

文章编号:1000-582X(2003)11-0080-03

(HgS/CdS)_n HgS 线状超晶格电子能带结构*

郑瑞伦¹, 田德祥¹, 郑勇林²

(1. 西南师范大学物理系, 重庆 400715; 2. 涪陵师范学院物理系, 重庆 涪陵 408003)

摘要:建立了由两种不同材料构成的沿轴向的线状超晶格体系的薛定谔方程, 并对 (HgS/CdS)_nHgS 线状超晶格作具体计算, 探讨了势阱和势垒宽度对电子能谱的影响。结果表明: 沿轴向方向的线状超晶格系统的电子能谱存在能带结构, 低能带的宽度要比高能带的宽度小; 势阱宽度增大和势垒宽度减小会使带底的位置降低而带宽增大; 圆柱半径在 40 Å 左右时, 第一禁带宽度最大。

关键词: (HgS/CdS)_nHgS 线状超晶格; 能带结构; 电子能谱

中图分类号: 7170E

文献标识码: A

目前, 人们对层状 HgS/CdS 超晶格系统的研究已经不少^[1-4]。1994 年, D Schoss 和 A Mews 等人制备出 CdS 和 HgS 周期性交替生长成纳米量级的柱状超晶格材料^[5], 对于层状、球状 HgS/CdS 超晶格材料的研究, 人们已作了大量的工作^[6], 但对这两种介质组成的沿轴线方向的线状超晶格的研究很少。笔者试图建立它的物理模型, 讨论沿轴向周期性交替排列的线状超晶格电子的能带结构, 以 (HgS/CdS)_nHgS 线状超晶格为例, 探讨势阱和势垒宽度对电子能带结构的影响。

1 物理模型

沿轴向的超晶格系统是由两种介质(如 HgS 和 CdS)交替排列的, 长度分别为 l_1, l_2 , 半径均为 R 的圆柱体形结构, 如图 1(a) 所示。对这种超晶格, 其晶格常数 $a = l_1 + l_2$ 。

文献[7]研究表明: HgS 中电子势能比 CdS 中电子势能低 1 200 meV 左右, 且在各介质中势能变化很小。作为初级近似, 可认为它们的势能为常数。适当选择零势能位置, 则 HgS 中的电子势能可作为方势阱, 而在 CdS 中为方势垒。选取坐标 z 轴沿圆柱体形的轴向方向, 设势垒的高度为 U , 则对于上述线状超晶格中电子的周期势 $U(z)$ 可写为:

$$U(z) = \begin{cases} U_0 & (l_1 + na \leq z \leq (n+1)a) \\ 0 & (na \leq z \leq l_1 + na) \end{cases} \quad (1)$$

其中 $n = 0, 1, 2, \dots, a = l_1 + l_2$ 为势能变化的周期, 其变化情况见图 1(b)。

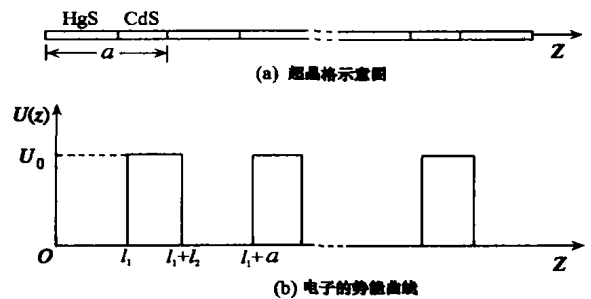


图 1 (HgS/CdS)_nHgS 线状超晶格及其电子的势能曲线

2 薛定谔方程的求解

设电子在介质 HgS 中的有效质量为 μ_1 , 在 CdS 中为 μ_2 , 则电子有效质量 μ 写为:

$$\mu = \begin{cases} \mu_1 & (na \leq z \leq l_1 + na) \\ \mu_2 & (l_1 + na \leq z \leq l_1 + (n+1)a) \end{cases} \quad (2)$$

在柱坐标 (ρ, ϕ, z) 中电子满足的薛定谔方程为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(z) \right] \varphi(\rho, \phi, z) = E\varphi(\rho, \phi, z) \quad (3)$$

