

层间作用和线度对球状纳米系统 电子能量的影响^{*}

吴 强^{1)†} 郑瑞伦²⁾

1) 重庆文理学院物理与信息工程系, 重庆 402160)

2) 西南大学物理科学与技术学院, 重庆 400715)

(2008 年 1 月 22 日收到, 2008 年 4 月 14 日收到修改稿)

建立了考虑层间作用情况下两层球状纳米系统的物理模型, 应用格林函数法和傅里叶展开, 求出系统电子的势能. 以 HgS/CdS 球状纳米系统为例, 讨论了系统线度和层间作用对电子能量的影响. 结果表明: 层间作用会使电子势垒平均高度比不考虑时有所降低, 层间作用愈大, 电子势垒高度降低得愈多, 电子势能曲线起伏就愈大. 层间作用相同时, 电子基态能以及层间作用引起的能量修正均随粒子线度增大而减小, 而粒子线度相同时, 层间作用引起的能量修正却随层间作用的增大而增大.

关键词: 层间作用, 线度, HgS/CdS 球状纳米系统, 电子能量

PACC: 7170E

1. 引 言

目前已有不少文献对球状纳米系统进行了研究. 1994 年, Schooss 等^[1]用离子交换法制备了 CdS/HgS/CdS 球状纳米系统; 1996 年 Mews 等^[2]制备出 HgS/CdS/HgS 球状纳米系统. 文献 [3-4] 应用量子力学和 S 矩阵理论研究了球状纳米系统和圆柱形复合量子线中电子准定态能级、寿命和概率分布. 上述文献未考虑层间作用, 均假定电子和空穴的势能为无限深势阱, 其结果与实验只定性符合. 实验制备的多层球状纳米系统, 由于分界面附近两种不同材料的原子相互作用, 使分界面附近的物理性质不可能跳跃式变化, 可认为两材料间有一过渡层. 因原子相互作用随距离增大而减小且范围仅为若干个原子层厚度, 所以过渡层的厚度 L 很小, 可近似认为过渡层内的物理性质(如介电常数)由一种介质的值连续变化到另一种介质的值. 文献 [5] 讨论了层间作用对 HgS/CdS/HgS 柱状纳米系统电子能量的影响, 但只是简单地将层间作用作为一定的值, 体现不出层间作用大小的变化, 也未讨论系统线度对电子能量的影响. 为此, 本文将建立考虑层间作用情况下两层球

状纳米系统的物理模型, 给出系统电子势能的变化关系, 探讨层间作用及线度对系统电子势能变化规律和电子能量的影响.

2. 模型和方程

所研究的纳米系统是由半径为 R_1 、介电常数为 ϵ_1 的内核 HgS 放入介电常数为 ϵ_2 的 CdS 中, 如图 1 所示. 电子势能在 HgS 中较小(-5000 meV), 在 CdS 中较大(约为 -3800 meV). 不考虑层间作用时, 电子势能为常数^[6], 即

$$V_0(r) = \begin{cases} V_1 & (0 < r < R), \\ V_2 & (R < r < \infty). \end{cases} \quad (1)$$

考虑层间作用后, 电子的势能为

$$\phi(r) = V_0(r) + U(r). \quad (2)$$

为了求层间相互作用势 $U(r)$, 首先应确定介电常数与坐标的关系 $\epsilon(r)$. 设 $r = R$ 处的间隔层厚度为 L . 显然, 当 $r < R - L/2$ 时, $\epsilon(r) = \epsilon_1$; 而 $r > R + L/2$ 时, $\epsilon(r) = \epsilon_2$; 在 $R - L/2 < r < R + L/2$ 范围内, $\epsilon(r)$ 为单调函数. 按此可将介质分界面近旁的介电常数写为

^{*} 重庆市教育委员会科学技术研究计划(批准号: KJ061208)资助的课题.

