

文章编号: 1007-4627(2007)03-0243-04

电子在圆柱形半导体量子线中的行为研究*

郭志超, 王光灿, 曹胜男

(云南大学物理科学技术学院, 云南 昆明 650091)

摘要: 用计算一维势阱波函数的方法简化了圆柱形量子线波函数的计算, 得出了量子线中电子的能态、能级图和波函数。在确定温度条件下, 讨论了量子线的线宽与它的光谱蓝移、能级分离或兼并以及电子能态的关系。

关键词: 圆柱形半导体量子线; 波函数; 能态

中图分类号: O571.5 **文献标识码:** A

1 引言

具有量子效应的低维半导体材料是一种人工构造(通过能带工程实施)的新型半导体材料, 是新一代微电子、光电子器件和电路的基础, 纳米技术是制造这些材料的重要途径。纳米技术的提出是在 20 世纪 50 年代末著名的物理学诺贝尔奖获得者 R. Feynman 的超前设想: 人类用宏观机器制造比其小的机器, 然后用其再造更小机器, 如此下去, 直到人们可以按自己意愿排列原子, 制造产品。1984 年, Gleiter 教授率先在实验室制得 Pd, Cu 和 Fe 等金属纳米材料^[1, 2]。1962 年, 日本物理学家 Kubo (久保)对金属超细微粒进行了研究, 提出了著名的久保理论^[2], Halperin 对这一理论又进行了比较全面的归纳。之后, Esaki 和 Tsu 提出了超晶格概念, 称在超晶格中分裂的子带为“布里渊区的折叠”, 解释了宏观上的负阻效应。随之人们发现的低维材料的量子尺寸效应、量子干涉效应、量子隧穿效应和库仑阻效应以及非线性光学效应等, 在微观上的解释都基于上述理论及量子理论和固体理论^[3-6]。

目前, 基于低维半导体量子材料的微结构的固态纳米器件, 虽然仍处在初步研究阶段, 但极有可能触发微电子、光电子技术领域新的革命。低维量子器件的制造依赖于低维结构材料生长和纳米加工技术的进步, 而纳米结构材料的性能又决定器件的性能。半导体量子线是低维纳米材料领域中有潜在

广泛应用的部分, 对其激子的能级、能态和能隙研究有重大意义^[5-7]。文献[8]取长方体量子线为模型进行研究。我们认为在人工合成量子线时, 由于微观领域的能量最小原理, 在原子沉积自组装成量子点、量子线时, 多数形成球形或圆柱形。文献[7, 9]以复合圆柱形的量子线为模型进行研究, 文献[10, 11]以单一圆柱形量子线进行研究。这两类文章在研究量子线的激子时采用在柱坐标下解薛定谔方程, 然后得到电子或空穴的能量表达式。它们的计算均较复杂, 而且它们都没给出量子线中激子的波函数表达式。

基于以上几点, 本文针对圆柱形半导体量子线中电子能态进行研究, 用简化成一维的量子阱进行能量运算, 得到量子线中的电子能级图, 并且给出量子线中电子的波函数表达式。

2 物理模型

稳定状态下的半导体量子线没有自由电子, 原子的电子受外界作用而发生能级跃迁, 电子成为导带电子。原子核与其外面的部分电子形成类原子实, 相当于在原来价带上留下带正电的空穴。半导体量子线中的激子可以理解成束缚的电子-空穴对。从价带激发到导带的电子是自由的, 在价带自由运动的空穴和在导带自由运动的电子, 通过微弱的库仑相互作用束缚在一起(其实就是原子核与被激发

* 收稿日期: 2007-01-09; 修改日期: 2007-07-09

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10064066); 云南大学理(工)科校级科研资助项目(2004Q008A)

作者简介: 郭志超(1981-)男(汉族), 河南汝州人, 硕士研究生, 从事凝聚态物理纳米材料制作与模拟研究;

E-mail: guozhichao610@sina.com

电子之间的相互作用)。空穴处于电子激发前的能级上, 我们只研究电子, 且在半导体量子线中电子相对较少, 且忽略电子之间的相互作用。取半径为 R 的半导体量子线, 建立柱坐标系, 如图 1 所示。

