# 圆柱状量子点量子导线复合系统的 激子能量和电子概率分布

#### 郑瑞伦

(重庆文理学院物理与信息工程系,重庆 402160) (2006年11月3日收到 2007年1月26日收到修改稿)

建立了圆柱状量子点量子导线复合系统中激子满足的方程,用微扰论求出激子能量.以 CdS/HgS/CdS/HgS/CdS 圆柱状量子点量子导线复合系统为例,研究了系统中电子的概率分布和系统线度对激子能量的影响.结果表明:系 统中电子、空穴以及激子的能量均随量子点高度 h<sub>0</sub> 的增大而减小,电子-空穴相互作用对基态激子能量的影响要 大于激发态,电子沿径向方向的概率分布呈起伏状,在轴线和表面附近的概率趋于零,而在 R/2 附近概率最大;在 量子点附近电子沿轴向方向的概率分布呈振荡特征.

关键词:量子点,量子导线,激子,能量 PACC:7170E

## 1.引 言

由于纳米系统的重要性,目前已有不少文献对 零维量子点和一维量子导线进行了研究1-6〕这些 研究主要探讨单层情况的性质. 文献[7,8]分别于 1994 年和 1996 年用离子溅射法制备了 CdS/HgS 和 CdS/HgS/CdS 球状多层纳米系统 从理论和实验上研 究这种封闭型多层纳米系统电子能量随系统尺寸的 变化. 1997 年 Tkach 等<sup>9]</sup>制备出 HgS/CdS/HgS 开放 型球状和沿径向的三层柱状纳米系统,1999年文献 [10]对 HgS/CdS/HgS 这种沿径向的三层柱状开放型 纳米系统在未考虑层间相互作用情况下的电子能量 进行了研究 为了使结果与实验更接近 作者在文献 [11] 冲确定了沿径向的多层柱状纳米系统的电子势 能,讨论了层间相互作用对电子能量的影响,在文献 [12] 中还研究了 CdS/HgS/CdS 球状纳米系统的斯塔 克线度效应,上述研究未对沿圆柱状的轴向含量子 点的量子导线复合系统的电子能量特征进行研究. 2005 年文献 13 指出,可以用实验方法制备出一种 复合型半导体量子导线,它含有一个共轴的量子点 且两边被两个具有有限深势阱的反量子点与量子导 线的其余部分隔开. 文献 13 还对电子、空穴的能量

和寿命进行了研究,但未对激子的能量特征以及电子的概率分布进行研究,由于这种系统对研制无惯性快作用传感器、发送器、转换程序等方面有广阔的应用前景。本文将探讨这种系统中激子的能量和电子的概率分布。

## 2. 模型和满足的方程

我们所研究的系统是由两种半导体材料(如 CdS 和 HgS )构成的 1 个圆柱形量子点和 2 个反量子 点镶嵌于圆柱形量子导线中的复合系统(图 1(a)). 量子点和量子导线的半径均为 *R* ,量子点 CdS(以 0 表示 )的高度为  $h_0$  ,而反量子点 HgS(以 1 表示 )的高 度为  $h_1$  ,因在介质 CdS 和 HgS 中电子 e 和空穴 h 的 势能不同<sup>[13]</sup> 结果形成如图 1(b)所示的开放型势能 曲线.设在介质 CdS 中电子和空穴的有效质量分别 为  $\mu_0^e$  , $\mu_0^h$  ,晶格常数为  $a_{CdS}$  ;而在介质 HgS 中电子和 空穴的有效质量分别为  $\mu_1^e$  , $\mu_1^h$  ,晶格常数为  $a_{HgS}$  .由 柱对称性 ,电子和空穴的势能都只与 *z* 有关而与方 向无关 ,即

$$U^{e^{h}}(\rho,\varphi,z) = \begin{cases} -U_{0}^{e^{h}} & (|z| < z_{1}), \\ -U_{1}^{e^{h}} & (z_{1} < |z| < z_{2}), (1) \\ -U_{0}^{e^{h}} & (|z| > z_{2}). \end{cases}$$



