

层间作用对 HgS/CdS/HgS 柱状纳米系统 电子能量的影响^{*}

郑瑞伦¹⁾ 张翠玲¹⁾ 陈志谦²⁾

¹⁾ 西南师范大学物理学院, 重庆 400715)

²⁾ 西南师范大学材料科学与材料工程学院, 重庆 400715)

(2004 年 4 月 21 日收到, 2004 年 6 月 2 日收到修改稿)

确立了柱状纳米系统电子势能随距离的变化关系, 以 HgS/CdS/HgS 柱状纳米系统为例, 讨论了层间作用对电子能谱的影响. 结果表明: 电子能量随势垒宽度和波矢的增大而增大, 随势阱宽度的增大而减小; 层间相互作用会增大电子能量, 但不会改变电子能量随势阱和势垒以及波矢的变化趋势.

关键词: 层间作用势, HgS/CdS/HgS 柱状纳米系统, 电子能量

PACC: 7170E

1. 引 言

由于球状和柱状纳米系统的重要性, 对它的研究是人们感兴趣的问题之一. Schooss 和 Mews 等人用离子溅射法制备了 CdS/HgS 和 CdS/HgS/CdS 球状多层纳米系统, 从理论和实践上研究这种封闭型多层纳米系统电子能谱随系统尺寸的变化关系^[1,2]. 这种系统以势能较小的 HgS 作中间层, 势能较大的 CdS 作内核和外层, 结果在小于外面介质势垒高度范围内形成分立能级的束缚定态, 而高于势垒时形成连续谱. 不少学者已对这类封闭型系统作了进一步的研究^[3-5]. Tkach 等人制备出 HgS/CdS/HgS 开放型球状和柱状纳米系统^[6]. 这种系统的中间层电子势能大, 内核和外层的势能小, 电子为准定态, 电子寿命有限, 文献 7 对球状 HgS/CdS/HgS 纳米系统的电子能级进行了研究, 文献 8 对 HgS/CdS/HgS 柱状系统进行研究, 在研究中把势阱和势垒视为方势, 未考虑层间作用, 更未讨论电子概率分布. 为此作者于 2002 年对球状纳米系统 HgS/CdS/HgS 中电子概率分布作了讨论^[9]. 对纳米多层系统, 层间作用不可低估. 文献 10 研究表明, 由于层间作用的影响, 介电常数等物理量将与位置有关. 为了较正确地研究上

述系统电子的能量特征, 就应确定电子势能随位置的变化关系, 再在此基础上讨论电子能量变化规律. 本文将对柱状纳米系统情况进行研究.

2. 电子势能随位置的变化

对以 HgS 作内核和外层, CdS 作中间层的柱状纳米系统, 可选取坐标系如图 1. 由于横截面极小, 柱长很大, 可将它视为无限长. 这时电子势能 U 将只与到轴线的距离 ρ 有关.

图 2 画出了横截面的一个分界面. 由于层间作用只对界面附近影响较大, 作为近似考虑, 可将介电常数与 ρ 的关系写为

$$\epsilon(\rho) = \frac{1}{2}[1 - s(\rho)](\epsilon_1 + \epsilon_2), \quad (1)$$

这里

$$s(\rho) = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} f\left(\frac{\rho - R_1}{L}\right),$$

其中 $L = R_2/2$, $f(x)$ 的形式为平滑函数, 按文献 10] 的分析, 取为 $f(x) = \text{th}x$ 的形式.

为方便起见, 先讨论三维普遍情况. 由电动力学理论, 对介电常数只是距离 r 函数的情况, 位于 r_0 点的电子在 r 处产生的电势 $\phi(r, r_0)$ 将满足泊松方程

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10147207)资助的课题.