对于线状超晶格系统, 由于半径 R 很小, 即认为 $R \ll L$ (L 为量子导线的长度), 此时可视为无限长, 由轴对

* 收稿日期: 2003-06-18

基金项目: 国家自然科学基金资助课题(10147207)

作者简介: 郑瑞伦(1945-), 男, 四川兴文人, 西南师范大学教授, 主要从事凝聚态物理的研究。

称性,可令 $\varphi(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Phi_{n_p, |m|}(\rho) f(z)$ (m 为磁量子数, n_p 为径向量子数)。将此式代入式(3), 分离变量可得到如下方程:

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[U(z) - E + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2} \lambda_{n_p, |m|}^2 \right] f(z) = 0$$

$$\frac{d^2 f(z+a)}{d(z+a)^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[U(z+a) - E + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2} \lambda_{n_p, |m|}^2 \right] f(z+a) = 0 \quad (4)$$

由式(4)可以看出, 能量 E 只由轴向波函数 $f(z)$ 满足的方程决定。由于 $U(z) = U(z+a)$, $\frac{d}{dz} = \frac{d}{d(z+a)}$, 因此, $f(z)$, $f(z+a)$ 是对应同一能量 E 的径向函数, 因此, 应有类似于布洛赫定理的结论: $f(z+a) = e^{ika} f(z)$ 。

式(4)的解为

$$f(z) = \begin{cases} B e^{i\beta n_p, |m| z} + C e^{-i\beta n_p, |m| z} & (0 \leq z \leq l_1) \\ B' e^{i\alpha n_p, |m| z} + C' e^{-i\alpha n_p, |m| z} & (l_1 \leq z \leq l_1 + l_2) \\ e^{ika} [B' e^{i\alpha n_p, |m| (z-a)} + C' e^{-i\alpha n_p, |m| (z-a)}] & (a \leq z \leq l_1 + a) \end{cases} \quad (5)$$

这里

$$\alpha_{n_p, |m|} = \sqrt{\frac{2\mu_2}{\hbar^2} (U_0 - E) + \frac{\lambda_{n_p, |m|}^2}{R^2}} \equiv \alpha \quad (6)$$

$$\beta_{n_p, |m|} = \sqrt{\frac{2\mu_2}{\hbar^2} E - \frac{\lambda_{n_p, |m|}^2}{R^2}} \equiv \beta \quad (7)$$

将 $f(z)$ 代入 $\varphi(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Phi(\rho)_{n_p, |m|} f(z)$, 由波函数及其几率流密度于 $z = 0$ 和 $z = a$ 处连续的条件, 可得到系数 B, C, B', C' 满足的方程组, 它是一个线性齐次方程组, 由非零解的条件可得到如下方程, 它正是能量 E 满足的方程。

$$\text{ch}(\alpha l_2) \cos(\beta l_1) + \frac{1}{2} \left(\frac{\mu_1 \alpha}{\mu_2 \beta} - \frac{\mu_2 \beta}{\mu_1 \alpha} \right) \cdot \text{sh}(\alpha l_2) \sin(\beta l_1) = \cos(ka) \quad (8)$$

由式(8)看出: 电子能量 E 与量子数 k (波矢) 有关, 也与系统的几何尺寸 l_1, l_2 有关, 而且会出现这种情况: k 取某些范围的值 E 时有实数解 (这种情况相应于容许带), 而 k 取另外一些范围的值 E 时没有实数解 (相应于电子禁带)。由于函数 $\cos(ka)$ 的周期性, 必然出现能带、禁带相互交替出现, 即形成能带结构。

3 电子能带结构的产生

由式(8)可以看出, 要由该式确定电子能量 E 随波矢 k 和线度 l_1, l_2 的明显变化关系是很困难的。注意到式(1)所示的相互作用势与克龙尼克 - 潘纳

(Kronig-Penney) 模型相同, 为了理解系统中电子能谱的主要特征, 采用 L. Kronig 和 G. Penney 对此模型采用的方法^[8], 为简化起见, 让 l_2 很小, 且讨论低能级情况, 这时可认为 $U_0 \rightarrow \infty$, 且又保证 $l_2 U_0$ 为有限值, 这时具有能量 $E < U_0$ 的电子由一个原胞向另一原胞穿透时几率为有限值。此时式(8)将写为

$$\cos(\beta a) + D \cdot \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} = \cos(ka) \quad (9)$$

