

12,01

## Энергия Ферми металлической нанопроволоки эллиптического сечения

© А.В. Коротун

Запорожский национальный технический университет,  
Запорожье, Украина

E-mail: andko@zntu.edu.ua

(Поступила в Редакцию 16 декабря 2013 г.)

Теоретически исследовано влияние геометрической формы поперечного сечения на энергетические характеристики металлической нанопроволоки. В рамках модели бесконечно глубокой потенциальной ямы с использованием теории возмущений рассчитаны размерные осцилляции энергии Ферми. Вычисления проведены для Au и Al. Показано, что в первом порядке теории возмущений „эллиптичность“ поперечного сечения при малом эксцентриситете можно учесть модификацией граничных условий для радиальной волновой функции электронов.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Украины (проект № 04313).

### 1. Введение

Металлические 1D-системы являются предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований последних лет [1–7]. Расчет энергетического спектра в таких наносистемах, как правило, выполняют в рамках моделей, которые лучше описывают особенности их геометрической формы. Для цилиндрических квантовых проволок существуют точные решения уравнения Шредингера, позволяющие определить энергетический спектр и размерную зависимость энергии Ферми [8,9]. Еще одной задачей, допускающей нахождение точных решений, является задача о расчете энергетического спектра электронов в эллиптической квантовой проволоке [10]. Эта задача интересна еще и тем, что сечение реальных металлических нанопроволок вследствие действия поперечных напряжений или поперечного давления близко к эллиптическому. Для эллиптической квантовой ямы с бесконечно высокими стенками и произвольной величиной эксцентриситета существуют точные решения уравнения Шредингера [11].

Использование указанных выше подходов для расчета энергии Ферми и оптических характеристик эллиптической квантовой проволоки с малым эксцентриситетом является неэффективным ввиду отсутствия удобных асимптотик функций Матье и большого объема необходимых расчетов.

Целью настоящей работы является исследование влияния геометрии поперечного сечения нанопроволок на размерную зависимость энергии Ферми. Для этого используются метод возмущения формы границы и „стандартный“ подход теории возмущений, когда оператор возмущения входит в гамильтониан. Аналогичные идеи используются в ядерной физике для расчета энергетических уровней деформированного ядра [12], в механике деформированного твердого тела для расчета смещений, деформаций и напряжений в окрестности

полостей различной геометрической формы: эллиптических цилиндров, эллипсоидов [13], а также в физике низкоразмерных систем для расчета влияния деформации формы сферического нанообъекта на квантовые состояния находящейся в нем частицы [14].

### 2. Энергетический спектр электронов в эллиптической квантовой проволоке с малым эксцентриситетом

В общем случае волновые функции и энергетический спектр электронов в металлической проволоке, имеющей форму эллиптического цилиндра, нужно рассматривать в эллиптической цилиндрической системе координат. Однако в случае эллиптического сечения с малым эксцентриситетом ( $\varepsilon = \sqrt{1 - b^2/a^2} \ll 1$ ,  $a$  и  $b$  — соответственно большая и малая полуоси эллипса) эту задачу можно решать в цилиндрической системе координат с „возмущенными“ граничными условиями. За нулевое приближение примем радиальную волновую функцию электрона в цилиндрической квантовой проволоке [9]

$$R_{mn}(\rho) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 |L'_m(k_{mn}\rho_0)|} I_m(k_{mn}\rho), \quad (1)$$

где  $\rho_0 = (a+b)/2$  — эффективный радиус;  $k_{mn} = a_{mn}/\rho_0$ ;  $a_{mn}$  — положительные нули функции Бесселя  $m$ -го порядка  $I_m(\xi)$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ ; штрих означает производную по  $\xi$ .

Вследствие малости эксцентриситета эллиптического сечения проволоки значения волновой функции на границе можно разложить в ряд Тейлора по степеням эксцентриситета. Ограничиваясь первыми двумя членами разложения, граничное условие для случая эллиптического

ского цилиндра можно записать в виде

$$I_m(k_{mn}\rho_0)\varepsilon\rho_0 \left. \frac{dI_m(k_{mn}\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_0} = 0. \quad (2)$$

Используя рекуррентные соотношения для производной от функции Бесселя и функций Бесселя  $(m-1)$ - и  $(m+1)$ -го порядков [15], получим уравнение

$$(1 + \varepsilon m)I_m(k_{mn}\rho_0) - \varepsilon k_{mn}\rho_0 I_{m+1}(k_{mn}\rho_0) = 0. \quad (3)$$

Таким образом, соотношение (3) определяет спектр электронов в эллиптической квантовой проволоке с малым эксцентриситетом.