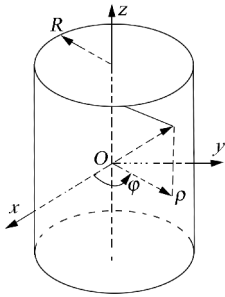


图 1 半径为 R 的半导体量子线

设电子的势能为 U , 这个势能就是所有原子在空间共同作用的结果。电子的有效质量为 m , 它是距轴线距离 ρ 的函数, 在不同的介质中有不同的值。电子在量子线中满足的薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(\rho)} \nabla + U \right] \Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z) \quad (1)$$

由于轴对称性, 可将解写为如下形式:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = A\psi(\rho)\exp(il\varphi)\exp(ikz), \quad l=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2)$$

式中, A 为归一化常数, l 为磁量子数, k 为波矢。把(2)式带入(1)式可得方程:

$$\psi''(\rho) + \frac{1}{\rho}\psi'(\rho) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - K^2 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) \psi(\rho) = 0, \quad (3)$$

这是完全关于距轴线距离 ρ 的贝塞尔方程, 也就是波函数的径向方程。代数法直接解方程(3)得不到解析解, 在我们的模型中做以下分析: 电子在量子线中运动时, 在 z 轴方向上不受限制, 而在与底面平行的面上受限制^[7, 11], 也即电子在量子线中运动到边界时受到表面势垒限制。对于电子来说其运动在如图 2 的势阱中, 这样解(3)式也就是要知道电子的径向分布函数。如此在量子线上取平行于底面的任意截面如图 3 所示, 取截面上的任意直径 AB , 当量子线在稳定的瞬间状态下, 截面上的所有电子的径向分布都可用 AB 描述。这样解方程(3), 可以简化为求解一维量子阱的波函数。

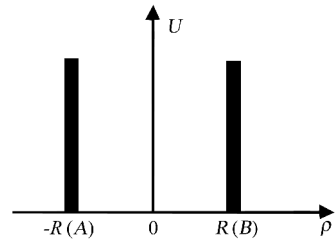


图 2 量子线的势能

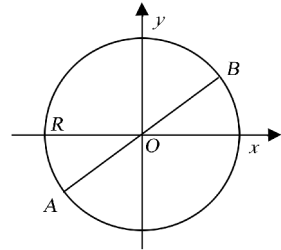


图 3 与底面 xOy 平行的截面

3 计算结果

在以上简化处理下, 电子运动时在量子线内的势能为 0, 在量子线侧壁的势垒为 U , 其数值等于逸出功。量子线的势能如图 2 所示, 电子在势阱内的有效质量为 m^* , 势能为

$$U = \begin{cases} 0, & |\rho| < R \\ U \gg 0, & |\rho| = R \end{cases} \quad (4)$$

在势阱内体系满足薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{d\rho^2} = E\psi, \quad |\rho| < R \quad (5)$$

在势阱壁上体系满足薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{d\rho^2} + U\psi = E\psi, \quad |\rho| = R \quad (6)$$

当量子线定态时, 由于表面势能限制, 电子不会跑出量子线。根据波函数应满足的连续性和有限性条件, 只有在 $\psi=0$ 时, (6)式才有意义^[12]。因此(5)式要满足的边界条件为

$$\psi = 0, \quad |\rho| \geq R \quad (7)$$

同时对(5)式化简可得:

$$\frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \beta^2\psi = 0, \quad |\rho| < R \quad (8)$$

其中 $\beta = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ 。

设(8)式的解为

$$\psi = A\sin(\beta\rho) + B\cos(\beta\rho), \quad |\rho| < R \quad (9)$$

由(7), (9)两式可得:

$$\begin{cases} A\sin(\beta R) + B\cos(\beta R) = 0, \\ -A\sin(\beta R) + B\cos(\beta R) = 0, \end{cases}$$

则有:

$$\begin{cases} A\sin(\beta R) = 0, \\ B\cos(\beta R) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