其中 $D = \lim_{U_0 \rightarrow \infty, l_2 \rightarrow 0} \mu_1 \alpha^2 l_1 l_2 / 2\mu_2$ 。当电子能量较大时, $D \rightarrow 0$ 。由式(9)得到 $\beta \approx k$, 由式(7)求得电子的能量为

$$E \approx \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2\mu_1 R^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_2} \quad (10)$$

这里 $\lambda \equiv \lambda_{n_p, |m|}$; 对低能级情况, 势垒可视为无限高, $D \rightarrow \infty$, 能级为:

$$E = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2\mu_1 R^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu_1 a^2} \quad (11)$$

其中 $n = 1, 2, 3 \dots$ 为能级序号。令 $\text{tg} \gamma = D/\beta a$, 则式(9)可写为

$$\frac{\cos(\beta a - \gamma)}{\cos \gamma} = \cos(ka) \quad (12)$$

因为 $|\cos(ka)| \leq 1$ 所以式(9)具有能量实数解的条件为

$$\left| \cos(\beta a) + D \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} \right| \leq 1 \quad (13)$$

式(13)决定了能带的范围 (即在此范围内为允许带), 反之为禁带。

第 n 个能带的范围可由式(12)看出: 能带边界波矢 k 应满足 $\cos(ka) = \pm 1$, 即 $\cos(\beta a - \gamma) = \pm \cos \gamma$ 。利用三角函数性质知: $\beta a = n\pi$ 或 $\beta a - 2\gamma = n\pi$, ($n = 1, 2, \dots$) 因此第 n 个能带范围为: $(n-1)\pi + 2\gamma \leq \beta a \leq n\pi$, 而第 $(n+1)$ 个能带范围为: $n\pi + 2\gamma \leq \beta a \leq (n+1)\pi$ 。由此求得禁带宽度

$$\Delta_{\beta a} = 2\gamma = 2 \text{tg} \left(\frac{D}{\beta a} \right) \quad (14)$$

4 HgS/CdS 量子导线电子能带的结构特点

4.1 电子能量随波矢的变化

文献[7]给出 $U_0 = 1.2 \text{ eV}$, HgS 中电子的有效质量 $\mu_1 = 0.036 m_0$, CdS 中为 $\mu_2 = 0.2 m_0$, 这里 m_0 为电子的静止质量; 格点常数 $a_{\text{HgS}} = 5.851 \text{ \AA}$, $a_{\text{CdS}} = 5.818 \text{ \AA}$, 取 $R = 5a_{\text{HgS}}$, $a = 10a_{\text{HgS}}$ 作计算。对 $n_p = 1, m = 0$ 和 $n_p = 2, m = 0$ 情况的能带曲线分别如图 2 的 (a)、(b) 所示。为了说明磁量子数 m 的影响, 图中还画出了 $|m| = 1$ 的相应曲线 (虚线)。

由图 2 看出: 给定径向量子数 n_p 时, 磁量子数 $|m|$ 大的能量要比 $|m|$ 小的能量要大, 但能带宽度变窄。由 D 的定义和式(14) 还可看出: 随着 D 的增大 (意味

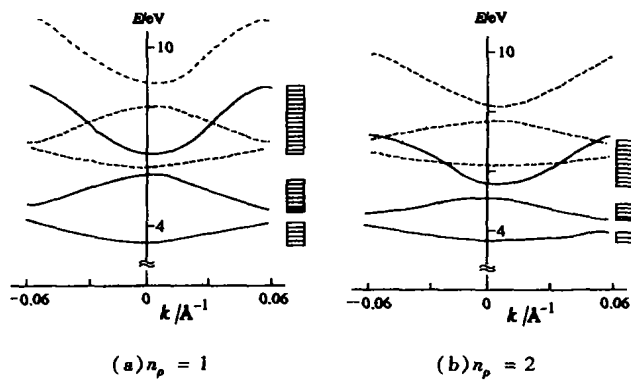


图2 (HgS/CdS)_nHgS 线状超晶格电子能量随波矢的变化 ($m = 0$ 为实线; $|m| = 1$ 为虚线)