[†] E-mail: wuqiang2072@163.com

$$\begin{aligned} \epsilon(r) &= \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2 [1 - S(r)]), \\ S(r) &= \frac{\epsilon_1}{\epsilon_1 + \epsilon_2} f\left(\frac{r-R}{L}\right), \end{aligned} \quad (3)$$

式中 $f(x)$ 为单调函数, 满足

$$\begin{aligned} f\left(|x| \geq \frac{1}{2}\right) &= \pm 1, \\ f\left(|x| \geq \frac{1}{2}\right) &= 0. \end{aligned}$$

为确定 $f(x)$, 由文献 [7] 的数据所作出的曲线 (图 2) 进行模拟, 可写为

$$f(x) = \text{th}x.$$

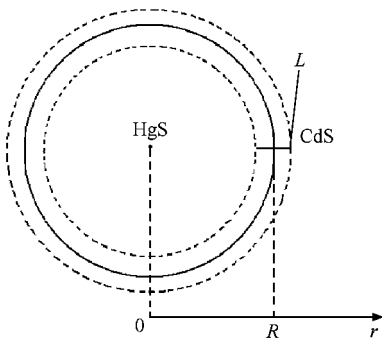


图 1 球状纳米系统

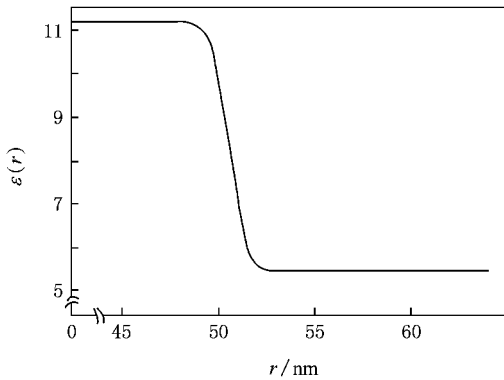


图 2 介电常数随位置的变化

以球心为坐标原点建立球坐标系, 位于 r_0 的点电荷 q 在 r 处的电势 $\phi(r, r_0)$ 满足如下泊松方程:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi(r, r_0) + \frac{d}{dr} [\ln \epsilon(r)] \frac{\partial}{\partial r} \phi(r, r_0) \\ = -\frac{4\pi q}{\epsilon(r)} \delta(r - r_0), \end{aligned} \quad (4)$$

式中的 $\epsilon(r)$ 可将 $f(x) = \text{th}x$ 代入 (3) 式得到. 电荷 q 在被它感应的极化场中的势能为

$$U(r) = \frac{1}{2} q \phi(r),$$

$$\phi(r) = \lim_{r \rightarrow r_0} \left\{ \phi(r, r_0) - \frac{q}{\epsilon(r)|r - r_0|} \right\}. \quad (5)$$

3. 方程的求解

为了通过求解泊松方程 (4) 得到层间作用势 $U(r)$, 作如下变换:

$$\phi(r, r_0) = -\frac{4\pi q}{[\epsilon(r)\epsilon(r_0)]^{1/2}} \chi(r, r_0), \quad (6)$$

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

可将方程 (4) 简化为

$$\nabla^2 \chi(r, r_0) - V(r) \chi(r, r_0) = \delta(r - r_0). \quad (7)$$

通常情况下, 介质 1 与介质 2 的介电常数相差不大, 因而有如下近似条件:

$$\left| \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right| \ll 1. \quad (8)$$

由于此时的 $V(r)$ 较小, 可用逐级近似法求解方程 (7). 将格林函数 $\chi(r, r_0)$ 写为快速收敛形式

$$\begin{aligned} G &= G^{(0)} + G^{(1)} + G^{(2)} + \dots \\ &\equiv G^{(0)} + \Delta G. \end{aligned} \quad (9)$$

零级近似下, 方程 (7) 及其解分别为

$$\begin{aligned} \nabla^2 G^{(0)}(r, r_0) &= \delta(r - r_0), \\ G^{(0)}(r, r_0) &= -\frac{1}{4\pi|r - r_0|}. \end{aligned} \quad (10)$$