图 1 纳米系统及电子和空穴的势能曲线 (a)纳米系统 (b)电子和空穴的势能曲线

电子和空穴的哈密顿量为

$$\begin{split} \hat{H}_{e,h} &= -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu^{e,h}(z)} \nabla + U^{e,h}(\rho,\varphi,z). \quad (2) \\ \\ & \exists |z| < z_1 \; \Pi |z| > z_2 \; \Pi \;, \mu^{e,h} = \mu_0^{e,h} \;; \Pi \; \exists \; z_1 < |z| \\ & < z_2 \; \Pi \;, \mu^{e,h} = \mu_1^{e,h} \;. (2) \; \exists \Pi \; U^e(\rho,\varphi,z) \; \Pi \; U^h(\rho,\varphi,z) \\ \\ & \varphi \;, z \;) \\ \end{pmatrix} \\ \mathcal{H}$$

导带中的电子和价带中的空穴会产生相互作 用,形成电子-空穴束缚对(激子) 哈密顿量为

$$H_{ex}(r_{e},r_{h}) = \hat{H}_{e}(r_{e}) + \hat{H}_{h}(r_{h})$$
  
+  $U(|r_{e} - r_{h}|) + E_{g0}$ , (3)  
式中  $E_{g0}$ 是量子点材料的禁带宽度, $U(|r_{e} - r_{h}|)$ 是  
电子和空穴的相互作用势,它与介电常数  $\epsilon$  的关  
系为

$$U(|r_{\rm e} - r_{\rm h}|) = -\frac{e^2}{\varepsilon |r_{\rm e} - r_{\rm h}|}.$$
 (4)

激子满足的方程为

$$H_{\rm ex}(r_{\rm e},r_{\rm h})\psi_{\rm ex}(r_{\rm e},r_{\rm h}) = E_{\rm ex}\psi_{\rm ex}(r_{\rm e},r_{\rm h}).$$
 (5)

## 3. 激子能量

采用微扰法求解.设电子与空穴的相互作用势  $U(|r_e - r_h|)$ 很小 冷

$$\hat{H}_{\rm ex} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{1}$$
 ,

其中

按照微扰法,一级近似下哈密顿能量本征值为  $E_{ex} = E_0 + \Delta E^{(1)}$ ,

$$\Delta E^{(1)} = \int \psi^{(0)*} U(|r_{\rm e} - r_{\rm h}|) \psi^{(0)} \mathrm{d}\tau. \quad (6)$$

3.1. 激子的零级能量和零级波函数

不考虑电子和空穴相互作用时 ,零级近似的方 程为

$$\begin{bmatrix} \hat{H}_{e}(r_{e}) + \hat{H}_{h}(r_{h}) + E_{g0} \end{bmatrix} \psi^{(0)}(r_{e}, r_{h})$$
$$= E^{(0)} \psi^{(0)}(r_{e}, r_{h}).$$
(7)

利用分离变量法求得

$$\psi^{(0)}(r_{\rm e},r_{\rm h}) = \psi^{(0)}(r_{\rm e})\psi^{(0)}(r_{\rm h}),$$
$$E^{(0)} = E_{\rm g0} + E^{(0)}_{\rm e} + E^{(0)}_{\rm h}, \qquad (8)$$

式中  $\psi^{(0)}(r_e)$ ,  $\psi^{(0)}(r_h)$ ,  $E_e^{(0)}$ ,  $E_h^{(0)}$ 分别满足

$$\hat{H}_{e,h}(r_{e,h})\psi^{(0)}(r_{e,h})$$
$$= E_{e,h}^{(0)}\psi^{(0)}(r_{e,h}).$$