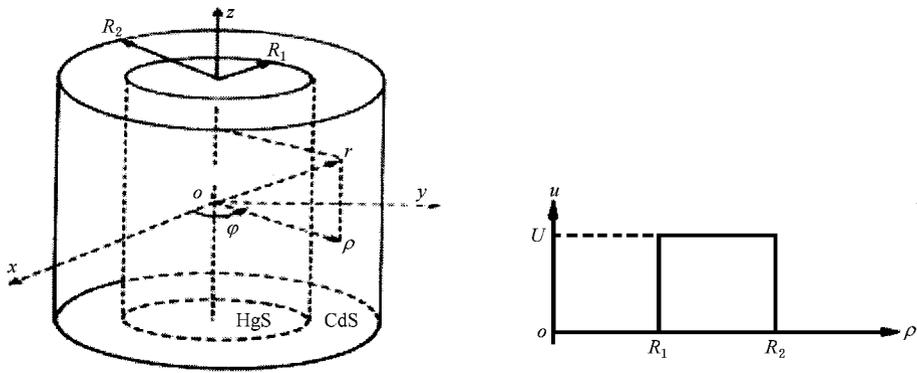


图 1 系统模型和零级近似下电子的势能

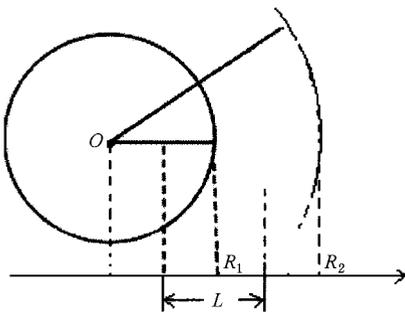


图 2 系统的横截面

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) + \frac{d}{dr} \left[\ln \epsilon(r) \frac{\partial}{\partial r} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \right] = -\frac{4\pi e}{\epsilon(r)} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0),$$

被它感应的场中电子势能 $U(\mathbf{r})$ 为

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2} \phi(\mathbf{r}),$$

这里

$$\phi(\mathbf{r}) = \lim_{\epsilon_0 \rightarrow 0} \left[\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) - \frac{e}{\epsilon(r)} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \right].$$

令 $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = -4\pi e G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \epsilon(r)$, 可将泊松方程写为

$$\nabla^2 G - V(r)G = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (2a)$$

其中

$$V(r) = \frac{1}{2r^2} \frac{1}{\sqrt{\epsilon(r)}} \frac{d^2}{dr^2} \left[\frac{r^2}{\sqrt{\epsilon(r)}} \frac{d}{dr} \epsilon(r) \right]. \quad (2b)$$

将 $\epsilon(r)$ 代入 (2b) 式, 并考虑到 r 较小, 可得

$$V(r) \approx -\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} [r\epsilon(r)] - \frac{1}{4r} \frac{d}{dr^2} + \frac{1}{4} \left[\frac{d}{dr} \epsilon(r) \right]^2.$$

(3)

对 HgS, CdS 构成的系统, 由于两层的介电常数相差不是太大, 可将 G 作微扰展开, 令

$$G = G^{(0)} + G^{(1)} + \dots = G^{(0)} + \Delta G,$$

其中零级近似满足

$$\nabla^2 G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0),$$

其解为

$$G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = -1/(4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|),$$

其余修正满足如下方程

$$\nabla^2 G^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) - V G^{(n-1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = 0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

其解可用迭代法求出

$$G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \int d\tau_1 G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(r_1) G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$$

$$G^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \int d\tau_1 \dots d\tau_n G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \dots V(r_1) \dots V(r_n) G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0). \quad (4)$$

将 (3) 式代入 (4) 式, 可求出 G 的各级修正和 $G = G^{(0)} + \Delta G$ 的近似式. 注意到 $\phi(\mathbf{r})$ 可写为

$$\phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi e}{\epsilon(r)} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0).$$

所以可通过求 ΔG 而得到 $\phi(\mathbf{r})$, 进而得到电子势能 $U(\mathbf{r}) = -e\phi(\mathbf{r})/2$. 取一级近似 $\Delta G \approx G^{(1)}$, 对 (1) 式所示的 $\epsilon(r)$, 计算的近似结果为

$$U(r) \approx \frac{-e^2 \gamma}{4\epsilon(r)} \int_0^\infty \left[\frac{r_1}{L} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r_1 - R}{L}\right) + \operatorname{th}\left(\frac{r_1 - R}{L}\right) \right] \frac{dr_1}{(r_1^2 - r^2)},$$

此处 $\gamma = (\epsilon_1 - \epsilon_2) / (\epsilon_1 + \epsilon_2)$. 对我们的具体系统, 由于 $r^2 = z^2 + \rho^2$, 注意到 $U(\rho)$ 与 z 无关, 可将 z 取为 0 作讨论. 经计算可求得 $U(\rho)$ 的近似表示式, 当以国际单位表示时为

$$U(\rho) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\epsilon(\rho)R} \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \left(\frac{R^2}{R^2 - \rho^2} + w \right), \quad (5)$$

