

# Энергия Ферми и оптическая проводимость квантовых металлических нитей

© В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, А.В. Бабич, В.В. Погосов

Запорожский национальный технический университет,  
Запорожье, Украина

E-mail: vrogosov@zntu.edu.ua

(Поступила в Редакцию 5 февраля 2009 г.)

В модели цилиндрической ямы сделаны аналитические оценки размерной зависимости и рассчитаны осцилляции энергии Ферми электронов проводимости. Вычислены компоненты тензора проводимости металлической нити радиуса  $\rho_0$  с использованием разложения по степеням  $\rho_0/\lambda$ , где  $\lambda$  — длина волны падающего света. Влияние размерности систем установлено сравнением результатов вычислений оптической проводимости тонких нитей и пленок для Au, Al и Pb. Расчеты демонстрируют сильную размерную и частотную зависимость действительной и мнимой частей проводимости. Различие результатов для Pb и Au объясняется разными временами релаксации электронов в однородных по толщине нанопроволоках.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Украины.

PACS: 74.78.-w, 71.15.-m, 73.21.Nb, 78.20.-c

## 1. Введение

Современные технологии и электроника невозможны без использования тонкопленочных материалов и, в частности, металлических пленок. Ультратонкие пленки, как правило, фрагментируются (островковые пленки) и представляют собой плоские островки с магическими толщинами, соединенные тонкими каналами-нитями [1–3]. Экспериментальные методики позволяют измерить оптические характеристики в инфракрасном диапазоне не только пленок (см., например, работы [3,4] и ссылки в них), но и специально выращенных металлических наностержней-антенн микронной длины, а также продемонстрировать их размерные особенности [5–7]. Теоретическое исследование оптических свойств тонких металлических нитей представляет интерес, в частности, для целей диагностики наноструктурных материалов.

Важной особенностью металлических 1D- и 2D-систем — пленок и нитей — является анизотропия их электрических и оптических свойств, обусловленная размерным квантованием. По этой причине оптическая проводимость низкоразмерных структур представляет собой тензор  $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$ , который определяет, в частности, поглощение энергии. С учетом связи между диэлектрической функцией и проводимостью диссипация энергии плоской монохроматической электромагнитной волны с частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\mathbf{q}$  за единицу времени в единице объема немагнитного материала определяется соотношением [8]

$$Q(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta} \{ \sigma_{\alpha\beta}^*(\mathbf{q}, \omega) + \sigma_{\beta\alpha}(\mathbf{q}, \omega) \} E_{\alpha} E_{\beta}^*.$$

Вклад в диссипацию вносят все компоненты тензора проводимости.

Целью настоящей работы является вычисление компонент оптической проводимости тонких однородных металлических нитей. Для этого используется подход [9], адаптированный для ультратонких пленок в работе [4].

## 2. Энергия Ферми

Найдем решение уравнения Шредингера для прямоугольной цилиндрической ямы объемом  $\Omega$  (рис. 1) бесконечной глубины

$$U(\rho) = \begin{cases} \infty, & \rho > \rho_0, \\ 0, & \rho < \rho_0. \end{cases}$$

Длина ямы  $L$  предполагается много большей ее радиуса  $\rho_0$ .

В цилиндрической системе координат уравнение Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} + U(\rho) \quad (1)$$

( $m_e$  — масса электрона) допускает разделение переменных, и волновую функцию можно представить в виде

$$\psi_{mnp}(\rho, \varphi, z) = R_{mn}(\rho) \Phi_m(\varphi) Z_p(z). \quad (2)$$

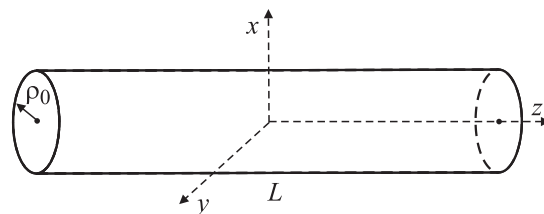


Рис. 1. Выбор системы координат.

Продольному движению электрона вдоль оси нити соответствует функция

$$Z_p(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i_0 k_z p z}, \quad (3)$$

где  $i_0$  — мнимая единица ( $i_0 = \sqrt{-1}$ ), индекс  $p$  нумерует значения  $z$ -компоненты волнового вектора.