注意到  $\hat{H}_{e}(r_{e}), \hat{H}_{h}(r_{h})$ 具有相同的形式,其解的形 式也相同,以下的讨论除特别指明外将不再写出下 标 e, h. 由柱对称性,可得解为

$$\psi^{(0)}(\rho,\varphi,z) = \frac{1}{\sqrt{\pi R^2 J_{m-1}(x_{n_{\rho}m}) J_{m+1}(x_{n_{\rho}m})}}$$
$$\times J_m(x_{n_{\rho}m} \frac{\rho}{R}) \exp(im\varphi) \phi(z)(\varphi)$$

式中  $J_m\left(x_{n_{\rho^m}}\frac{\rho}{R}\right)$  是整数阶贝塞尔函数 , $x_{n_{\rho^m}}$  为它的 零点 ;m 为磁量子数 ,m = 0 , $\pm 1$  ,... ; $n_{\rho}$  为给定 m 情 况下贝塞尔函数零点决定的径向量子数 , $n_{\rho} = 1$  ,2 , ... ;q(z)满足

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} \not\ll z \right) + \left\{ \frac{2\mu(z)}{\hbar^2} \right[ E - U(\rho, \varphi, z)$$

$$-\frac{x_{n_{\rho}m}^{2}}{R^{2}}\right] \not\ll z ) = 0.$$
 (10)

因为电子(或空穴)的势能相对于变量 z 对称 即

U(-z) = U(z),

$$\phi(z) = \begin{cases} \phi_0(z) = A[\exp(ik_0z) + \exp(-ik_0z)] & (0 < z < z_1), \\ \phi_1(z) = B[\exp(-kz) + S_1\exp(k_1z)] & (z_1 < z < z_2), \\ \phi_2(z) = C[\exp(-ik_0z) + S\exp(ik_0z)] & (z_2 < z < \infty), \end{cases}$$
(11)

式中 S 和 S1 为散射矩阵,

$$k_0^2 = \frac{2\mu_0}{\hbar^2} E - x_{n_\rho m}^2 / R^2 ,$$
  

$$k_1^2 = \frac{2\mu_1}{\hbar^2} (U - E) + x_{n_\rho m}^2 / R^2 ,$$
  

$$U = U_0 - U_1 .$$

由波函数和概率流密度在分界面处连续的条件以及 归一化条件,即由

$$\phi_{0}(z_{1}) = \phi_{1}(z_{1}),$$

$$\phi_{1}(z_{2}) = \phi_{2}(z_{2}),$$

$$\frac{1}{\mu_{0}}\phi_{0}'(z_{1}) = \frac{1}{\mu_{1}}\phi_{1}'(z_{1}),$$

$$\frac{1}{\mu_{1}}\phi_{1}'(z_{2}) = \frac{1}{\mu_{0}}\phi_{2}'(z_{2}),$$

$$\int_{0}^{\infty} \phi_{k0}^{*}(z) \phi_{k_{0}}(z) dz = \partial (k_{0} - k_{0}'),$$

可以得到(11)式中的 S1, S 和系数 A, C, B 分别为

$$S_{1} = \frac{\exp(-2k_{1}z_{1} \prod k_{1}\mu_{0}\cos(k_{0}z_{1}) - k_{0}\mu_{1}\sin(k_{0}z_{1}))}{k_{1}\mu_{0}\cos(k_{0}z_{1}) + k_{0}\mu_{1}\sin(k_{0}z_{1})},$$

$$S = \frac{(\mu_{0}k_{1} + i\mu_{1}k_{0})S_{1}\exp[(k_{1} - ik_{0})z_{2}] - (\mu_{0}k_{1} - i\mu_{1}k_{0})\exp[(k_{1} + ik_{0})z_{2}]}{(\mu_{0}k_{1} + i\mu_{1}k_{0})\exp[(k_{1} - ik_{0})z_{2}] - (\mu_{0}k_{1} - i\mu_{1}k_{0})S_{1}\exp[(k_{1} + ik_{0})z_{2}]},$$

$$A = \frac{\exp(-k_{1}z_{1}) + S_{1}\exp(k_{1}z_{1})}{2\cos(k_{0}z_{1})}B,$$

$$C = \frac{\exp(-k_{1}z_{2}) + S_{1}\exp(k_{1}z_{2})}{\exp(-k_{0}z_{2}) + S\exp(ik_{0}z_{2})}B = Q(k_{0})B,$$

$$B = [M(k_{0}) + N(k_{0}) + P(k_{0})]^{1/2}.$$
(12)