A 和 B 不可同时为 0, 否则没有物理意义。故可得如下解:

$$A = 0, \cos(\beta R) = 0, \quad (11)$$

$$B = 0, \sin(\beta R) = 0, \quad (12)$$

从而可得:

$$\beta R = \frac{n\pi}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

再把(13)式代入(8)式可得:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8m^* R^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (14)$$

上式是量子线中电子的能量表达式。电子的能量与所在量子阱的宽度有关, 并且在量子线中能量是分立的。把(11)和(12)式代入(9)式并结合(13)和(7)式可得:

$$\psi_n = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{R}} \sin \left[\frac{n\pi}{2R}(\rho + R) \right], & |\rho| < R \\ 0, & |\rho| \geq R \end{cases} \quad (15)$$

则电子在宽为 $2R$ 的量子阱中定态波函数^[13]是:

$$\psi_n(\rho, t) = \frac{1}{\sqrt{R}} \sin \left[\frac{n\pi}{2R}(\rho + R) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (16)$$

进一步可得量子线中电子的定态波函数是:

$$\Psi(\rho, \varphi, z, t) = \sum_n A \psi(\rho) \exp(i l \varphi) \exp(i k z) \cdot \exp(E_n t / i \hbar), \quad (17)$$

式中

$$A \psi(\rho) = \frac{1}{\sqrt{R}} \sin \left[\frac{n\pi}{2R}(\rho + R) \right].$$

(16)和(17)式中 t 是时间。

4 讨论

由时间和能量的测不准关系, 可求得电子的寿命 τ ^[9]。根据久保理论^[2], 量子线中的电子能否自由移动成为载流子, 与量子线的温度 $T(\delta \propto k_B T)$ 、量子线的直径 $d(d \propto k_B / \delta)$ 和电子的寿命 τ 有关。当低微材料的直径小到微粒存在不连续的、最高被占据分子轨道和最低未被占据分子轨道能级时, 就是金属也要变成绝缘体。这里讨论计算的半导体量子

线的直径相对较大。这里研究的量子线中电子能量只在垂直于轴的方向, 实际的电子能量应该为 $E = E_{\perp} + E_{\parallel}$, 在稳定状态时与轴平行能量分量较小^[7]。

由(14)式, 可得出量子线的电子能级图。图4给出了 Si 量子线电子的前3个能级图。与文献[7, 14]相符, 分析图4可得到:

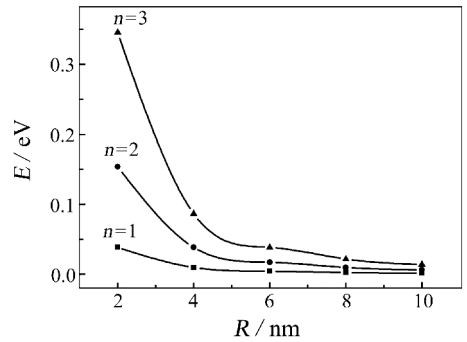


图4 Si量子线的电子能级 E_n -R 图

(1) n 越大的能量线距坐标原点越远。在量子线内电子能级是分立的, 当量子线较宽时能级就要兼并^[14]。量子线在平衡状态时由于受到表面势能 U 限制^[9], 电子不能自由跑出量子线。但是当电子受激发从一个能级跃迁时, 电子成为导带电子, 同时在原来价带上留下导电空穴。当电子得到能量大于量子线表面势能 U 时, 则电子才可能跑出量子线, 即发生了光电效应。电子能级跃迁时, 吸收的能量要满足 $E_{n+i} - E_n$ 。

(2) 在同一个 n 上, E_n 随着量子线直径变小而变大, 随着量子线直径的增大而减小, 即半导体量子线直径越小它的吸收光谱或者发射光谱能量越大, 也就是半导体纳米材料吸收光谱和荧光光谱发生蓝移的微观原因, 已经被实验证实。

(3) 当 $n=0$ 时, 即电子处于束缚态, 此时, 半导体量子线中没有自由电子。半导体处于绝缘状态。要使半导体量子线导电, 就要有运动电子作为载流子, 电子要吸收的最小能量为 $n=1$ 时