这里的 w 和 $\epsilon(\rho)$ 分别为

$$w = \begin{cases} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left[1 + \frac{\epsilon_2}{2\epsilon_2 + \epsilon_1} (e^{\rho^2/R^2} - 1) \right] & \rho < R, \\ \left(\frac{\rho}{R} \right)^2 \left[1 + \frac{\epsilon_2}{2\epsilon_2 + \epsilon_1} (e^{R^2/\rho^2} - 1) \right] & \rho > R, \end{cases}$$

$$\epsilon(\rho) = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \operatorname{th} \left(\frac{\rho - R}{L} \right) \right].$$

将(5)式应用于 $\rho = R_1$ 的界面时

$$U(\rho) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\epsilon(\rho)R_1} \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \left(\frac{R_1^2}{R_1^2 - \rho^2} + w \right) \quad (6a)$$

$$w = \begin{cases} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left[1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1 + 2\epsilon_2} (e^{\rho^2/R_1^2} - 1) \right] & \rho < R_1, \\ \left(\frac{R_1}{\rho} \right)^2 \left[1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1 + 2\epsilon_2} (e^{R_1^2/\rho^2} - 1) \right] & R_1 < \rho < \frac{1}{2}(R_1 + R_2), \end{cases}$$

$$\epsilon(\rho) = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \operatorname{th} \left(\frac{\rho - R_1}{L} \right) \right].$$

将(5)应用于 $\rho = R_2$ 的界面时

$$U(\rho) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\epsilon'(\rho)R_2} \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \left(\frac{R_2^2}{R_2^2 - \rho^2} + w' \right) \quad (6b)$$

$$w' = \begin{cases} \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \left[1 + \frac{\epsilon_1}{2\epsilon_1 + \epsilon_2} (e^{\rho^2/R_2^2} - 1) \right] & \frac{1}{2}(R_1 + R_2) < \rho < R_2, \\ \left(\frac{R_2}{\rho} \right)^2 \left[1 + \frac{\epsilon_1}{2\epsilon_1 + \epsilon_2} (e^{R_2^2/\rho^2} - 1) \right] & \rho > R_2, \end{cases}$$

$$\epsilon'(\rho) = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \operatorname{th} \left(\frac{\rho - R_2}{L} \right) \right],$$

其中的 ϵ_1, ϵ_2 分别为 HgS, CdS 的介电常数: 文献

[9] 给出 $\epsilon_1 = 11.36, \epsilon_2 = 5.5$. 取 $R_1 = 15a_{\text{HgS}}, R_2 - R_1 = 5a_{\text{CdS}}$. 这里的 a_{HgS} 和 a_{CdS} 分别为 HgS 和 CdS 的晶格常数: $a_{\text{HgS}} = 5.851 \times 10^{-10} \text{ m}, a_{\text{CdS}} = 5.818 \times 10^{-10} \text{ m}$, 由此作出的 $U(\rho)$ 曲线如图 3 所示. 由图看出, 零级近似下, 可用图 1 所示的方式处理.

3. 零级近似下电子的能量

设电子势能 $U^{(0)}$, 有效质量 μ , 它们都是到轴距离 ρ 的函数, 作为零级近似, 可取为

$$\mu^{(0)} = \begin{cases} \mu_0 & \rho < R_1, \\ \mu_1 & R_1 < \rho < R_2, \\ \mu_0 & \rho > R_2, \end{cases}$$

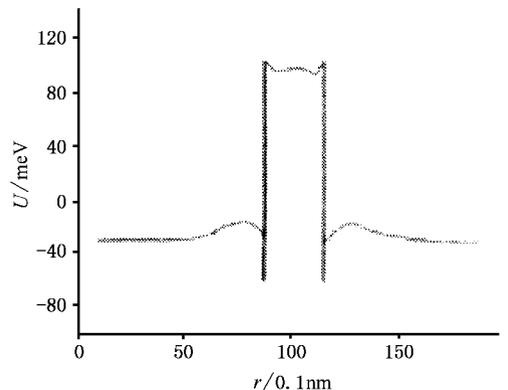


图 3 系统的势能曲线

$$U^{(0)}(\rho) = \begin{cases} 0 & \rho < R_1, \\ U_0 & R_1 < \rho < R_2, \\ 0 & \rho > R_2, \end{cases} \quad (7)$$