这里,

$$M(k_0) = \frac{\left[\exp(-k_1z_1) + S_1\exp(k_1z_1)\right]^2}{2\cos^2(k_1z_1)} \left[\frac{\sin(2k_0z_1)}{2k_0} + 1\right],$$

$$M(k_0) = \frac{1}{2k_1} \left[\exp(-2k_1z_1) - \exp(-2k_1z_2)\right] + 2S_1(z_2 - z_1) + \frac{S_1^2}{2k_1} \left[\exp(2k_1z_2) - \exp(-2k_1z_2)\right],$$

$$M(k_0) = \frac{1}{2k_1} \left[\exp(-2k_1z_1) - \exp(-2k_1z_2)\right] + 2S_1(z_2 - z_1) + \frac{S_1^2}{2k_1} \left[\exp(2k_1z_2) - \exp(-2k_1z_2)\right],$$

 $P(k_0) = |Q(k_0)|^2 \{2\pi (|S|^2 + 2R (S) + 1) + 2R [Sexp(2ik_0z_2)] - 2R (S)\},$ 其中 R (Z)表示复数 Z 的实部, |Z|<sup>2</sup> 表复数 Z<sub>0</sub> 的模平方.由(12)式得到

Ref 
$$S = \frac{-x^2 + Y^2}{x^2 + Y^2}$$
,  
 $|S|^2 = 1$ ,  
Ref Sexp(2ik\_0z\_2)] = \frac{(-X^2 + Y^2)\cos(2k\_0z\_2) + 2XY\sin(2k\_0z\_2)}{X^2 + Y^2}

这里

$$\begin{aligned} X &= \left[ S_1 \exp(k_1 z_2) - \exp(-k_1 z_2) \right] \mu_0 k_1 \cos(k_0 z_2) + \left[ S_1 \exp(k_1 z_2) + \exp(-k_1 z_2) \right] \mu_1 k_0 \sin(k_0 z_2) \\ Y &= \left[ S_1 \exp(k_1 z_2) + \exp(-k_1 z_2) \right] \mu_1 k_0 \cos(k_0 z_2) - \left[ S_1 \exp(k_1 z_2) - \exp(-k_1 z_2) \right] \mu_0 k_1 \sin(k_0 z_2). \end{aligned}$$

按照普遍理论,准粒子的能量  $E_{n_pm_s}$ 由能量复平面 中S矩阵极点的实数部分决定.由(12)式可求得电 子和空穴的能量  $E_{n_pm}^e$ 和 $E_{n_pm}^h$ 以及

$$E^{(0)} = E^{e}_{n_{\rho}m} + E^{h}_{n_{\rho}m} + E_{g_{0}}.$$

电子和空穴的波函数  $\phi^{(0)}(r_e), \phi^{(0)}(r_h)$ 以及激子的 零级波函数

$$\psi^{(0)} = \psi^{(0)}(r_{\rm e})\psi^{(0)}(r_{\rm h})$$

由(9)武得到.其中

$$\psi^{(0)}(r_{e}) = \frac{J_{me}(x_{n_{\rho}m}\rho/R)\exp(im^{e}\varphi^{e})\phi_{e}(z)}{\sqrt{\pi R^{2}J_{m-1}^{e}(x_{n_{\rho}m})J_{m+1}^{e}(x_{n_{\rho}m})}},$$

$$\psi^{(0)}(r_{h}) = \frac{J_{mh}(x_{n_{\rho}m}\rho/R)\exp(im^{h}\varphi^{h})\phi_{h}(z)}{\sqrt{\pi R^{2}J_{m-1}^{h}(x_{n_{\rho}m})J_{m+1}^{h}(x_{n_{\rho}m})}}.$$
(13)