Угловая часть волновой функции

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i_0 m \varphi} \quad (4)$$

должна удовлетворять условию периодичности

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi), \quad (5)$$

из которого следует спектр собственных значений  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Радиальная зависимость волновой функции описывается функциями Бесселя целого порядка

$$R_{mn}(\rho) = C_{mn} I_m(k_{mn} \rho), \quad (6)$$

где

$$C_{mn} = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 |I'_m(k_{mn} \rho_0)|}, \quad (7)$$

$k_{mn} = a_{mn}/\rho_0$ , где  $a_{mn}$  — положительные нули функции Бесселя  $m$ -го порядка  $I_m(\xi)$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . Штрих обозначает производную по  $\xi$ .

При условии  $L \gg \rho_0$  электронные уровни энергии можно вычислить как

$$\varepsilon_{mnp} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_{mn}^2 + k_{zp}^2). \quad (8)$$

Состояниям электронов в модели Зоммерфельда можно поставить в соответствие точки  $(k_{mn}, k_{zp})$  на плоскости с осями координат  $k_\perp, k_z$  ( $k_\perp > 0$ ). Поскольку спектр значений  $k_{zp}$  квазинепрерывный, эти точки образуют систему прямых  $k_\perp = k_{mn}$ . Занятые состояния находятся на отрезках, отсекаемых полуокружностью радиуса  $k_F$ , как это показано на рис. 2 (энергия Ферми электронов в нити  $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m_e$ ). Плотность электронных состояний на отрезках равна  $L/\pi$ .

Приравнивая число заполненных состояний числу электронов проводимости  $N$ , получим

$$N = 2 \frac{L}{\pi} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2} = 2 \frac{L}{\pi} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - \left(\frac{a_{mn}}{\rho_0}\right)^2}. \quad (9)$$

С другой стороны,

$$N = \bar{n} \Omega, \quad (10)$$

где  $\bar{n}$  — концентрация электронов проводимости. Приравнивая (9) и (10), получаем уравнение для определения  $k_F$

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 \rho_0^2} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - \left(\frac{a_{mn}}{\rho_0}\right)^2}. \quad (11)$$

Здесь предполагается, что концентрация электронов в нити такая же, что и в бесконечном металле. Сумми-

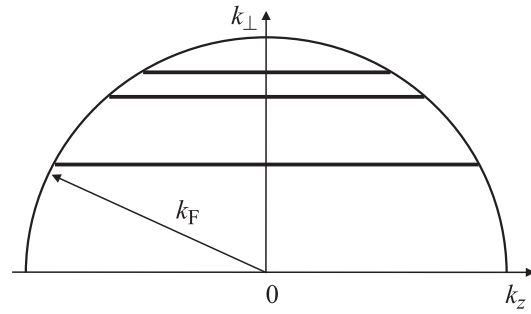


Рис. 2. Геометрическая схема заполнения электронных состояний в квантовой нити.

рование выполняется по всем значениям  $m$  и  $n$ , для которых

$$a_{mn} < k_F \rho_0. \quad (12)$$

Сделаем аналитические оценки усредненной размерной зависимости  $k_F(\rho_0)$  тонких металлических нитей, в неявном виде представленной формулой (11). Усреднение в данном случае — это переход от двойной суммы по  $m, n$  к интегралу в формуле (11). В первом приближении считаем, что корни  $a_{mn}$  распределены равномерно с плотностью  $k_F \rho_0 / \pi$ . Тогда

$$\sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - \left(\frac{a_{mn}}{\rho_0}\right)^2} = \frac{k_F^3 \rho_0^2}{\pi} \int_0^1 \sqrt{1-t^2} dt = \frac{k_F^3 \rho_0^2}{2\pi}. \quad (13)$$

После подстановки (13) в (11) получаем

$$k_F = \pi \bar{n}^{1/3}.$$

В этом приближении  $k_F$  не зависит от  $\rho_0$  и  $k_F \approx k_F^0 = (3\pi^2 \bar{n})^{1/3}$  ( $\varepsilon_F^0 \equiv \hbar^2 k_F^0{}^2 / 2m_e$  — энергия Ферми электронов в 3D-металле). Ошибка примерно в 5% связана с предположением о равномерности распределения уровней энергии.

Зависимость от  $\rho_0$  появляется в следующем приближении при использовании формулы суммирования Эйлера–Маклорена:

$$k_F/k_F^0 = A + B/k_B^0 \rho_0, \quad (14)$$

где  $A = \pi/3$ ,  $B \approx 1.16$ .