考虑到相继的高阶小量修正, 对 n 级修正 $G^{(n)}$ 满足的方程及其解为

$$\begin{aligned} \nabla^2 G^{(n)}(r, r_0) - V(r) G^{(n-1)}(r, r_0) &= 0 \\ (n = 1, 2, 3, \dots), \\ G^{(1)}(r, r_0) &= \int dr_1 G^{(0)}(r, r_1) V(r_1) G^{(0)}(r_1, r_0), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} G^{(n)}(r, r_0) &= \int dr_1 \dots dr_n G^{(0)}(r, r_1) V(r_1) \dots \\ &\quad \times G^{(0)}(r_{n-1}, r_n) V(r_n) G^{(0)}(r_n, r_0). \end{aligned}$$

考虑到 (5) (6) (9) (10) 式, 方程 (5) 中的 $\phi(r)$ 实际上由高阶修正项决定, 即

$$\phi(r) = -\frac{4\pi q}{\epsilon(r)} \Delta \chi(r, r_0). \quad (12)$$

为了计算高阶修正项, 将 $G^{(0)}$ 和 $V(r)$ 作傅里叶展开, 并将其代入 (11) 式, 可得

$$G^{(1)}(r, r_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{V(r_1)}{q_1^2 q_2^2}$$

$$\times \exp(i(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d\mathbf{r}_1.$$

这里 $d\mathbf{q} = dq_x dq_y dq_z$. 注意到 $V(r_1)$ 与方向无关, $d\mathbf{r}_1 = 4\pi r_1^2 dr_1$. 上式对 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ 积分得到

$$G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \frac{1}{8\pi} \int_0^\infty \frac{V(r_1) r_1}{r} \ln \left| \frac{r_1 + r}{r_1 - r} \right| dr_1. \quad (13)$$

类似地, 有

$$\begin{aligned} & G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \\ &= \frac{1}{8\pi r} \int_0^r r_1 V(r_1) dr_1 \int_0^{r_1} r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r_2}{r}\right) dr_2 \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_0^r r_1 V(r_1) Q\left(\frac{r_1}{r}\right) dr_1 \int_{r_1}^r r_2 V(r_2) dr_2 \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_0^r r_1 V(r_1) dr_1 \int_r^\infty r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r_1}{r_2}\right) dr_2 \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_0^\infty r_1 V(r_1) dr_1 \int_0^r r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r_2}{r_1}\right) dr_2 \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_r^\infty r_1 V(r_1) Q\left(\frac{r}{r_1}\right) dr_1 \int_r^{r_1} r_2 V(r_2) dr_2 \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_r^\infty r_1 V(r_1) dr_1 \int_{r_1}^\infty r_2 V(r_2) Q\left(\frac{r}{r_2}\right) dr_2. \quad (14) \end{aligned}$$

式中

$$Q(x) = \int_0^x \frac{1}{y} \ln \frac{1+y}{1-y} dy.$$

在满足(8)式的情况下, $G^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ 中各量随 n 增大而迅速减小. 作为近似

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \approx G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) + G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0).$$

同时 $V(r)$ 可写为

$$\begin{aligned} V(r) \approx & -\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} [rS(r)] - \frac{1}{4r} \frac{d^2}{dr^2} [rS^2(r)] \\ & + \frac{1}{4} \left[\frac{d}{dr} S(r) \right]^2. \quad (15) \end{aligned}$$

将(15)式代入(13)(14)式, 然后再代入

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \approx G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) + G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0),$$

得到

$$\begin{aligned} & \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \\ &= -\frac{1}{8\pi} \int_0^\infty \frac{1}{r_1^2 - r^2} d[r_1 S(r)] \\ &\quad - \frac{1}{16\pi} \int_0^\infty \frac{1}{r_1^2 - r^2} d[r_1 S^2(r_1)] \\ &\quad - \frac{1}{32\pi r} \int_0^\infty \frac{1}{r_1} \ln \left| \frac{r_1 + r}{r_1 - r} \right| d[r_1 S^2(r_1)] \\ &\quad - \frac{1}{8\pi r} \int_0^r d[r_1 S(r_1)] \int_r^\infty \frac{1}{r_1^2 - r_2^2} d[r_2 S(r_2)]. \quad (16) \end{aligned}$$

将 $\epsilon(r)$ 代入(16)式并积分, 再代入

$$U(r) = -\frac{2\pi q^2}{\epsilon(r)} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0),$$