3.2. 激子能量的一级修正

将 
$$\psi^{(0)}(r_e), \psi^{(0)}(r_h)$$
代入  
 $\psi^{(0)}(r_r, r_h) = \psi^{(0)}(r_h)\psi^{(0)}(r_h)$ 

再代入(6)式可得

$$\Delta E^{(1)} = \int \psi^{(0)*} (r_e r_h) U(|r_e - r_h|)$$

$$\times \psi^{(0)} (r_e r_h) dr_e dr_h.$$

这里的  $U(|r_e - r_h|)$ 可作如下考虑:设电子在量子 点(CdS)概率为  $\rho^0$ ,介电常数为  $\varepsilon_0$ ;电子在反量子点 (HgS)概率为  $\rho^1$ ,介电常数为  $\varepsilon_1$ ,近似取

$$1/\varepsilon = \rho^0/\varepsilon_0 + \rho^1/\varepsilon_1.$$

在柱坐标系中,电子的位置坐标为( $\rho_e, \varphi_e, z_e$ ),空穴的位置坐标为( $\rho_h, \varphi_h, z_h$ )则

$$|r_{\rm e} - r_{\rm h}| = [(z_{\rm e} - z_{\rm h})^2 + \rho_{\rm e}^2 + \rho_{\rm h}^2 - 2\rho_{\rm e}\rho_{\rm h}\cos(\varphi_{\rm e} - \varphi_{\rm h})]^{1/2}.$$

在量子导线的径向方向 , $\rho > R$  时 ,电子和空穴的势 垒视为无限高 ,因而  $\phi^{(o)}(r_e) = \phi^{(o)}(r_h) = 0. 在柱坐$ 标系中 ,

$$dr_{e} = \rho_{e} d\rho_{e} d\varphi_{e} dz_{e} ,$$
  
$$dr_{h} = \rho_{h} d\rho_{h} d\varphi_{h} dz_{h} ,$$

于是

$$\Delta E^{(1)} = \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}z_{\mathrm{e}} \mathrm{d}z_{\mathrm{h}} \int_{0}^{R} \mathrm{d}\rho_{\mathrm{e}} \mathrm{d}\rho_{\mathrm{h}} \int_{0}^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_{\mathrm{e}} \mathrm{d}\varphi_{\mathrm{h}}$$

$$\times \frac{(-e^{2}/\varepsilon) \mathcal{P}^{(0)^{*}}(r_{\mathrm{e}}, r_{\mathrm{h}}) \mathcal{P}^{(0)}(r_{\mathrm{e}}, r_{\mathrm{h}}) \mathcal{P}_{\mathrm{e}}\rho_{\mathrm{h}}}{\sqrt{(z_{\mathrm{e}} - z_{\mathrm{h}})^{2} + \rho_{\mathrm{e}}^{2} + \rho_{\mathrm{h}}^{2} - 2\rho_{\mathrm{e}}\rho_{\mathrm{h}} \mathrm{cos}}(\varphi_{\mathrm{e}} - \varphi_{\mathrm{h}})},$$

$$(14)$$

式中

$$\psi^{(0)^{*}}(r_{e})\psi^{(0)}(r_{e},r_{h}) = \frac{J_{m,e}^{2}(x_{n_{\rho}^{e}m^{e}}\rho_{e}/R)J_{m,h}^{2}(x_{n_{\rho}^{h}m^{h}}\rho_{h}/R)\phi_{e}^{*}(z)\phi_{e}(z)\phi_{h}^{*}(z)\phi_{h}(z)\phi_{h}(z)}{\sqrt{\pi^{2}R^{4}J_{m-1}^{e}(x_{n_{\rho}^{m}})J_{m+1}^{e}(x_{n_{\rho}^{m}})J_{m-1}^{h}(x_{n_{\rho}^{m}})J_{m+1}^{h}(x_{n_{\rho}^{m}})}}.$$

只要给出具体半导体材料的有关数据,就可以由 (14)式求出激子能量的一级修正.