着 μ_2/μ_1 和周期势周期 a 增大, $U_0 - E$ 增大), 电子的禁带宽度将增大, 而能带变窄, 也就是说, 低能量的能带宽度要比高能带的能带宽度小。

4.2 势阱和势垒宽度对电子能带的影响

现取 $R = 5a_{\text{HgS}}$, 而 l_1, l_2 取不同值对式(8)作计算。

对 $n_p = 1, m = 0$ 情况的结果见图3。

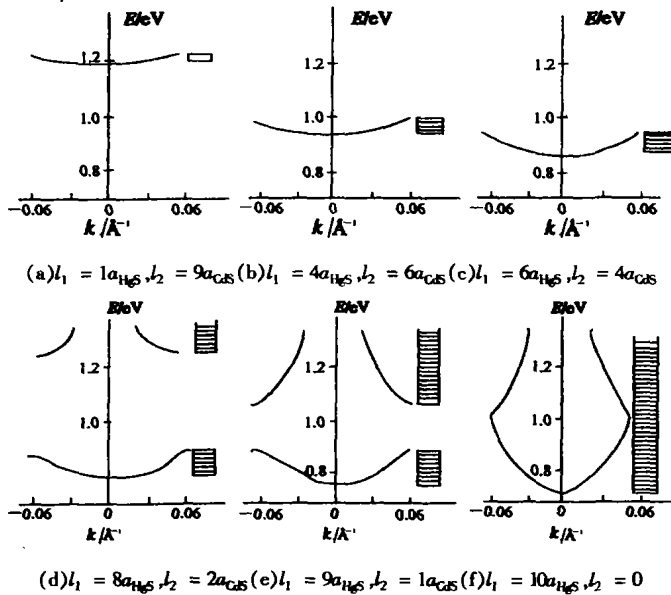


图3 不同阱宽(l_1)和势垒宽度(l_2)情况的电子能谱和带宽

由图3看出: 随着势阱宽度(l_1)的增大和势垒宽度(l_2)的减小, 能带底的能量($k = 0$)逐渐减小而宽度逐渐增大, 例如阱宽 $l_1 = 1a_{\text{HgS}}$, 垒宽 $l_2 = 9a_{\text{HgS}}$ 时, 带底能量 $E_{\text{min}} \approx 1.215 \text{ eV}$, 带宽 $\Delta E_1 = 0.1 \text{ eV}$; 而阱宽 $l_1 = 9a_{\text{HgS}}$, 垒宽 $l_2 = 1a_{\text{HgS}}$ 时, 带底能量 $E_{\text{min}} \approx 0.5 \text{ eV}$, 带宽 $\Delta E = 0.9 \text{ eV}$ 。当势阱宽度 $l_1 = 10a_{\text{HgS}}$, 势垒宽度 $l_2 = 0$ 时, 已无禁带出现, 能量最小值 $E_{\text{min}} \approx 0.15 \text{ eV}$ 。

4.3 圆柱截面大小对禁带宽度的影响

现取第1个禁带(即 $n = 1$ 到 $n = 2$ 的能带之间隔)作计算(取 $n_p = 1, m = 0$), 由式(14)求出第1禁带宽度 Δ 随线半径 R 的变化如图4所示。由图看出: 只有当 $R \approx 40 \text{ \AA}$ 左右时, 禁带宽度最大, 而当 R 增大到 80 \AA

时, 禁带宽度已很小。当 R 小于 20 \AA 时, 电子禁带宽度已趋于零。

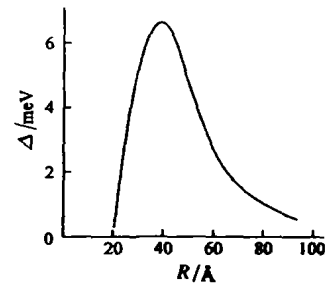


图4 (HgS/CdS)_nHgS 线状超晶格的第1禁带宽度随线半径的变化

6 结 论

1) 由两种不同介质构成的线状超晶格中电子的能量具有能带结构。其电子能量随波矢的变化和禁带宽度均与势阱和势垒宽度以及量子线的半径有关, 呈非线性变化关系。

2) HgS/CdS 圆柱状超晶格, 电子能量与径向量子数 n_p 、磁量子数 $|m|$ 有关: 给定 n_p 时, $|m|$ 大的能带位置比 $|m|$ 小的能带位置要高。