Для использования „стандартного“ подхода теории возмущений необходимо получить выражение для оператора возмущения. С этой целью запишем оператор Лапласа в эллиптической цилиндрической системе координат, а затем перейдем к цилиндрической системе координат. При этом в низшем по  $\varepsilon$  приближении поправка на эллиптичность имеет вид (см. приложение)

$$\Delta' = 2\varepsilon^2 \cos^4 \varphi \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}. \quad (4)$$

Выражение (4) указывает на то, что если использовать в этом случае цилиндрическую систему координат, то разделение переменных в уравнении Шредингера невозможно. Однако вследствие того что  $\Delta' \sim \varepsilon^2$ , этим возмущением можно пренебречь по сравнению с возмущением в граничных условиях, пропорциональным  $\varepsilon$ .

Энергия Ферми определяется путем подсчета числа занятых электронных состояний в проволоке с учетом размерного квантования [9]

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 \rho_0^2} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - \left(\frac{a_{mn}}{\rho_0}\right)^2}, \quad (5)$$

где суммирование проводится по всем значениям  $m$  и  $n$ , для которых

$$a_{mn} < k_F \rho_0, \quad (6)$$

и считается, что концентрация электронов  $\bar{n}$  в проволоке такая же, как и в 3D-металле.

### 3. Оценки поправок к собственным значениям энергии электрона

Собственные значения энергии электрона в 1D-металлической системе определяются соотношением

$$E_{mn} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^2}{2m_e}, \quad (7)$$

где  $m_e$  — масса свободного электрона, а для  $k_{mn}$  можно записать разложение по степеням эксцентриситета

$$k_{mn} = k_{mn}^{(0)} + \varepsilon k_{mn}^{(1)} + \varepsilon^2 k_{mn}^{(2)} + \dots \quad (8)$$

Следовательно, поправка первого порядка к энергетическому спектру может быть представлена в виде

$$E_{mn}^{(1)} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^{(0)} \varepsilon k_{mn}^{(1)}}{2m_e}. \quad (9)$$

Для оценки величины  $k_{mn}^{(1)}$  воспользуемся уравнением (3), из которого получим

$$m I_m(k_{mn}^{(1)} \rho_0) = k_{mn}^{(1)} \rho_0 I_{m+1}(k_{mn}^{(1)} \rho_0).$$

Подставляя вместо функций Бесселя асимптотические выражения для случая  $\xi \ll 1$  [15]

$$I_m(\xi) = \left(\frac{\xi}{2}\right)^m \frac{1}{\Gamma(m+1)},$$

для поправки к энергии электрона в эллиптической квантовой проволоке окончательно будем иметь

$$E_{mn}^{(1)} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^{(0)} \varepsilon}{2m_e} \frac{\sqrt{2m(m+1)}}{\rho_0}. \quad (10)$$

Найдем теперь поправку к энергии в низшем порядке теории возмущений как среднее значение оператора возмущения

$$\hat{\mathcal{H}}' = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta', \quad (11)$$

используя формулы для волновой функций и комплексно-сопряженной с ней волновой функции, полученные в [9],

$$\begin{aligned} \psi_{mnp}^{(0)} &= \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 |I'_m(k_{mn}\rho_0)|} I_m(k_{mn}\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{L}}} e^{ik_{z\rho}z}, \\ \psi_{mnp}^{(0)*} &= \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 |I'_m(k_{mn}\rho_0)|} I_m(k_{mn}\rho) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\varphi} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{L}}} e^{-ik_{z\rho}z}. \end{aligned}$$

В результате можно записать

$$E_{mnp}^{(1)} = -\frac{3\hbar^2 \varepsilon^2}{8m_e \rho_0^2} \frac{I_m^2(k_{mn}\rho_0)}{I_m'^2(k_{mn}\rho_0)}. \quad (12)$$

