图1 含半表面裂纹的不同条状压电介质中的集中力

Fig.1 A force near a subsurface crack in a thin plate

它们仅是 x 和 y 的函数，有 $w=w(x,y)$，$\varphi=\varphi(x,y)$，控制方程为

$$\begin{cases} c_{44}\nabla^2 w+e_{15}\nabla^2\varphi=0, \\ e_{15}\nabla^2 zw-\kappa_{11}\nabla^2\varphi=0, \end{cases} \tag{1}$$

这里 $\nabla^2=\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}$ 是二维的拉普拉斯算子，c_{44}，e_{15} 和 κ_{11} 分别为材料的弹性、压电和介电常数。因为 $c_{44}\kappa_{11}+e_{15}^2\neq 0$，由方程(1)可得：

$$\nabla^2 w=0,\nabla^2\varphi=0。\tag{2}$$

面外的应力 σ_{zk} 和面内的电位移 $D_k(k=x,y)$ 分别用 w 和 φ 表示，

$$\sigma_{zk}=c_{44}\frac{\partial w}{\partial k}+e_{15}\frac{\partial\varphi}{\partial k},D_k=e_{15}\frac{\partial w}{\partial k}-\kappa_{11}\frac{\partial\varphi}{\partial k}。\tag{3}$$

设 $\boldsymbol{u}=[w,\varphi]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{t}_k=[\sigma_{zk},D_k]^{\mathrm{T}}$，设材料常数矩阵 $\boldsymbol{C}=\begin{pmatrix} c_{44} & e_{15} \\ e_{15} & -\kappa_{11}\end{pmatrix}$，由方程(2)和(3)有

$$\nabla^2\boldsymbol{u}=0。\tag{4}$$

为了求解方程(4)，由复变函数原理可知，$\boldsymbol{u}$ 可以取为任意解析函数的虚部

$$\boldsymbol{u}(x,y)=\mathrm{Im}[f_w(z),f_\varphi(z)]^{\mathrm{T}}=\mathrm{Im}\boldsymbol{f}(z)。\tag{5}$$

令 $\boldsymbol{t}_k=\boldsymbol{C}\dfrac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial k}$，$k=x,y$，将方程(5)代入方程(6)得： (6)

$$\boldsymbol{t}_y+\mathrm{i}\boldsymbol{t}_x=\boldsymbol{C}\boldsymbol{f}'(z)。\tag{7}$$

该问题的边界条件为

界面连续条件： $\boldsymbol{u}_{\mathrm{A}}(x,0^+)=\boldsymbol{u}_{\mathrm{B}}(x,0^-)$，$\boldsymbol{t}_{\mathrm{Ay}}(x,0^+)=\boldsymbol{t}_{\mathrm{By}}(x,0^-)$，$0\leqslant x\leqslant+\infty$，

自由边界条件： $\boldsymbol{t}_{\mathrm{A}x}(x,h)=\boldsymbol{t}_{\mathrm{B}x}(x,-h)=0$，

裂纹边界条件： $\boldsymbol{t}_{\mathrm{Ay}}(x,0^+)=\boldsymbol{t}_{\mathrm{By}}(x,0^-)=0$，$x\leqslant 0$。

2 电弹场

为了解决上述问题，引入保角变换方程[7]

$$\omega=\xi+\mathrm{i}\eta=\sqrt{\exp[\pi(z+h\mathrm{i})/h]+1},$$

这样 z 平面的问题就转化成了 ω 平面的求解问题。ω 平面中的 $A'-F'$ 分别对应于 z 平面的 $A-F$，ω_{d} 点对应 z_{d} 点。如图1b)，由文献[8]可知，

$$f_{\mathrm{A}u}(\omega)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}(A_{\infty u}\ln(\omega-\omega_{\mathrm{d}})+A_{pu}\ln(\omega-\bar{\omega}_{\mathrm{d}})+\widetilde{A}_{\infty u}\ln(\omega+\bar{\omega}_{\mathrm{d}})+\widetilde{A}_{pu}\ln(\omega+\omega_{\mathrm{d}})),\tag{8}$$

