某些波长的光会被增强（ constructive interference），而另一些波长的光会被抵消（ destructive interference）在量子隧穿中，势垒可以类比为法布里 - 珀罗干涉仪中的两个反射面，粒子的波函数在势垒两侧的反射和透射类似于光波在反射面之间的行为。在量子隧穿中，当粒子的能量与势垒的参数（如宽度和高度）匹配时，可以观察到透射概率的极大值，这与法布里 - 珀罗干涉仪中的共振条件类似。量子隧穿中粒子的透射和反射率取决于势垒的参数和粒子的能量，类似于光波在法布里 - 珀罗干涉仪中的透射和反射率取决于干涉腔的长度、反射面的反射系数和入射光的参数<sup>[5]</sup>。

多矩形势垒情况：图 (b)、图 (c) 比较了单个势垒、双势垒和五个势垒情况下的透射系数。图 (b) 展示了两个势垒三个不同势垒间距对透射概率的影响。势垒间距的增加导致共振峰发生偏移，共振能量随势垒间距的增加而降低。随着势垒间距的增加，共振峰变宽，表明共振条件对能量的敏感

度降低，这与波函数在两个势垒间的干涉模式有关。图像显示，随着势垒间距的增加，透射概率的振荡幅度有所变化。较小的势垒间距产生了更显著的振荡，这与量子干涉效应的强度有关。图 (c) 显示随着势垒数量的增加，可以观察到透射概率整体下降，且共振峰变得更加复杂。在多势垒系统中，出现了多个共振峰，这表明随着势垒数量的增加，系统可以支持多种共振模式。在某些能量下，随着势垒数量的增加，透射概率显著降低，这表明多个势垒对粒子的透射构成了更大的阻碍。

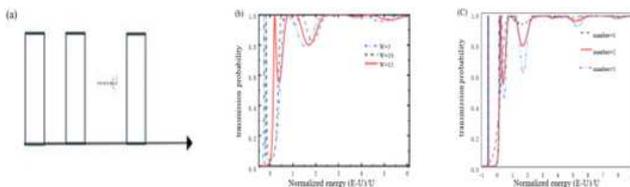


图 (2) (a) 是多矩形势垒展示，其中高为 0.1，宽为  $10a$ 。(b),(c) 表示矩形势垒数目与间距变化对透射概率的影响。(b) 展示了高度为 0.1，宽度为  $10a$  的两个矩形势垒的势垒间距  $W$  对于透射概率的影响。(c) 展示了高度为 0.1，宽度为  $10a$ ，势垒间距为  $10a$  的矩形势垒数目变化对透射概率的影响。

梯形势垒情况：图像 (b) 显示随着斜率  $k$  的增加，共振峰的位置发生变化。具体来说，斜率的增加导致共振峰向更高的能量移动，这意味着为了达到共振条件，需要更高的入射能量。斜率的增加也影响共振峰的宽度，峰宽变窄表明在更高斜率下，能量的选择性增强，即在特定的能量间隔内，隧穿概率显著增加。

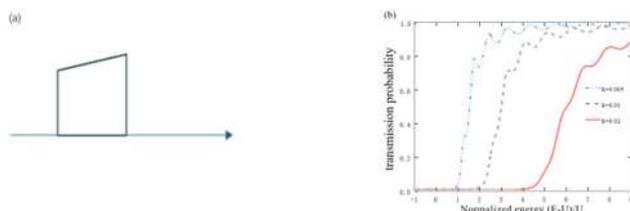


图 3 (a) 是梯形势垒展示，势垒斜线部分形状为  $y=kx+b$ ，底部宽度为  $30a$ 。(b) 显示了底部宽度为  $30a$  斜率  $k$  不同的梯形势垒对于透射概率的影响。

抛物线势垒情况：在能量  $(E-U)/U$  轴上，图 (b) 显示随着势垒宽度  $W$  的增加，共振峰的位置向左移动（即向较低的归一化能量方向），表明较宽的势垒需要较低的入射能量达到共振条件，共振峰的宽度随着势垒宽度的减小而变宽，这表明在较宽的势垒中，更少的能量范围可以支持有效的

共振隧穿。透射概率的极小值随着势垒宽度的增加而降低，这表明隧穿概率随着势垒宽度的增加而减少。在不同的宽度下，透射概率显示出不同的振荡模式。较宽的势垒导致振荡幅度减小，这可能与波函数在势垒中的干涉效应有关。势垒宽度的增加导致量子隧穿的整体概率降低，但提供了更宽的能量窗口来观察量子隧穿现象。图 (c) 显示随着势垒高度  $U$  的增加，降低了量子隧穿概率，共振峰的位置向较高的能量方向移动，这表明达到共振所需的入射能量随着势垒高度的增加而增加。共振峰的宽度随着势垒高度的增加而变窄，显示出能量选择性的增加，即在特定的能量范围内隧穿概率显著增加透射系数的最大值随着势垒高度的增加而显著降低，表明高势垒对量子隧穿构成了更大的障碍。透射概率的振荡模式随着势垒高度的增加而变得更加复杂，显示出不同高度下量子干涉效应的差异。

### 3. 总结

论文首先验证了散射矩阵方法与传统方法在单个势垒情况下得到的透射概率的一致性，并进一步探讨了势垒宽度和高度对隧穿概率的影响。接着研究了多势垒的情况，随着势垒数量的增加，整体透射概率下降，共振峰变得更加复杂，表明系统可以支持多种共振模式。势垒数量的增加导致共振峰显著降低，表明多个势垒对粒子的透射构成了更大的阻碍。势垒间距的增加导致共振峰发生偏移，共振能量随势垒间距的增加而降低。共振峰变宽，表明共振条件对能量的敏感度降低，这与波函数在两个势垒间的干涉模式有关。论文还研究了梯形势垒和抛物线势垒对量子隧穿概率的影响，发现势垒的形状变化对共振峰的位置、宽度以及透射系数的极大值都有显著影响。

### 参考文献：

- [1] 董婧. 非厄米二能级系统中的量子干涉 [D]. 西北师范大学, 2024.
- [2] 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(01):15-18+55.
- [3] 廖文良, 王敏帅. 量子隧穿效应及其在波包隧穿中的数值计算 [J]. 白城师范学院学报, 2021,35(05):7-14.
- [4] 杨军, 陈磊, 陈致立, 等. 非对称方势垒量子隧穿研究及其数值模拟 [J]. 大学物理, 2011,30(10):7-10+29.
- [5] 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,(07):6-8+11.