Если  $k_{mn}\rho_0 \ll 1$ ,  $m$  — фиксированное, то можно воспользоваться асимптотиками для функций Бесселя и их производных. Тогда

$$\frac{I_m^2(k_{mn}\rho_0)}{I_m'^2(k_{mn}\rho_0)} = \frac{k_{mn}^2 \rho_0^2}{m^2}. \quad (13)$$

Подставляя (13) в (12), получаем

$$E_{mnp}^{(1)} = -\frac{3\hbar^2 \varepsilon^2}{8m_e} \frac{k_{mn}^2}{m^2}. \quad (14)$$

Таким образом, поправка к собственным значениям энергии, полученная с использованием „стандартной“ теории возмущений, пропорциональна  $\varepsilon^2$ , и в первом порядке теории ее можно не учитывать.

#### 4. Результаты вычислений и их обсуждение

Расчеты были выполнены для проволок из золота и алюминия с концентрацией электронов  $\bar{n} = 3/4\pi r_s^3$  с соответствующим значением  $r_s = 3.01a_0$  и  $2.07a_0$ .

На рисунке, *a* представлена размерная зависимость энергии Ферми круговой (кривая 1) и эллиптической (кривые 2 и 3) проволок Au, нормированная на энергию Ферми 3D-металла  $\varepsilon_F^0$ . На размерной зависимости энергии Ферми проволок зубец (т.е. скачок производной  $d\varepsilon_F/d\rho$ ) появляется тогда, когда увеличивающийся эффективный радиус  $\rho_0$  принимает такое значение  $\rho_{0m'n'}$ , при котором условие (6) начинает выполняться еще для одной пары чисел ( $m'$ ,  $n'$ ):

$$a_{m'n'} = k_F \rho_{0m'n'}$$

Расстояние между соседними зубцами

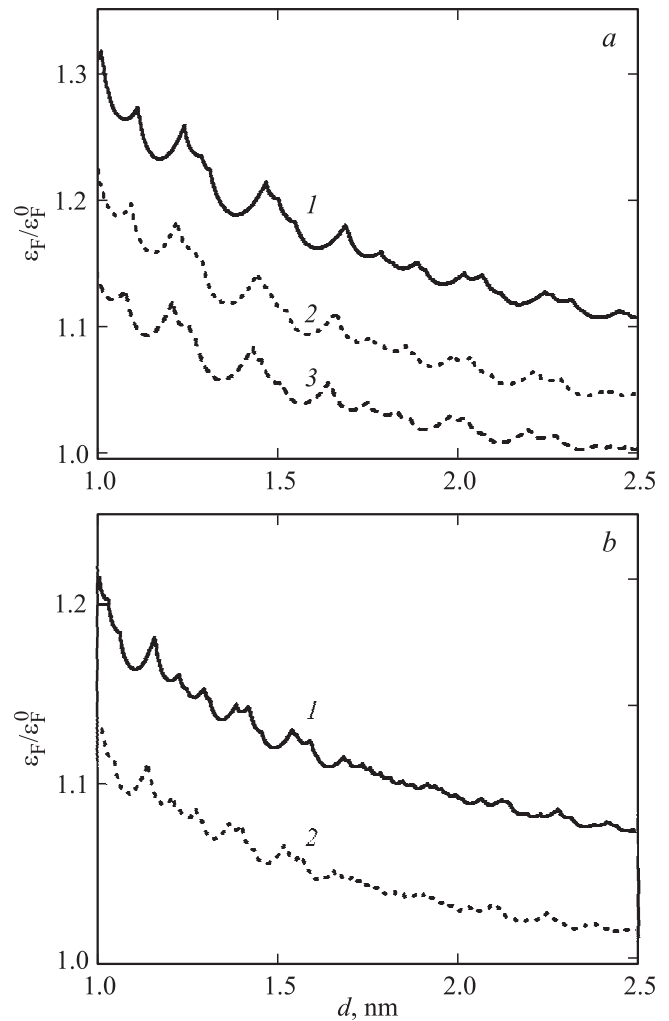
$$\Delta d \approx \frac{2(a_{m'n'} - a_{mn})}{k_F^0}$$

получается при наложении корней функций Бесселя разных порядков и изменяется на первый взгляд случайно [9].