$$f_{\mathrm{A}\varphi}(\omega)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}(A_{\infty\varphi}\ln(\omega-\omega_{\mathrm{d}})+A_{p\varphi}\ln(\omega-\bar{\omega}_{\mathrm{d}})+\widetilde{A}_{\infty\varphi}\ln(\omega+\bar{\omega}_{\mathrm{d}})+\widetilde{A}_{p\varphi}\ln(\omega+\omega_{\mathrm{d}})),\tag{9}$$

$$f_{\mathrm{B}u}(\omega)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}[B_{\infty u}\ln(\omega-\omega_{\mathrm{d}})+\widetilde{B}_{\infty u}\ln(\omega+\bar{\omega}_{\mathrm{d}})],\tag{10}$$

$$f_{\mathrm{B}\varphi}(\omega)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}[B_{\infty\varphi}\ln(\omega-\omega_{\mathrm{d}})+\widetilde{B}_{\infty\varphi}\ln(\omega+\bar{\omega}_{\mathrm{d}})],\tag{11}$$

其中系数分别为

$$\boldsymbol{A}_{\infty}=\begin{Bmatrix}A_{\infty u}\\A_{\infty\varphi}\end{Bmatrix}=\frac{1}{[c_{A_{44}}\kappa_{A_{11}}+(e_{A_{15}})^2]}\begin{bmatrix}\kappa_{A_{11}} & e_{A_{15}}\\ e_{A_{15}} & -c_{A_{44}}\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}p\\-q\end{Bmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}_{p}=\begin{Bmatrix}A_{pu}\\A_{p\varphi}\end{Bmatrix}=-(\boldsymbol{C}_{\mathrm{B}}+\boldsymbol{C}_{\mathrm{A}})^{-1}(\boldsymbol{C}_{\mathrm{B}}-\boldsymbol{C}_{\mathrm{A}})\begin{Bmatrix}A_{\infty u}\\A_{\infty\varphi}\end{Bmatrix},$$

$$\boldsymbol{B}_{p}=\begin{Bmatrix}A_{\infty u}\\A_{\infty\varphi}\end{Bmatrix}=[I-(\boldsymbol{C}_{\mathrm{B}}+\boldsymbol{C}_{\mathrm{A}})^{-1}(\boldsymbol{C}_{\mathrm{B}}-\boldsymbol{C}_{\mathrm{A}})]\begin{Bmatrix}A_{\infty u}\\A_{\infty\varphi}\end{Bmatrix},$$

$$\widetilde{\boldsymbol{A}}_{\infty}=\begin{Bmatrix}\widetilde{A}_{\infty u}\\\widetilde{A}_{\infty\varphi}\end{Bmatrix}=\frac{1}{c_{A_{44}}}\begin{bmatrix}1 & 2e_{A_{15}}\\ 0 & -c_{A_{44}}\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}A_{\infty u}\\A_{\infty\varphi}\end{Bmatrix},$$

$$\widetilde{\boldsymbol{A}}_{p}=\begin{Bmatrix}\widetilde{A}_{pu}\\\widetilde{A}_{p\varphi}\end{Bmatrix}=\frac{1}{c_{A_{44}}}\begin{bmatrix}1 & 2e_{A_{15}}\\ 0 & -c_{A_{44}}\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}A_{pu}\\A_{p\varphi}\end{Bmatrix},$$

$$\widetilde{\boldsymbol{B}}_{\infty}=\begin{Bmatrix}\widetilde{B}_{\infty u}\\\widetilde{B}_{\infty\varphi}\end{Bmatrix}=\frac{1}{c_{B_{44}}}\begin{bmatrix}1 & 2e_{A_{15}}\\ 0 & -c_{A_{44}}\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}B_{\infty u}\\B_{\infty\varphi}\end{Bmatrix}。$$