零级近似下能量本征值方程为

$$H^{(0)}\varphi^{(0)}(\rho, \phi, z) = E^{(0)}\varphi^{(0)}(\rho, \phi, z),$$

$$H^{(0)} = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu^{(0)}(\rho)} \nabla + U^{(0)}(\rho) \right]. \quad (8)$$

由轴对称性, 令 $\varphi^{(0)}(\rho, \phi, z) = R_{mk}^{(0)}(\rho) e^{im\phi} e^{ikz}$, 这里 m 为磁量子数 ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$), k 为波矢, 文献 [8] 已解出径向函数为

$$R_{mk}^{(0)}(\rho) = \begin{cases} R_{mk}^0(\rho) = A_m^{(0)} [H_{mk}^{(2)}(x_0\rho) + H_{mk}^{(1)}(x_0\rho)] & \rho < R_1, \\ R_{mk}^1(\rho) = A_m^{(1)} [H_{mk}^{(2)}(ix_0\rho) + S_{mk}^1(E)H_{mk}^{(1)}(ix_0\rho)] & R_1 < \rho < R_2, \\ R_{mk}^2(\rho) = A_m^{(2)} [H_{mk}^{(2)}(x_0\rho) + S_{mk}(E)H_{mk}^{(1)}(x_0\rho)] & \rho > R_2, \end{cases} \quad (9)$$

其中 $H_{mk}^{(1)}(x_0\rho)$, $H_{mk}^{(2)}(x_0\rho)$ 分别是以 $x_0\rho$ 为宗量的第一类、第二类韩克尔函数, 而 $H_{mk}^{(1)}(ix_0\rho)$, $H_{mk}^{(2)}(ix_0\rho)$ 是以 $ix_0\rho$ 为虚宗量的第一类、第二类韩克尔函数; $A_m^{(0)}$, $A_m^{(1)}$, $A_m^{(2)}$ 是归一化常数, x_0 和 ix_1

分别为

$$x_0 = \sqrt{\frac{2\mu_0 E}{\hbar^2} - k^2}, \quad x_1 = \sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2}(U_0 - E) - k^2},$$

式中的 S_{mk} 为 S 矩阵的矩阵元, 表达式为

$$S_{mk}(E) = \frac{\mu_0 F_m(E) H_m^{(2)}(x_0 R_1) - \mu_0 x_0 [H_{m-1}^{(2)}(x_0 R_1) - H_{m+1}^{(2)}(x_0 R_1)]}{\mu_0 F_m(E) H_m^{(1)}(x_0 R_1) - \mu_1 x_0 [H_{m-1}^{(1)}(x_0 R_1) - H_{m+1}^{(1)}(x_0 R_1)]},$$

而 S_{mk}^1 为

$$S_{mk}^1(E) = \frac{B_m^-(J) - C_m^-(H_m)}{B_m^+(J) - C_m^+(H_m)},$$

$$B_m^- = \mu_1 x_0 H_m^2(ix_0 R_0) [J_{m+1}(x_0 R_0) - J_{m+1}(x_0 R_0)],$$

$$B_m^+ = \mu_1 x_0 H_m^1(ix_0 R_0) [J_{m-1}(x_0 R_0) - J_{m+1}(x_0 R_0)],$$

$$C_m^-(H_m) = \mu_0 ix_1 J_m(x_0 R_0) [H_{m-1}^{(2)}(ix_1 R_0) - H_{m+1}^{(2)}(ix_0 R_0)],$$

$$C_m^+(H_m) = \mu_0 ix_1 J_m(x_0 R_0) [H_{m-1}^{(1)}(ix_1 R_0) - H_{m+1}^{(1)}(ix_0 R_0)],$$

$$F_m(E) = \frac{i^{2m-1} \pi x_1 [I_{m-1}(x_1 R_1) + I_{m+1}(x_1 R_1)] + x_1 [K_{m-1}(x_1 R_1) + K_{m+1}(x_1 R_1)] [S_{mk}^1(E) - 1]}{I_{m-1}(x_1 R_1) i^{2m-1} \pi - K_m(x_1 R_1) [S_{mk}^1(E) - 1]},$$