В дальнейшем для расчета размерночастотных зависимостей компонент оптической проводимости мы используем размерную зависимость энергии Ферми  $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m_e$ , полученную из точного выражения (11).

### 3. Оптическая проводимость

Обобщая результаты [9] на случай анизотропных систем, в приближении диагонального отклика ток, индуцированный электромагнитной волной с частотой  $\omega$

и волновым вектором  $\mathbf{q}$ , представим в виде

$$j_{\text{ind } \alpha} = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) E_{\beta}, \quad (15)$$

где  $\sigma_{\alpha\beta}$  — тензор проводимости,

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i_0 e^2 N}{m_e \omega \Omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{i_0 e^2}{m_e^2 \omega \Omega} \sum_{i,j} \frac{f_i - f_j}{\varepsilon_{ij} - \hbar \omega} \left\{ \langle j | e^{-i_0 \mathbf{q} \mathbf{r}} \hat{p}_{\alpha} | i \rangle - \frac{1}{2} \hbar q_{\alpha} \langle j | e^{-i_0 \mathbf{q} \mathbf{r}} | i \rangle \right\} \left\{ \langle i | e^{i_0 \mathbf{q} \mathbf{r}} \hat{p}_{\beta} | j \rangle + \frac{1}{2} \hbar q_{\beta} \langle i | e^{i_0 \mathbf{q} \mathbf{r}} | j \rangle \right\}, \quad (16)$$

$E_{\beta}$  — компоненты электрического поля,  $\{\alpha, \beta\} = x, y, z$ .

В выражении (16)  $f_i = [\exp((\varepsilon_i - \varepsilon_F)/k_B T) + 1]^{-1}$  — коэффициент заполнения состояния с энергией  $\varepsilon_i$ ,  $|i\rangle \equiv |p, m, n\rangle$ ,  $|j\rangle \equiv |p', m', n'\rangle$  — векторы начального и конечного состояния,  $\varepsilon_{ij} \equiv \varepsilon_i - \varepsilon_j$ ,  $T$  — температура. В дальнейшем будем считать  $T = 0$ .

Рассмотрим случай, когда волна падает на нить перпендикулярно ее оси (рис. 1). Тогда волновой вектор лежит в плоскости  $xy$ , т.е.  $q_z = 0$ . Направив ось  $x$  вдоль направления распространения волны, получим  $q_y = 0$ ,  $\mathbf{q} \mathbf{r} = q_x x \simeq \rho_0 / \lambda \ll 1$  и

$$e^{\pm i_0 \mathbf{q} \mathbf{r}} \approx 1 \pm i_0 q_x x.$$

В нулевом приближении разложения  $\sigma_{\alpha\beta}$  по малому параметру  $\rho_0 / \lambda$  в (16) выражение для проводимости имеет вид

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i_0 e^2 N}{m_e \omega \Omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{i_0 e^2}{m_e^2 \omega \Omega} \sum_{i,j} \frac{f_i - f_j}{\varepsilon_{ij} - \hbar \omega} \langle j | \hat{p}_{\alpha} | i \rangle \langle i | \hat{p}_{\beta} | j \rangle. \quad (17)$$

Это выражение можно преобразовать путем почленного деления на  $\varepsilon_{ij} - \hbar \omega$  под знаком суммы и последующей перестановки индексов  $i$  и  $j$  во втором слагаемом, которое появилось после деления

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i_0 e^2 N}{m_e \omega \Omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{i_0 e^2}{m_e^2 \omega \Omega} \times \sum_{i,j} f_i \left\{ \frac{\langle j | \hat{p}_{\alpha} | i \rangle \langle i | \hat{p}_{\beta} | j \rangle}{\varepsilon_{ij} - \hbar \omega} + \frac{\langle j | \hat{p}_{\alpha} | i \rangle^* \langle i | \hat{p}_{\beta} | j \rangle^*}{\varepsilon_{ij} + \hbar \omega} \right\}. \quad (18)$$

Используя (3)–(7), после довольно громоздких преобразований (см. Приложение) матричные элементы различных проекций оператора импульса можно выразить так

$$\langle j | \hat{p}_{\alpha} | i \rangle = \begin{cases} \hbar k_{z p} \delta_{ij}, & \alpha = z, \\ -\frac{i_0 \hbar}{2} \delta_{pp'} k_{mn} C_{mn} \mathcal{G}_{(-)}, & \alpha = x, \\ \frac{\hbar}{2} \delta_{pp'} k_{mn} C_{mn} \mathcal{G}_{(+)}, & \alpha = y, \end{cases} \quad (19)$$