把式(8)一式(11)及上述系数代入方程(7)得：

$$\boldsymbol{t}_{\mathrm{A}y}+\mathrm{i}\boldsymbol{t}_{\mathrm{A}x}=\frac{\exp[\pi(z+hi)/h]}{4hi\omega}\boldsymbol{C}_{\mathrm{A}}\left(\frac{\boldsymbol{A}_{\infty}}{\omega-\omega_{\mathrm{d}}}+\frac{\boldsymbol{A}_{p}}{\omega-\bar{\omega}_{\mathrm{d}})}+\frac{\widetilde{\boldsymbol{A}}_{\infty}}{\omega+\bar{\omega}_{\mathrm{d}})}+\frac{\widetilde{\boldsymbol{A}}_{p}}{\omega+\omega_{\mathrm{d}}}\right),$$

$$\boldsymbol{t}_{\mathrm{B}y}+\mathrm{i}\boldsymbol{t}_{\mathrm{B}x}=\frac{\exp[\pi(z+hi)/h]}{4hi\omega}\boldsymbol{C}_{\mathrm{B}}\left(\frac{\boldsymbol{B}_{\infty}}{\omega-\omega_{\mathrm{d}}}+\frac{\widetilde{\boldsymbol{B}}_{\infty}}{\omega+\bar{\omega}_{\mathrm{d}})}\right)。$$

同理可得　　$E_1=\mathrm{Im}[-f'_{\mathrm{B}\varphi}(z)],E_2=\mathrm{Re}[-f'_{\mathrm{B}\varphi}(z)]$。

对于纯弹性材料的反平面裂纹(Ⅲ型裂纹)问题,强度因子定义为 $k_{\sigma}=\lim\limits_{z\to0}\sqrt{2\pi z}\,\sigma_{zy}$。

对于压电材料可将上式扩展为

$\boldsymbol{k}=[k_{\sigma},k_{E}]^{\mathrm{T}}=\lim\limits_{z\to0}\sqrt{2\pi z}[\sigma_{zy},E_1]^{\mathrm{T}}$,式中:$k_{\sigma}$ 表示传统的应力强度因子;k_{E} 表示电场强度因子。

把上式代入,最后得应力和电场强度因子的表达式分别为

$$k_{\sigma}=-\mathrm{Re}\sqrt{\frac{1}{8h}}\left\{\frac{c_{A_{44}}(\widetilde{A}_{pu}-A_{\infty u})+e_{A_{15}}(\widetilde{A}_{p\varphi}-A_{\infty\varphi})}{\omega_{\mathrm{d}}}+\frac{c_{A_{44}}(\widetilde{A}_{\infty u}-A_{pu})+e_{A_{15}}(\widetilde{A}_{\infty\varphi}-A_{p\varphi})}{\bar{\omega}_{\mathrm{d}}}\right\},$$

$$k_{\mathrm{E}}=\mathrm{Im}\sqrt{\frac{1}{8h}}\left\{\frac{\widetilde{A}_{p\varphi}-A_{\infty\varphi}}{\omega_{\mathrm{d}}}+\frac{\widetilde{A}_{\infty\varphi}-A_{p\varphi}}{\bar{\omega}_{\mathrm{d}}}\right\}。$$

3　结　论

1)电位移和应力在裂纹尖端具有 1/2 阶的奇异性。

2)应力强度因子和电场强度因子不仅与薄板的厚度有关,还与集中力和电荷的位置有关。

3)电位移和应力在裂纹尖端和集中力处均奇异。

参考文献:

[1]　WEERTMAN J. Dislocation based fracture mechanics[J]. World Scientific,1996,40:1 665-1 668.

[2]　EPAK Y. Force on a piezoelectric screw dislocation[J]. Appl Mech,1990, 57:863-869.

[3]　LI X F,DUAN X Y. The interaction of a screw dislocation and a free boundary in a piezoelectric material[J]. Physica Solidi,2001,227:613-619.

[4]　LIU J X,DU S Y,WANG B. A screw dislocation interacting with a piezoelectric bimaterial interface[J]. Mech Res Commun,1999, 26:415-420.