得到正比于 $\gamma = \epsilon_1 / (\epsilon_1 + \epsilon_2)$ 的项 $U_1(r)$ 和正比于 γ^2 的项 $U_2(r)$.

$$U_1(r) = \frac{e^2 \gamma}{4\epsilon(r)} \int_0^\infty \frac{dr_1}{r_1^2 - r^2} \left[\frac{r_1}{L} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r-R}{L}\right) + \operatorname{th}\left(\frac{r-R}{L}\right) \right],$$

$$\begin{aligned} U_2(r) = & \frac{e^2 \gamma^2}{8\epsilon(r)} \int_0^\infty \frac{dr_1}{r_1^2 - r^2} \left[\frac{2r_1}{L} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \operatorname{th}\left(\frac{r_1-R}{L}\right) + \operatorname{th}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right] \\ & + \frac{e^2 \gamma^2}{16\epsilon(r)r} \int_0^\infty dr_1 \ln \left| \frac{r_1+r}{r_1-r} \right| \frac{1}{r_1} \left[\frac{2r_1}{L} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \operatorname{th}\left(\frac{r_1-R}{L}\right) + \operatorname{th}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right] \\ & + \frac{e^2 \gamma^2}{4\epsilon(r)r} \int_0^r dr_1 \left[\frac{r_1}{L} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r_1-R}{L}\right) + \operatorname{th}\left(\frac{r_1-R}{L}\right) \right] \int_0^\infty \frac{dr_2}{r_1^2 - r_2^2} \left[\frac{r_2}{L} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r_2-R}{L}\right) + \operatorname{th}\left(\frac{r_2-R}{L}\right) \right]. \end{aligned}$$

对于 HgS/CdS 球状纳米系统^[6] $\epsilon_1 = 11.36, \epsilon_2 = 5.5$, 因而 γ 较小, 可忽略与 γ^2 成正比的项 $U_2(r)$.

用国际单位制单位表示时,

$$\begin{aligned} U(r) &= -\frac{2\pi q^2}{\epsilon(r)} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \\ &= U_1(r) \end{aligned}$$

的结果如下: 当 $r < R$ 时,

$$U(r) \approx -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\epsilon(r)R} \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}$$

$$\times \left\{ \frac{R^2}{R^2 - r^2} + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} F\left[1, \gamma, \gamma + 1, \left(\frac{r}{R}\right)^2\right] \right\}. \quad (17)$$

当 $R < r < \infty$ 时,

$$\begin{aligned} U(r) \approx & -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\epsilon(r)R} \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \\ & \times \left\{ \frac{R^2}{R^2 - r^2} + \left(\frac{R}{r}\right)^2 F\left[1, \gamma, \gamma + 1, \left(\frac{R}{r}\right)^2\right] \right\}, \quad (18) \end{aligned}$$

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

这里 $F(x, y, z, u)$ 为合流超几何函数, 其具体的表达式见文献 [8].

将 (17) (18) 式以及 (1) 式代入 (2) 式, 得到考虑层间作用后的电子势能为

$$\phi(r) = U(r) + \begin{cases} V_1 & (0 < r < R), \\ V_2 & (R < r < \infty), \end{cases} \quad (19)$$

式中 $V_1 = -5000 \text{ meV}$, $V_2 = -3800 \text{ meV}$.

4. 层间作用对系统电子势能的影响

层间作用的强弱可归结为过渡层厚度 L 的大小. L 较大时, 表示介质分界面处有较多的原子层参加作用, 层间相互作用较大. 反之, 参加作用的原子层数少. 现以 HgS/CdS 球状纳米系统为例讨论 L 的大小对电子势能的影响.