## 4. 复合系统电子的概率分布和激子能量

4.1. 激子能量的零级近似

对 CdS/HgS/CdS/HgS/CdS 圆柱形量子点量子导线 复合系统 CdS(标记 0)和 HgS(标记 1)的有关参量见表 1 表 1 中的  $m_0$  为电子的静止质量  $m_0 = 9.1 \times 10^{-31}$  kg.

由整数阶贝塞尔函数  $J_m(x)$ 的表达式,通过作 图法可以得到  $J_m(x)$ 的各零点的近似值为  $x_{10} =$  2.25  $x_{11} = 3.60$ ,....将这些值代入  $J_m(x)$ 的表达式 求得  $J_{m\pm1}^e(x_{n_{\rho}m})$ , $J_{m\pm1}^h(x_{n_{\rho}m})$ 以及  $J_{m,e}(x_{n_{\rho}m}\rho_e/R)$ ,  $J_{m,k}(x_{n_{\rho}m}\rho_h/R)$ .此外 将  $x_{n_{\rho}m}$ 代入不同  $n_{\rho}$ , m 情况下 的  $k_0^2$  和  $k_1^2$ 以及  $U = U_0 - U_1$ ,求得  $k_0$  和  $k_1$ .注意到  $h_0 = 2z_1$ , $h_1 = z_2 - z_1$ ,得到  $z_1 = h_0/2$ , $z_2 = h_1 + h_0/2$ . 取  $R = 10a_{Hgs}$ , $h_1 = 4a_{Hgs}$ ,将它代入(12)式,由复平 面上 S 矩阵的极点位置,得到量子点取不同高度  $h_0$  情况下电子和空穴的能量  $E^e$ , $E^h$ .文献[13] 给出部分量子态| $n_{\rho}m$  的  $E^e$  和  $E^h(表 2)$ ,由此求 得相应态中激子能量零级近似  $E^{(0)} = E^e + E^h$  的 值(表 2).

長1 系统的有关参量

	$\mu^{\mathrm{e}}/m_0$	$\mu^{ m h}/m_0$	$U^{ m e}/{ m eV}$	$U^{\rm h}/{\rm eV}$	$a/10^{-10}$ m	ε	$E_{g0}/eV$				
CdS	0.2	0.7	3.8	6.3	5.818	5.5	2.5				
HgS	0.036	0.044	5.15	5.65	5.851	11.30	0.5				

表 2  $R = 10 a_{Hes}$ 情况下电子、空穴及激子能量随量子点高度  $h_0$  的变化(单位为 meV)

		-					
$h_0/a_{ m CdS}$	10	15	20	25	30	35	40
$E_{10}^{ m e}$	280	240	210	207	205	203	201
$E_{11}^{ m e}$	545	500	490	470	462	454	450
$E_{10}^{ m h}$	80.0	68.6	60.0	59.1	58.6	58.0	57.4
$E_{11}^{ m h}$	155.7	142.8	140.1	134.3	132.0	129.7	128.6
$E_{\rm exl0}^{(0)}$	360	308.6	270.0	266.1	263.6	261.0	258.4
$E_{\rm exl1}^{(0)}$	700.7	642.8	630.1	604.3	594.0	583.7	578.6
$\Delta E_{\rm exl0}^{(1)}$	- 34.2	- 31.2	- 29.0	- 26.7	- 25.1	- 24.0	- 22.7
$\Delta E_{\mathrm{exl1}}^{(1)}$	- 27	- 25.4	- 23.7	- 22.3	- 21.0	- 20.0	- 19.2
$E_{ m exl0}$	325.58	277.4	241.0	239.4	238.5	237	235.7
$E_{\rm exl1}$	673.7	617.4	606.4	582	573	563.7	559.4