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m^* R^2}.$$

5 小结

用计算一维势阱波函数的方法简化了圆柱形量子线波函数的计算, 与直接解柱坐标系中薛定谔方程的方法相比, 运算的复杂度大大降低, 并且得到

量子线中电子的能态。所得结果与相关文献[7]报道的量子线中的电子能态一致。进一步得到了量子线中的电子能级与量子线宽的关系(见图 4),与文献[11]的结论一致。并由图可从微观上解释量子线的蓝移、能级分离与兼并和量子线宽的关系,并给出了圆柱形量子线的波函数表达式。

参考文献 (References):

- [1] Wang Zhanguo. World Science and Technology Research and Development, 2000(1), **22**(1): 4(in Chinese).
(王占国. 世界科技研究与发展, 2000, **22**(1): 4.)
- [2] Ni Xingyuan, Shen Jun, Zhang Zhihua. Nanometer Material Physics and Chemistry Characteristic and Application. Beijing: Chemical Industry Press, 2006, 1—5, 35—44(in Chinese).
(倪星元, 沈 军, 张志华. 纳米材料的理化特性与应用. 北京: 化学工业出版社, 2006, 1—5, 35—44.)
- [3] Futianxiaozhi, Yuanzhenerlang. Application Physics(Japan), 1998, **67**(7): 760—778.
- [4] Liu Jianjun, Su Hui, Yang Guochen. Chinese Journal of Semiconductors, 2002, **23**(9): 925(in Chinese).
(刘建军, 苏 会, 杨国琛. 半导体学报, 2002, **23**(9): 925.)
- [5] Zhang Zhongtai, Zhang Junying. Inorganic Photoluminescence Material and Application. Beijing: Chemical Industry Press, 2005, 53—67(in Chinese).

- (张中太, 张俊英. 无机光致发光材料及应用. 北京: 化学工业出版社, 2005, 53—67.)
- [6] Tain Qiang, Tu Qingyun. State of Aggregation Physics Progress. Beijing: Science Press, 2005, 61—71(in Chinese).
(田 强, 涂清云. 凝聚态物理学进展. 北京: 科学出版社, 2005, 61—71.)
- [7] Tkach M, Holovatsky V, Voitsekhivska O. Physica, 2001, **E11**: 17.
- [8] John Petera A, Navaneethakrishnan K. Physica, 2002, **E15**: 153.
- [9] Tkach M, Holovatsky V. Physics, Semiconductors (Russian), 2000, **34**: 2 014.
- [10] Escorcia R A, Riva C, Mikhailov I D. Solid State Communications, 2004, **131**: 365.
- [11] David Crouse, Michael Crouse. SCI Infrared Physics & Technology, 2006, **48**: 227.
- [12] Zhou Shixun, Quantum Mechanics. Beijing: Peoples Education Press, 1979, 247—248(in Chinese).
(周世勋. 量子力学教程. 北京: 人民教育出版社, 1979, 247—248.)
- [13] Zhou Shixun, Quantum Mechanics. Beijing: Peoples Education Press, 1979, 35—37(in Chinese).
(周世勋. 量子力学教程. 北京: 人民教育出版社, 1979, 35—37.)
- [14] Biswajit Das, Pavan Singaraju. Infrared Physics & Technology, 2005, **46**: 209.

Study of Electronic Action in Cylindrical Semiconductor Quantum Wire*

GUO Zhi-chao¹⁾, WANG Guang-can, CAO Sheng-nan

(School of Physical Science and Technology, Yunnan University, Kunming 650091, China)

Abstract: The wave function of column quantum wires has been calculated with the means of calculation for the quantum wave function in one-dimensional potential well. The energy state, energy level diagram and wave function of column quantum wire have gained. Under assured temperature, the relations of column quantum wire diameter to its spectrum blue shift, separation or annexation of energy level, and electrons energy state have been discussed.

Key words: cylindrical semiconductor quantum wire; wave function; energy state

* Received date: 9 Jan. 2007; Revised date: 9 Jul. 2007

* Foundation item: National Natural Science Foundation of China(10064066); School Scientific Research Foundation of Yunnan University Science and Technology(2004Q008A)

1) E-mail: guozhichao610@sina.com