取 $R = 5 \text{ nm}$, $L = 0.5 \text{ nm}$ 以及 $\epsilon_1 = 11.36$, $\epsilon_2 = 5.5$, 代入 (17) — (19) 式进行计算, 得到考虑层间作用时电子势能随距离 r 的变化, 结果见图 3 中的曲线 b . 图 3 中的虚线 a 为不考虑层间作用的情况. 由图 3 可以看出, 考虑层间作用后使得在 HgS 介质中的电子势能比不考虑层间作用时有所增大, 而在 CdS 中则使电子势能比不考虑层间作用时有所降低. 总体上看, 层间作用的存在, 使 HgS/CdS 球状纳米系统的电子势垒平均高度比不考虑层间作用时有所降低. 在选取过渡层厚度为 $L = 2 \text{ nm}$, 而 R 保持不变, 采用相同的步骤作计算, 得到的电子势能曲线如图 3 中的曲线 c 所示. 由此可以看出, 层间作用愈大 (相应的过渡层厚度愈大), 则电子势垒平均高度比不考虑层间作用时降低得愈多, 电子势能曲线起伏愈大.

5. HgS/CdS 球状纳米系统电子的基态能

严格而言, HgS/CdS 球状纳米系统是具有边界条件的晶格系统, 讨论电子能量特征是困难的. 但文献 [1] 已给出在 HgS 和 CdS 中电子的有效质量以及平均势能, 而且讨论电子能级时所涉及的温度不高, 对应长波近似情况. 因此, 我们采用文献 [1] 的方法, 将它视为有效质量为 m_1 和 m_2 的粒子在具有平均场 V_1 和 V_2 的连续介质中运动, 由此研究电子基态能的变化规律. 由 (2) 式得到电子的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m} \nabla + V_0(r) + U(r)$$

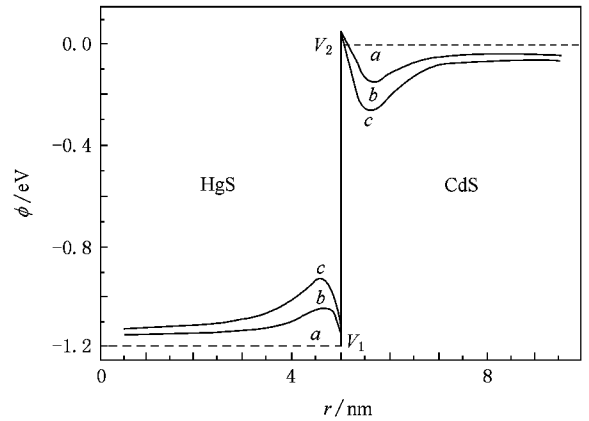


图 3 电子势能随位置的变化

$$= \hat{H}_0 + U(r), \quad (20)$$

式中 m 为电子的有效质量. 当 $0 < r < R$ 时, $m = m_1$; 当 $R < r < \infty$ 时, $m = m_2$. 波函数 ψ 满足方程

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

对于半导体纳米系统, 虽然不具有类金属性, 但在不考虑层间作用时势能为常数, 而系统有球对称性, 由量子力学容易求得其解. 尽管层间作用势有球对称性, 但较小, 可将它作为微扰. 采用微扰法求出对未受微扰体系能量的修正, 其结果虽有误差, 但仍能定量地描述半导体纳米系统基态电子能量的变化特征. 可以采取这种方法近似处理半导体纳米系统^[1]. 未受微扰体系哈密顿的薛定谔方程为

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)}(r, \theta, \varphi) = E^{(0)} \psi^{(0)}(r, \theta, \varphi).$$

令

$$\psi^{(0)}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

由量子力学求得在能量范围 $V_1 \leq E^{(0)} \leq V_2$ 内的基态 ($n = 1, l = 0$) 波函数. 当 $0 < r < R$ 时,

$$\begin{aligned} \psi_{100}^{(0)} &= Y_{00} R_{10}(r) \\ &= A j_0(k_n r) \sqrt{4\pi}. \end{aligned}$$

当 $R < r < \infty$ 时,

$$\begin{aligned} \psi_{100}^{(0)} &= Y_{00} R_{10}(r) \\ &= B h_0^+(ix_n r) \sqrt{4\pi}. \end{aligned}$$

这里

$$k_n^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2} [E^{(0)} - V_1],$$

$$x_n^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2} [V_2 - E^{(0)}],$$

$j_0(x)$ $h_0(x)$ 为零阶球贝塞尔函数. 由波函数满足的边界条件得到

$$A j_0(r k_0)|_{r=R} = B h_0^+(i r x_n)|_{r=R} ,$$

$$\frac{A}{m_1} \frac{d}{dr} [j_0(r k_n)]|_{r=R} = \frac{B}{m_2} \frac{d}{dr} [h_0^+(i r x_n)]|_{r=R} .$$