式中的 $J_m(Z)$ 是贝塞尔函数, $I_m(Z)$ 和 $K_m(Z)$ 分别为第一类和第二类修正贝塞尔函数. 文献 [8] 用 S 矩阵理论和作图法, 求得零级近似下 S 矩阵极点位置 $\tilde{E} = E_1 + iE_2$, 进而求得电子能量 $E^{(0)} = E_1$ 和寿命 $\tau^{(0)} = \hbar/2E_2$. 各参量取值为 $\mu_0 = 0.036m_0$, $\mu_1 = 0.2m_0$, m_0 为电子静止质量. 文献 [8] 的结果是在 $k = 0$ 和势垒宽度 $R_2 - R_1 = 5a_{\text{CdS}}$ 的情况下, 电子的能量随势阱宽度 R_1 的变化如图 4(a) 中的实线所示. 由图看出电子能量随势阱宽度增大而减小. 在 $k = 0$ 和阱宽 $R_1 = 15a_{\text{HgS}}$ 情况下, 电子能量 E 随势垒宽度 $(R_2 - R_1)/a_{\text{CdS}}$ 的变化见图 4(b) 的实线. 表明电子

的能量随势垒宽度增加而增大. 给定阱宽 $R_0 = 15a_{\text{HgS}}$ 和垒宽 $R_2 - R_1 = 5a_{\text{CdS}}$ 的情况下, 电子能量随波矢 k 的变化见图 4(c) 中的实线. 由图可知, 零级近似下, 电子能量随波矢增大而增大.

4. 层间相互作用对电子能量的影响

考虑层间作用后, 由于电子势能曲线与视为方势阱、方势垒情况相差不大, 为简单起见, 可近似认为 $\mu(\rho) \approx \mu^{(0)}$, 则微扰哈密顿 \hat{H}' 为

$$\hat{H}' = U(\rho) - U^{(0)}(\rho), \quad (10)$$

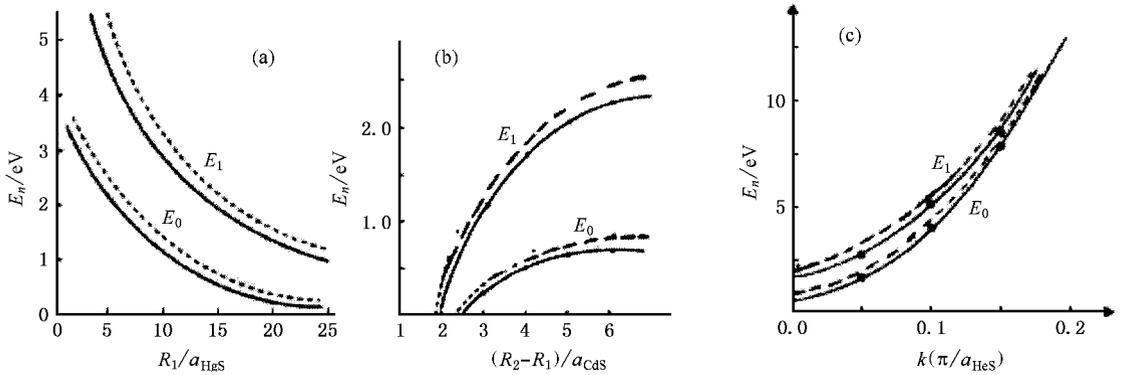


图 4 电子能量随势阱宽度(a),势垒宽度(b)和波矢(c)的变化

式中 $U(\rho)$, $U^0(\rho)$ 分别由(6)(7)式所示,由微扰法可求出能量一级修正,对基态 ($m=0, k=0$) 为

$$E_0^{(1)} = \int_0^\infty R_0^{(0)*}(\rho) \hat{H}'(\rho) R_0^{(0)} 2\pi\rho d\rho, \quad (11)$$

考虑到纳米系统几何尺寸很小,因此 $H_m^{(1)}$, $H_m^{(2)}$, J_m 等特殊函数中的宗量 x_0, R_1 等均很小,可近似取至展式的第 3 项作计算.