3) 相同 $n_p, |m|$ 的能带, 其带宽随势阱宽度增大和势垒宽度的减小而变宽, 带底位置下移。

4) 第1禁带宽度在线半径为 40 \AA 附近时最宽, 当圆柱半径小于 20 \AA 时, 禁带宽度几乎趋于零。

参考文献:

[1] 黄波. 固体材料及其应用[M]. 广州: 华南理工大学出版社, 1994.
 [2] MEWS A, KADAVANICH A V, BANIN U, et al. Structural and spectroscopic investigations of CdS/HgS/CdS quantum dot quantum wells[J]. Phys Rev, 1996, B53: 13 242 - 13 251.
 [3] 张立纲著. 分子束外延和异质结构[M]. 复旦大学表面物理研究室译. 上海: 上海师范大学出版社, 1998. 335 - 372.
 [4] ТКАИ В, ЛРОНИШИН И В, МАХАНЕЧ. Спектр электрона в квантовой сверхрешетке цилиндрической симметрии[J]. ФТТ, 1998, 40(3): 557 - 561.
 [5] SCHOSS D, MEWS A, FYCHMOLLER A, et al. Quantum dot quantum wells CdS/HgS/CdS: Theory and experiment[J]. Phys Rev 1994, B49: 17 072 - 17 079.
 [6] 程正富. 柱对称超晶格中电子能谱特征探讨[J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 1999, 24(4): 402 - 405.
 [7] ВОЙЧУК В Н, К УБАЙ Р Ю. Влияние Промежуточного спос пере менной от координаты диэлектрической пронидаемостью на энергию основного состояния электрона в сореринеской сложной наногетер осистема[J]. ФТТ, 2001, 43(2): 226 - 232.
 [8] 基特尔 C 著. 固体物理导论[M]. 杨顺华译. 北京: 科学出版社, 1979. 209 - 211.

(下转第 86 页)

Application of TMS320C6201 to Intelligent Active Security System

HUANG Xi-yue¹, ZHU Lei^{1,2}, YANG Jing², LI Qiong¹

(1. College of Automation, Chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. Kelanayi Enstitute of Technology, Xijiang 833600, China)

Abstract: With the development of car industry and carrying trade, serious traffic accident threatens the safety of people and property. It proves the essentiality and instancy of developing the intelligent active security system. The system based on the DSP, can overcome the flaw of the system based on the radar, microwave and ultrasonic. With the TMS320C6201 DSP and the algorithm of computer vision and mode identity, it can find the rode, roadblock and the distance of road-block. With small volume, portable, easy install, adaptability with atrocious environment and low price, the system can meet the desire of practicability. A lot of experiment prove that the design of the system is advanced and reasonable, and can be adapted to the intelligent aided drive of all kinds of car. The system has the good value of popularize and employ.

Key words: active security; data information processing; image processing

(编辑 吕赛英)

(上接第 82 页)

The Electronic Energy - band Structures of (HgS/CdS)_n HgS Linear Superlattice

ZHENG Rui-lun¹, TIAN De-xiang¹, ZHENG Yong-lin²

(1. Department of Physics, Southwest Normal University, Chongqing 400715, China;

2. Department of Physics, Fuling Normal University, Fuling Chongqing 408003, China)

Abstract: The schrödinger equation of the linear superlattice systems toward axial line composed of two kinds of materials has been built, and it has been solved. The potential and potential barrier width on the influence of electronic spectrum is researched. It shows that there are energy-band structures in linear superlattice system toward axial iine. The lower energy-band width is smaller than higher energy-band width does. The increase of potential well width and the decrease of the potential barrier will make the energy band bottom lower and the energy band width increase. The first order forbidden energy-band width is the biggest when cylindrical radius is about 40 Å.

Key words: (HgSCdS)_n HgS linear superlattice; energy-band structures; electronic energy spectrum

(编辑 张 革)