由此可以求得 A, B ,进而得到基态($n = 1, l = 0$)波函数. 利用波函数非负性和零阶球贝塞尔函数的表达式, 可得到未受微扰体系基态能量满足的方程为

$$-\frac{m_1}{k_n} \sin(R k_0) \exp(- R x_n) \left(1 + \frac{1}{R x_n} \right) + \frac{m_2}{x_0} \exp(- R x_n) \left(\frac{\sin(R k_0)}{R k_0} - \cos(R k_n) \right) = 0. \quad (21)$$

文献[6]给出在 HgS 中电子的有效质量为 $0.036 m_0$,而在 CdS 中电子的有效质量为 $0.2 m_0$,其中 m_0 为电子静止质量. 选取 R 分别为 2—10 nm 之间的不同值, 经计算得到不考虑层间作用时电子的基态能列于表 1.

表 1 电子基态能量及能量修正随线度的变化

	L/nm	R/nm						
		2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
$E_0^{(0)}/\text{meV}$		-636	-757	-841	-902	-948	-984	-1012
$\Delta E_0/\text{meV}$	0.5	30.78	28.18	25.62	23.31	21.11	19.27	17.92
	0.4	30.45	27.88	25.43	23.06	20.89	19.06	17.89
	0.3	30.11	27.57	25.06	22.81	20.66	18.86	17.85
	0.2	29.76	27.26	24.78	22.56	20.43	18.65	17.71
	0.1	29.42	26.95	24.50	22.33	20.22	18.43	16.42
E_0/meV	0.5	-605.22	-729.82	-815.38	-878.69	-926.89	-964.73	-994.08
	0.4	-605.55	-729.12	-815.66	-878.94	-927.11	-964.94	-994.11
	0.3	-605.89	-729.43	-815.94	-879.19	-927.34	-965.14	-994.15
	0.2	-606.24	-729.74	-816.22	-879.44	-927.57	-965.35	-994.29
	0.1	-606.58	-730.05	-816.50	-879.67	-927.78	-965.57	-995.58

按照微扰法, 考虑到能量一级修正的电子基态能为

$$\begin{aligned} E_0 &= E_0^{(0)} + \Delta E_0 \\ &= E_0^{(0)} + V_m, \end{aligned} \quad (22)$$

$$V_m = \int_0^\infty R_{10}^2(r) U(r) r^2 dr .$$

将(17)(18)式和未受微扰体系基态波函数的表达式代入(22)式, 经计算得到考虑层间作用时电子的基态能及层间作用引起的能量修正也列于表 1. 相应的电子基态能变化情况见图 4 (a), 层间作用引起的能量修正变化情况见图 4 (b). 图 4 中的曲线 a、曲线 b、曲线 c 分别对应 $L = 0.5, 0.3, 0.1$ nm 的情形.