[5]　CHEN B J,XIAO Z M,LIEW K M. Electro-elastic stress analysis for a wede crack interacting with a screw dislocation in a piezoelectric solid[J]. Int J Eng Sci,2002,40:621-635.

[6]　SOH A K. LIU J X,FANG D. A screw dislocation interacting with an interfacial crack in two dissimilar piezoelectric media[J]. Phy Star Sol, 2002,b232:273-282.

[7]　WANG S D,SANBOH L. Screw dislocations near a subsurface crack in a thin plate[J]. Materials Science and Engineering,1998,A246:61-68.

[8]　CHEN F M,SHEN M H,LIN Y J. Anti-plane piezoelastic study on singularities interacting with interface[J]. International Journal of Mechanical Sciences,2004,46:1 459-1 470.

文章编号:1008-1542(2006)03-0196-04

传递矩阵方法与矩形势垒的量子隧穿

张红梅[1],刘　德[2]

(1. 河北科技大学理学院,河北石家庄　050054;2. 河北师范大学物理科学与信息工程学院,河北石家庄　050016)

摘　要:利用传递矩阵方法精确计算了一维定态薛定谔方程,求解出电子穿过矩形势垒的透射系数,进一步研究了该透射系数与有效质量和矩形势垒参数的关系。数值计算结果表明,有效质量和矩形势垒参数对透射系数的影响同等重要。

关键词: 量子隧穿;矩形势垒;传递矩阵方法;透射系数

中图分类号:O411.9　　　**文献标识码:**A

Transfer matrix method in the study of quantum transmission for rectangular barrier

ZHANG Hong-mei[1], LIU De[2]

(1. College of Sciences, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang Hebei 050054, China; 2. College of Physics and Information Engineering, Hebei Normal University, Shijiazhuang Hebei 050016, China)

Abstract: Transmission coefficient of electron tunneling through rectangular barrier has been calculated based on the exact solution of the one-dimensional time-independent Schrödinger equation with the transfer matrix method; furthermore, the dependence of the transmission coefficient on the effective masses and parameters of rectangular barrier also has been studied. Numerical analysis shows that the effective masses cannot be ignored in comparison with parameters of rectangular barrier for the transmission coefficient.

Key words: quantum transmission; rectangular barrier; the transfer matrix method; transmission coefficient

分子束外延(MBE)和金属有机物化学气相沉积(MOCVD)等材料制备技术极大地推动了现代半导体器件的发展。电子隧穿问题是研究半导体器件的基础,如何计算电子穿过势垒的透射系数是计算隧道电流、研究隧道器件伏安特性的关键,而该问题的理论重点在于求解一维定态薛定谔方程。为此,正确求解一维定态薛定谔方程成为人们关注的热点。众所周知,可以用解析方法精确求解的一维定态薛定谔方程是非常有限的。于是,人们提出和发展了许多方法,如变分法、有限元法、蒙特卡罗法、WKB 近似法、Ariy 函数近似法和传递矩阵方法[1~7]等等。这些方法各有各的优缺点,其中变分法的适用范围较窄,有限元法和蒙特卡罗法应用起来较为复杂,WKB 近似法和 Ariy 函数近似法得出的结果不够精确。在所提到的方法中,唯有传递矩阵方法适用范围较广,使用起来较为简单,并能够非常准确、快速地求解一维定态薛定谔方程。

笔者将利用传递矩阵方法计算任意形状一维势垒的定态薛定谔方程,求解出电子穿过任意势垒的透射系数,用数值计算方法得到电子穿过矩形势垒的透射系数和电子有效质量与矩形势垒参数的关系,这将为人们制备隧道二极管等现代半导体器件提供一定的理论依据。