Качественно зависимости  $\varepsilon_F(d)$  для круговой и эллиптической проволок подобны. Так, с увеличением эффективного диаметра  $d$  „период“ и амплитуда осцилляций уменьшаются и стремятся к нулю. Влияние геометрии поперечного сечения проволоки проявляется в уменьшении величины энергии Ферми с ростом эксцентриситета, что обусловлено снижением энергетических уровней и уменьшением расстояния между ними. В целях тестирования поведения кривых на рисунке можно проследить поведение уровня  $E_\alpha = \pi^2 \hbar^2 \alpha^2 / (2m_e a_0^2)$  при  $\alpha = 1$  для проволоки квадратного сечения  $a_0^2 = \text{const}$ , когда она вытягивается в прямоугольную проволоку того же сечения  $a_x a_y = a_0^2$ . При такой деформации энергетическая щель между подзонами уменьшается, т.е. весь спектр сдвигается вниз по шкале энергий, что качественно соответствует рисунку.

Рисунок демонстрирует также влияние величины эксцентриситета на размерные осцилляции энергии Ферми (кривые 2 и 3). С увеличением эксцентриситета в 2 раза энергия Ферми уменьшается, происходит незначительное снижение амплитуды осцилляций и сдвиг максимумов и минимумов вправо.

На рисунке, *b* изображены аналогичные зависимости для проволок Al, для которых уменьшение амплитуды осцилляций и смещение максимумов более существенные. Особенности размерной зависимости энергии Ферми проволок разных металлов объясняются исключительно разными значениями  $k_F^0$ . Так, для проволоки Al по сравнению с проволокой Au масштаб  $\Delta d$  осцилляций мельче, поскольку большая плотность распределения корней  $a_{mn}$ , примерно равная  $k_F^0 \rho_0 / \pi$ , амплитуда меньше, а сглаженное значение  $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0$  ниже.



Размерная зависимость энергии Ферми нанопроволок Au (*a*) и Al (*b*) с различным эксцентриситетом:  $\varepsilon = 0$  (1), 0.05 (2) и 0.1 (3).

#### 5. Заключение

В работе исследовано влияние геометрии поперечного сечения на энергетические характеристики 1D-металлических систем. В модели свободных электронов получены размерные зависимости энергии Ферми эллиптических нанопроволок с малым эксцентриситетом. Доказано, что изменение формы поперечного сечения в первом порядке теории возмущений можно учесть путем модификации граничного условия для радиальной волновой функции электронов в круговой проволоке. Показано, что деформация кругового сечения приводит к уменьшению энергии Ферми, что обусловлено снижением энергетических уровней и уменьшением расстояний между ними. С ростом эксцентриситета энергия Ферми уменьшается, происходит незначительное снижение амплитуды осцилляций и сдвиг максимумов и минимумов вправо, причем для проволоки Al эти эффекты выражены ярче.

Автор благодарит В.В. Погосова и И.Н. Титова за полезные обсуждения результатов работы.

## Приложение. Вывод формулы для оператора возмущения

Для получения выражения оператора возмущения необходимо оператор Лапласа, записанный в эллиптической цилиндрической системе координат (ЭЦСК)  $(\xi, \eta, z)$ ,

$$\Delta = \frac{1}{f^2(\text{sh}^2 \xi + \sin^2 \eta)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{П1})$$

выразить через переменные цилиндрической системы координат (ЦСК)  $(\rho, \varphi, z)$ , используя связи между ними:

$$\begin{aligned} \rho &= f \sqrt{\text{ch}^2 \xi \cos^2 \eta + \text{sh}^2 \xi \sin^2 \eta}, \\ \varphi &= \arctg(\text{tg} \eta \text{th} \xi), \end{aligned} \quad (\text{П2})$$

где  $f = \sqrt{a^2 - b^2}$  — фокусное расстояние,  $\varepsilon = 1/\text{ch} \xi$  — эксцентриситет.