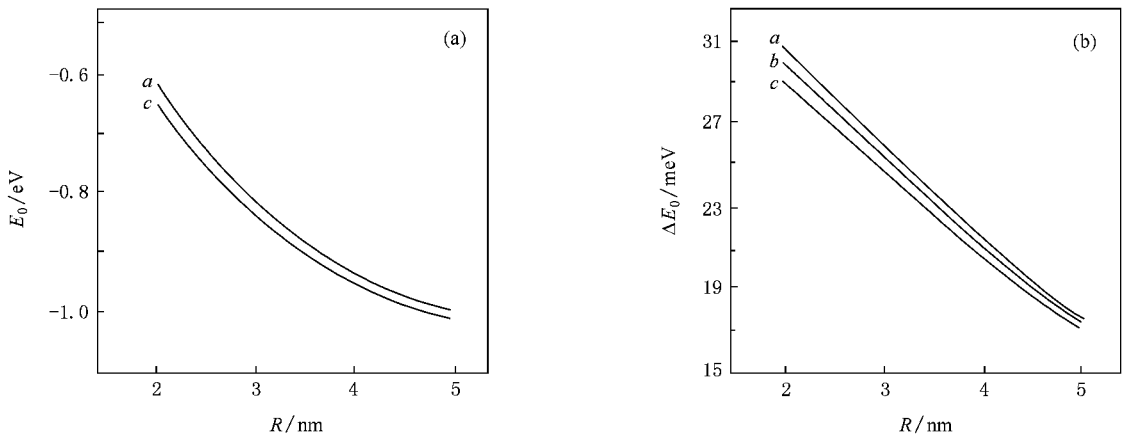


图 4 电子基态能及能量修正随线度和层间作用宽度的变化 (a)基态能 (b)能量修正



从表 1 和图 4 可以看出,当层间作用相同(即给定 L)时,电子基态能以及层间作用引起的能量修正均随粒子线度 R 的增大而减小.从表 1 和图 4 还可以看出,粒子线度 R 相同时,层间作用引起的能量修正随层间作用的增大而增大.

6. 结 论

考虑层间作用后,两层球状纳米系统的电子势

能不仅与距离球心的位置有关,而且还与介质的介电常数、各层的线度、过渡层厚度等参量有关.具体关系由(17)–(19)式决定.与不考虑层间作用时的电子势能情况相比,层间作用会使电子势垒平均高度有所降低;层间作用愈大,电子势垒高度降低得愈多,电子势能曲线的起伏也就愈大.层间作用相同时,电子基态能以及层间作用引起的能量修正均随粒子线度增大而减小.粒子线度相同时,层间作用引起的能量修正随层间作用的增大而增大.

- [1] Schooss D , Mews A , Eychmuller A , Welle H 1994 *Phys. Rev. B* **49** 17072
- [2] Mews A , Kadavanich A V , Banin U , Alivisatos A P 1996 *Phys. Rev. B* **53** 13242
- [3] Zheng R L , Chen Z Q , Zhang C L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2284 (in Chinese) [郑瑞伦、陈志谦、张翠玲 2003 物理学报 **52** 2284]
- [4] Zheng R L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4901 (in Chinese) [郑瑞伦 2007 物理学报 **56** 4901]

- [5] 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]
- [6] Boychvok B Y , Kobayi P Y 2001 *Phys. Stat. Sol.* **43** 226 (in Russian)
- [7] Nakamura T 1983 *J. Phys. Soc. Jpn.* **52** 973
- [8] Wang Z X , Guo D R 1979 *Espeial Function Theory* (Beijing : Science Press) p152 (in Chinese) [王竹溪、郭敦仁 1979 特殊函数论 (北京 科学出版社) 第 152 页]

Influence of layers ' mutual effect and radius on electronic energy of spherical nanometric system ^{*}

Wu Qiang^{1)†} Zheng Rui-Lun²⁾

1) *Department of Physics and Information Engineering , Chongqing University of Arts and Sciences , Chongqing 402160 , China)*

2) *School of Physical Science and Technology , Southwest University , Chongqing 400715 , China)*

(Received 22 January 2008 ; revised manuscript received 14 April 2008)

Abstract

On the basis of interaction between layers , the physical model of the bilayer spherical nanometric system have been worked out . With the Green function method and Fourier transform , the electronic potential energy has been figured out for the system . In the example of HgS/CdS spherical nanometric system , the effect of system size and the layers ' mutual effect has been discussed in terms of the electronic potential energy . The results show that : the layers ' mutual effect could make the average height of the electronic potential barrier of the spherical nanometric system lower ; the more the layers ' mutual effect is , the lower the height of the electronic potential barrier is , and the greater the undulation of the electronic potential energy curve is . For the same layers ' mutual effect , electronic ground state energy and revised energy by layers ' mutual effect will be reduced with the increase of particle radius ; but for the same size , the revised energy by layers ' mutual effect will increase with the increase of the layers ' mutual effect .

Keywords : layers ' mutual effect , radius , HgS/CdS spherical nanometric system , electronic energy

PACC : 7170E

^{*} Project supported by the Scientific and Technological Research Program of the Education Committee of Chongqing , China (Grant No. KJ061208).

[†] E-mail : wuqiang2072@163.com