#### 4.2. 电子的概率分布

4.2.1. 径向分布

由波函数的统计解释,电子出现在空间体积元  $d\tau = \rho_e d\rho_e d\varphi_e dz_e$ 内的概率为

 $\mathrm{d}W = |\psi_{n_{\mathrm{o}}mn_{\mathrm{e}}}|^2 \rho_{\mathrm{e}} \mathrm{d}\rho_{\mathrm{e}} \mathrm{d}\varphi_{\mathrm{e}} \mathrm{d}z.$ 

将它对  $\varphi_{e}$ ,  $z_{e}$  积分并利用归一化条件,得到电子出现在  $\rho_{e}$  到  $\rho_{e}$  +  $d\rho_{e}$ 范围的概率为

$$W(\rho) H\rho = \begin{cases} 0 & (\rho > R), \\ \frac{J_m^2(x_{n_pm}\rho/R)\rho}{\pi R^2 J_{m-1}(x_{n_pm}) J_{m+1}(x_{n_pm})} d\rho & (\rho < R). \end{cases}$$

将 x<sub>np</sub>代入,就得到电子沿径向的概率分布曲线 图 2).由图 2 可以看出,在量子导线的轴线和表面附近,电子出现的概率趋于零.





4.2.2. 轴向分布

由(11)式求得电子出现概率的轴向分布 W(z) = | ∮(z) |<sup>2</sup> 为

$$W(z) = \begin{cases} 4 |A|^{2} \cos^{2}(2k_{0}z) & (0 < |z| < z_{1}), \\ |B|^{2}[\exp(-2k_{1}z) + 2S_{1} + S_{1}^{2}\exp(2k_{1}z)] & (z_{1} < |z| < z_{2}) \\ |C|^{2} \left\{ 2 + \frac{\mathcal{I}(-X^{2} + Y^{2})\cos(2k_{0}z) + 2XY\sin(2k_{0}z)]}{(X)^{2} + (Y)^{2}} \right\} & (|z| > z_{2}). \end{cases}$$

将上述数据代入,经计算得到当  $R = 10a_{H_{es}}$ , $h_0 = 10a_{Cas}$ , $h_1 = 4a_{Cas}$ 时电子沿轴向的概率分布 W(z)曲线如图 3 所示.由图 3 可以看出,电子沿轴向不是等概率分布,而是有起伏.离量子点、量子阱较远处,起伏很小,几乎为常数.

#### 4.3. 激子能量的一级近似

要计算激子能量的一级修正量 ΔE<sup>(1)</sup>,需要计 算积分(14)式,要求出它的解析表达式很困难,我们 采用计算机求解.取不同的高度  $h_0$ ,在量子态 |10,|11中计算出激子能量的一级修正量  $\Delta E^{(1)}$ 以及一级近似值  $E_{ex} = E^{(0)} + \Delta E^{(1)}$ 的结果(表 2),相 应的变化曲线见图 4 中的实线.图 4 还给出了激子 能量的零级近似的相应曲线(虚线).由图 4 并结合 表 2 可以看出 (1)系统中的电子能量  $E^e$ 、空穴能量  $E^h$ 和激子(电子-空穴对)能量  $E_{ex}$ 均随量子点高度  $h_0$ 的增大而减小.(2)不考虑电子-空穴作用后的激



图 3 电子的轴向概率分布



图 4 激子能量的零级近似(虚线)和一级近似(实线)

子能量  $E_{ex} = E^{(0)} + \Delta E^{(1)}$ ,即电子-空穴作用会使激 子能量降低,而且能量降低情况与  $h_0$ 和系统所处的 状态有关(图 5), $h_0$  越小,电子-空穴的相对距离相 应减小,使激子能量降低得越多.由于基态能低于激 发态能,所以电子-空穴相互作用对基态|10 激子 能量的影响要大于对激发态|11 的影响.例如:当  $h_0 = 10a_{cos}$ 时,电子-空穴作用能对基态激子能量的



图 5  $R = 10 a_{HeS}$ 情况下激子能量一级修正  $\Delta E^{(1)}$ 随量子点 高度  $h_0$  的变化

影响为 9.50%,而对激发态 | 11 能量的影响为 3.8%;当  $h = 40 a_{cds}$ 时,电子-空穴作用能对 | 10 态的影响为 8.78%,而对 | 11 态的影响为 3.53%.