Выражая производные первого и второго порядков по координатам ЭЦСК через производные по координатам ЦСК с использованием связей (П2), после достаточно громоздких преобразований получаем выражение для оператора Лапласа в ЭЦСК, записанное через производные ЦСК,

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1 - \varepsilon^2 + \varepsilon^4 \cos^2 \eta \sin^2 \eta}{(1 - \varepsilon^2 \sin^2 \eta)(1 - \varepsilon^2 \cos^2 \eta)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &+ \frac{(1 - \varepsilon^2 \cos^2 \eta) \cos^2 \eta + (1 - \varepsilon^2)(1 - \varepsilon^2 \cos^2 \eta)(1 - \cos^2 \eta)}{1 - \varepsilon^2 + \varepsilon^4 \cos^2 \eta \sin^2 \eta} \\ &\times \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}. \end{aligned} \quad (\text{П3})$$

Упрощая формулу (П3), перепишем оператор Лапласа в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1 - (1 - 2 \cos^4 \eta) \varepsilon^2 + \varepsilon^4 \cos^2 \eta \sin^2 \eta}{1 - \varepsilon^2 + \varepsilon^4 \cos^2 \eta \sin^2 \eta} \\ &\times \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (\text{П4})$$

Сравнивая выражение (П4) с оператором Лапласа в ЦСК, можно записать для геометрической поправки (поправки на эллиптичность)

$$\Delta' = \frac{2\varepsilon^2 \cos^4 \eta}{1 - \varepsilon^2 + \varepsilon^4 \cos^2 \eta \sin^2 \eta} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}.$$

В низшем по  $\varepsilon$  порядке теории возмущений эта поправка равна

$$\Delta' = 2\varepsilon^2 \cos^4 \eta \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}. \quad (\text{П5})$$

В том же порядке теории возмущений можно считать, что  $\cos^4 \eta = \cos^4 \varphi$ . Таким образом, поправка на эллиптичность принимает вид (4).

## Список литературы

- [1] F. Neubrech, T. Kolb, R. Lovrincic, G. Fahsold, A. Pucci. Appl. Phys. Lett. **89**, 253 104 (2006).
- [2] O.L. Muskens, V. Giannini, J.A. Sanchez-Gil, J. Gomez Rivas. Nano Lett. **7**, 9, 2871 (2007).
- [3] M. Klevenz, F. Neubrech, R. Lovrincic, M. Jalochowski, A. Pucci. Appl. Phys. Lett. **92**, 133 116 (2008).
- [4] A. Klein, A. Schmidt, W. Meyer, L. Hammer, R. Heinz. Phys. Rev. B **81**, 115 431 (2010).
- [5] A. Belardini, F. Pannone, G. Leahu, M.C. Larciprete, M. Centini, C. Sibilica, C. Martella, M. Giordano, D. Chiappe, F. Buatier de Mongeot. J. Eur. Opt. Soc. **7**, 12 051 (2012).
- [6] K. Yaji, I. Mochizuki, S. Kim, Y. Takeichi, A. Harasawa, Y. Ohtsubo, P. Le Févre, F. Bertran, A. Taleb-Ibrahimi, A. Kakizaki, F. Komori. Phys. Rev. B **87**, 241 413 (2013).
- [7] Ch.-L. Hsu, G. Ardila, P. Benec. Eur. Phys. J. Appl. Phys. **63**, 14 406 (2013).
- [8] П.М. Томчук. УФЖ. **47**, 833 (2002).
- [9] В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, А.В. Бабич, В.В. Погосов. ФТТ **51**, 2371 (2009).
- [10] V. Seleznev, H. Yamaguchi, Y. Hirayama, V. Prinz. Jpn. J. Appl. Phys. **42**, L791 (2003).
- [11] M. Van den Broek, F.M. Peeters. Physica E **11**, 345 (2001).
- [12] А.Б. Мигдал. Качественные методы в квантовой теории. Наука, М. (1975). 336 с.
- [13] А.Н. Гузь, Ю.Н. Немиш. Метод возмущения формы границы в механике сплошных сред. Вища шк., Киев (1989). 352 с.
- [14] В.П. Дзюба, Ю.Н. Кульчин, В.А. Миличко. ФТТ **56**, 355 (2014).
- [15] Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. Наука, М. (1979). 832 с.