收稿日期:2006-02-21;修回日期:2006-03-18;责任编辑:王士忠

作者简介:张红梅(1972-),女,河北滦南人,讲师,硕士,主要从事理论物理方面的研究。

1　传递矩阵方法与透射系数的计算

图 1 给出任意形状的一维势垒 $U(x)$，其势能曲线可被分成 N 部分，每一部分的势能值可视为一常数（见图 1 中阶梯状曲线）。由图 1 可见，只要 N 足够大，原任意势垒就可以用这 N 个矩形势垒来代替，并且 N 越大，精确度越高。这样，计算电子穿过任意势垒的透射系数问题就转化为电子穿过多矩形势垒的透射系数问题。对于这样的问题可以使用传递矩阵方法给以解决。

假设能量为 E 的电子从左向右沿 x 方向入射，第 j 个势垒（区域）的势能函数 $U(x)=U_j$，对应电子的有效质量为 m_j，而电子运动在各区域遵从的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x),\tag{1}$$

图 1　任意形状的势垒曲线

Fig. 1　Arbitrary potential barrier plot

于是在第 j 个势垒（区域）中电子的波函数可以表示为

$$\psi_j(x)=A_j\exp(\mathrm{i}k_jx)+B_j\exp(-\mathrm{i}k_jx),\tag{2}$$

其中 $\hbar$ 为约化普朗克常数，$k_j=\sqrt{2m_j^*(E-U_j)}/\hbar$，$A_j$ 和 B_j 分别为入射波和反射波的振幅。

利用式(2)，根据波函数的连续性条件，即波函数 $\psi_j(x)$ 及其导数 $(1/m_j^*)(\mathrm{d}\psi_j/\mathrm{d}x)$ 在 x_j 处连续，可得 A_{j-1}，B_{j-1} 与 A_j，B_j 之间的关系式为

$$\begin{pmatrix}A_j\\B_j\end{pmatrix}=M_j\begin{pmatrix}A_{j+1}\\B_{j+1}\end{pmatrix},\tag{3}$$

其中：

$$M_j=\frac{m_j^*}{2k_j}\begin{pmatrix}\alpha\ \exp[\mathrm{i}(k_{j+1}-k_j)x_j] & \beta\exp[-\mathrm{i}(k_{j+1}+k_j)x_j]\\ \beta\exp[\mathrm{i}(k_{j+1}+k_j)x_j] & \alpha\ \exp[-\mathrm{i}(k_{j+1}-k_j)x_j]\end{pmatrix},\tag{4}$$

$$\alpha=\frac{k_j}{m_j^*}+\frac{k_{j+1}}{m_{j+1}^*},\beta=\frac{k_j}{m_j^*}-\frac{k_{j+1}}{m_{j+1}^*}。$$

显然式(3)为一递推关系，利用该式可以求出 A_0，B_0 和 A_{N+1}，B_{N+1} 的关系，即

$$\begin{pmatrix}A_0\\B_0\end{pmatrix}=M_0M_1M_2\cdots M_j\cdots M_N\begin{pmatrix}A_{N+1}\\B_{N+1}\end{pmatrix}=M\begin{pmatrix}A_{N+1}\\B_{N+1}\end{pmatrix},\tag{5}$$

其中由 $(N+1)$ 个 2×2 矩阵乘积得到的 $M=M_0M_1M_2\cdots M_j\cdots M_N$ 为传递矩阵。

这样，就可以得到穿过任意势垒 $U(x)$ 透射系数的近似值为

$$T=\frac{1}{|M_{11}|^2}。\tag{6}$$

由此可见，研究任意势垒隧穿问题的基础在于单势垒的隧穿。而单势垒隧穿结构具有一些独特的地方，一是人们相信它更适合于更高的工作频率（因为隧穿通过单势垒比多势垒花时间更短）；二是作为高频振荡器，输出功率与负阻区电压变化和电流变化的乘积成正比。选用合适的材料的单势垒结构，可望有较大的输出功率。因此，对于矩形势垒电子遂穿问题的研究，不仅具有理论意义，更有潜在的实际意义。

2　有效质量和矩形势垒参数对透射系数的影响

对于调制掺杂的 $\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{A_S}/\mathrm{GaAs}$ 异质结材料，若取 GaAs 中电子的浓度（单位体积电子的个数）$n=1\times10^{18}$ 个/cm^3，并假设温度为 77 K 时电子的费米能量为 0.05 eV，则电子的有效质量 m^* 和势垒高度 $U(x)$ 分别可以由下面 2 式决定[8,9]，