## 5.结 论

1)CdS/HgS/CdS/HgS/CdS 圆柱状量子点量子导 线复合系统中电子、空穴以及激子的能量均随量子 点高度 h<sub>0</sub> 的增大而减小,其中电子-空穴的键能为 负值且绝对值随 h<sub>0</sub> 的增大而减小.在基态|10 中 电子-空穴相互作用对激子能量的影响要大于激发 态|11.

2)系统中电子的概率分布规律如下:沿径向呈 起伏状,在量子导线的轴线和表面附近,概率趋于 零,而在 R/2 附近概率最大.沿轴向在量子点附近 呈振荡特征,而离量子点越远,概率变化越小.

- [1] Xian W F, Chen C Y 1998 Acta Phys. Sin. 47 102 (in Chinese)
   [解文方、陈传誉 1998 物理学报 47 102]
- [2] Buczko R , Bassani F 1996 Phys. Rev. B 54 2667
- [3] Hui P 2005 Acta Phys. Sin **54** 4324 (in Chinese)[惠 萍 2005 物理学报 **54** 4324]
- [4] Deng Y X, Yan X H, Tang N S 2006 Acta Phys. Sin 55 2027 (in Chinese) [邓宇翔、颜晓红、唐娜斯 2006 物理学报 55 2027]
- [5] Xie W F 2006 Chin. Phys. 15 203
- $\left[ \begin{array}{c} 6 \end{array} \right] \quad He \ A \ M$  , Duan S Q , Zhao X G 2005  ${\it Chin} \ . \ {\it Phys} \ . \ 14 \ 2320$

- [7] Schooss D , Mews A , Fychmuller A , Weller H 1994 Phys. Rev. B 49 17072
- [8] Mews A, Kadavanich A V, Banin U, Alivisatos A P 1996 Phys. Rev. B 53 13242
- [9] Tkach H, Holowatsky V, Voitsckivska O, Minkova M 1997 Phys. Stat. Sol. B 203 578
- [10] Tkach H V, Holowatsky V A 1999 Phys. Stat. Sol. 41 2081 (in Russian)
- [11] Zheng R L , Zhang C L , Chen Z Q 2005 Acta Phys. Sin. 54 886

(in Chinese)[郑瑞伦、张翠玲、陈志谦 2005 物理学报 54 886]

[12] Zheng R L, Wen G Z 2006 Acta Phys. Sin. 55 791 (in Chinese) [郑瑞伦、文国知 2006 物理学报 55 791] [13] Tkach H V, Mahanets A M 2005 Phys. Stat. Sol. 47 550 (in Russian)

## Energy of excitons and probability distribution of electrons in columned composite system composed of quantum dots and quantum wires

Zheng Rui-Lun

( Department of Physics and Information Engineering, Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China ) ( Received 3 November 2006; revised manuscript received 26 January 2007)

#### Abstract

Equations of excitons in columned composite systems composed of quantum dots and quantum wires have been formulated. Then the energy of excitons is solved by the perturbation theory. From the example of CdS/HgS/CdS/HgS/CdS columned composite systems composed of quantum dots and quantum wires, the electric probability distribution in this system and the dependence of energy of excitons on the size of system are studied. The results show that (1) The energies of electrons, holes and excitions in this system all decrease as the height,  $h_0$ , of quantum dots increases and the impact of the interaction of electrons holes to the energies of the ground excitons is greater than that of the excitons. (2) The probability distribution of the electrons is undulating in the ridial direction, and the probability tends to zero on the axis and near the surface and is maximal near R/2. The probability distribution of electrons is vibratory near the quantum dots in the axial direction.

Keywords : quantum dot , quantum wire , exciton , energy PACC : 7170E