将(11)式求出的 $E_0^{(1)}$ 代入 $E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)}$, 就得到考虑层间相互作用后基态电子的能量. 同样,对 $k=0, m=1$ 的第一激发态,由下式求能量的一级修正为

$$E_1^{(1)} = \int_0^\infty R_1^{(0)*}(\rho) \hat{H}'(\rho) R_1^{(0)} 2\pi\rho d\rho. \quad (12)$$

将(12)式代入 $E_1 \approx E_1^{(0)} + E_1^{(1)}$, 得到考虑层间相互作用后, $k=0, m=1$ 时电子能量的近似值. 图 4(a) 和 (b) 的虚线给出了 $m=0$ 和 1 以及 $k=0$ 时的电子能量随势阱、势垒宽度的变化曲线. 同样由

$$E_{mk}^{(1)} = \int_0^\infty R_{mk}^{(0)*}(\rho) \hat{H}'(\rho) R_{mk}^{(0)} 2\pi\rho d\rho \quad (13)$$

可求出 $E_{mk}^{(1)}$, 进而求得 $E_{mk} \approx E_{mk}^{(0)} + E_{mk}^{(1)}$. 在 $R_1 = 15a_{\text{HgS}}$ 和 $R_2 - R_1 = 5a_{\text{CdS}}$ 的情况下,对 $m=0$ 和 $m=1$ 的电子能量 E_0, E_1 随波矢 k 的变化情况如图 4(c) 的虚线所示. 由图可知,考虑层间作用后电子的能量比未考虑层间作用的能量稍有增大,但变化趋势相同.

5. 结 论

上述讨论表明,对 HgS/CdS/HgS 柱状纳米系统,考虑层间作用后,电子势能随位置的变化可用(6)式近似表示,柱状纳米系统的电子能量随势垒宽度和波矢的增大而增大,随势阱宽度增大而减小. 考虑层间相互作用后,电子的能量会增大,但能量增大并不很大,大致在 20—50meV 之间;层间作用不会改变电子能量随势阱和势垒宽度以及波矢的变化趋势.

- [1] Schooss, D, Mews A, Fychmuller A and Weller H 1994 *Phys. Rev. B* **49** 17072
- [2] Mews A, Kadavanich A V and Banin U 1996 *Phys. B* **53** 13242
- [3] Zhang X Q 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1167 (in Chinese) [张希清 2001 物理学报 **50** 1167]
- [4] Xu L, Ma Y and Li M H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 877 (in Chinese) [徐 岭、马 懿、李明海 2002 物理学报 **51** 877]
- [5] Chen Z Q, Chen H, Cheng N P and Zheng R L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 649 (in Chinese) [陈志谦、陈 洪、程南璞、郑瑞伦 2002 物理学报 **51** 649]

- [6] Tkach M, Holowatsky V, Voitsckivska O and Minkova M 1997 *Phys. Stat. Sol.* **B 203** 578
- [7] Ткач Н В, Головацкий В А 1999 *ФТТ* **41** 2081
- [8] Ткач Н В, Головацкий В А 2001 *ФТТ* **43** 350
- [9] Zheng R L, Chen Z Q, Zhang C L, Lu J 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2284 (in Chinese) [郑瑞伦、陈志谦、张翠玲、刘 俊 2003 物理学报 **52** 2284]
- [10] Бойчук В И, Бойнихивская О Н, Головацкий В А 1995 *ФТТ* **37** 861



The influence of the layer-to-layer interaction energy on the electronic energy in HgS/CdS/HgS columnar nanometer system *

Zheng Rui-Lun¹⁾ Zhang Cui-Ling¹⁾ Chen Zhi-Qian²⁾

¹⁾*(School of Physics , Southwest Normal University , Chongqing 400715 ,China)*

²⁾*(School of Material and Material Engineering , Southwest Normal University , Chongqing 400715 ,China)*

(Received 21 April 2004 ; revised manuscript received 2 June 2004)

Abstract

The variation of the electronic energy in a columnar nanometer system with the increase of radius is established , and the HgS/CdS/HgS nanometer system is used to discuss the influence of the layer-to-layer interaction energy on the electronic energy spectrum of electrons. Some important results indicate that the energy of the electronic energy increases with the increase of the potential barrier width and the wave vector , while the potential well width and the layer-to-layer interaction energy makes the electronic energy larger , but it doesn ' t effect the variation of electronic energy with the potential well width , potential barrier or the wave vector .

Keywords : layer-to-layer interaction energy , HgS/CdS/HgS columnar nanometer system , electronic energy

PACC : 7170E

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10147207).