即

$$m^*=(0.067+0.083x)\ \mathrm{m}_0,\tag{7}$$

$$U(x)=\begin{cases}0.75x, & x<0.45\\ 0.75x+0.69(x-0.45)^2, & x>0.45,\end{cases}\tag{8}$$

5　定量方法

5.1　相对质量校正因子

1)相对质量校正因子的理论计算　银杏萜内酯 GA,GJ,GB,GC 分子结构中均含有 20 个碳原子,由 3 个内酯环、2 个戊烷环组成,其差异是在 2 个戊烷环上羟基的数目和位置不同。白果内酯 BB 分子结构中含有 15 个碳原子,由 3 个内酯环、1 个含羟基的戊环组成。将银杏萜内酯化合物衍生反应生成银杏萜内酯的三甲基硅醚衍生物,根据有机分子中不同原子和不同基团对有效碳数的贡献[12],以角鲨烷为内标物,利用有效碳数近似规律公式[12],计算相对质量校正因子。经计算,银杏萜内酯的相对质量校正因子 f_i 如下:$f_{GA}=1.973$,$f_{GB}=2.233$,$f_{GC}=2.453$,$f_{GJ}=2.233$,$f_{BB}=2.226$。

2)相对质量校正因子的测定　分别移取 BB,GA,GB,GC 标准溶液 0.5 mL,置于比色管中,用氮气将溶剂吹干,加入 70 μL 内标液,再用氮气将溶剂吹干后,加入 250 μL BSTFA 和 2.5 μL TMCS 混合均匀后于 120 ℃下反应 45 min。取出,于室温下冷却,取 2 μL 进入色谱仪分析,分别测出 BB,GA,GB,GC 的峰面积 A_i 以及内标物 SQ 峰面积 A_s,并根据标准品及内标物的加入量 W_i 和 W_s 利用公式[12] $f_i=\frac{W_i}{W_s}\times\frac{A_s}{A_i}$ 计算银杏萜内酯相对质量校正因子,结果列于表 1。

表 1　银杏萜内酯校正因子测定结果

Tab.1　Correct factor measurement result of ginkgolides

银杏萜内酯	3 次测定值			平均值	相对偏差/%
	1	2	3		
BB	2.226	2.173	2.225	2.208	1.06
GA	1.986	1.991	1.847	1.941	3.25
GB	2.159	2.209	2.267	2.212	1.67
GC	2.196	2.418	2.339	2.318	3.49

注:内标物 SQ 的相对质量校正因子 $f_{SQ}=1.000$

5.2　定量方法

准确称取银杏叶样品 2 g,按上述实验方法进行处理。然后按内标法进行计算,计算公式为

$$P_i=\frac{2f_iA_i}{A_s}\times\frac{W_s}{W}\times 100,$$

式中:f_i 为待测组分的相对质量校正因子;A_i 为待测组分的峰面积;A_s 为内标物的峰面积;W_s 为内标物的质量;W 为样品的质量;2 为系数,即无水甲醇样品溶液体积与移入硅胶净化柱的甲醇样品溶液体积之比。

6　样品的测定

分别摘取河北 8 月份、10 月份银杏叶,按实验方法的程序进行测定,结果见表 2,色谱图见图 2。图 2 中峰号 IS 为内标物 SQ 色谱峰,保留时间为 9.82 min。

表 2　银杏萜内酯测定结果

Tab.2　Result of ginkgolides measurement

样品	w(银杏萜内酯)/%					
	BB	GA	GJ	GB	GC	总计
8 月份银杏叶	0.068	0.180	0.032	0.120	0.068	0.470
10 月份银杏叶	0.044	0.130	0.026	0.080	0.022	0.300

注:表中测定值系 3 次结果的平均值

图 2　银杏萜内酯定量气相色谱图

Fig.2　Quantitative gas chromatogram of ginkgolides