где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера и

$$\mathcal{G}_{(\mp)} = \mathcal{J}_{(-)} \delta_{m-1, m'} \mp \mathcal{J}_{(+)} \delta_{m+1, m'},$$

$$\mathcal{J}_{(\mp)} = C_{m \mp 1, n'} \int_0^{\rho_0} I_{m \mp 1}(k_{m \mp 1, n'} \rho) I_{m \mp 1}(k_{mn} \rho) \rho d\rho. \quad (20)$$

Вследствие специфического вида матричного элемента  $\langle j | \hat{p}_z | i \rangle$  сумма в выражении (17) обращается в нуль, если  $\alpha = z$  или  $\beta = z$ . Поэтому

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0, \quad \sigma_{zz} = \frac{i_0 e^2 \bar{n}}{m_e \omega}. \quad (21)$$

Для остальных диагональных компонент выражение (18) легко преобразовать к виду

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{i_0 e^2 \bar{n}}{m_e \omega} + \frac{2i_0 e^2}{m_e^2 \omega \Omega} \sum_{i,j} \frac{f_i \varepsilon_{ij}}{\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2} |\langle j | \hat{p}_{\alpha} | i \rangle|^2, \quad (22)$$

где индекс  $\alpha = x, y$ . Диагональные компоненты тензора проводимости получаются после подстановки в (22) матричных элементов (19), (20)

$$\sigma_{xx, yy} = \frac{i_0 e^2 \bar{n}}{m_e \omega} + \frac{i_0 e^2}{m_e \omega \Omega} \sum_{m, n, p, n'} f_{mnp} k_{mn}^2 C_{mn}^2 \times \left\{ \frac{(k_{mn}^2 - k_{m-1, n'}^2) \mathcal{J}_{(-)}^2}{(k_{mn}^2 - k_{m-1, n'}^2)^2 - k_{\omega}^4} + \frac{(k_{mn}^2 - k_{m+1, n'}^2) \mathcal{J}_{(+)}^2}{(k_{mn}^2 - k_{m+1, n'}^2)^2 - k_{\omega}^4} \right\}, \quad (23)$$

где  $k_{\omega}^2 \equiv 2m_e \omega / \hbar$  и  $f_{mnp}$  — ступенчатая функция,

$$f_{mnp} = \begin{cases} 1, & k_{mn}^2 + k_{z p}^2 < k_F^2, \\ 0, & k_{mn}^2 + k_{z p}^2 > k_F^2. \end{cases}$$

Выражение для недиагональных компонент  $\sigma_{xy}$  и  $\sigma_{yx}$  следует из (18)

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i_0 e^2}{m_e^2 \omega \Omega} \sum_{i,j} f_i \left\{ \frac{\langle j | \hat{p}_x | i \rangle \langle i | \hat{p}_y | j \rangle}{\varepsilon_{ij} \mp \hbar \omega} + \frac{\langle j | \hat{p}_x | i \rangle^* \langle i | \hat{p}_y | j \rangle^*}{\varepsilon_{ij} \pm \hbar \omega} \right\}. \quad (24)$$

Верхний знак соответствует  $\alpha = x$ ,  $\beta = y$ , а нижний знак —  $\alpha = y$ ,  $\beta = x$ .

Осевая симметрия задачи выражается в том, что в (17) и (18) суммирование производится как по всем положительным значениям  $m$  и  $m'$  (удовлетворяющим условию (12)), так и по таким же по модулю, но отрицательным значениям  $m$  и  $m'$ . Анализ выражений (19) и (20) на основе свойств функций Бесселя [10,11]

$$k_{(-m)n} = k_{mn}, \quad I_{-m}(\xi) = (-1)^m I_m(\xi)$$

выявил различное поведение матричных элементов при одновременной замене  $m \rightarrow -m$  и  $m' \rightarrow -m'$

$$\langle j | \hat{p}_x | i \rangle \rightarrow -\langle j | \hat{p}_x | i \rangle, \quad \langle j | \hat{p}_y | i \rangle \rightarrow \langle j | \hat{p}_y | i \rangle. \quad (25)$$

Это приводит к тому, что слагаемые в сумме (24) попарно сокращаются и

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0. \quad (26)$$

Таким образом, все диагональные компоненты тензора проводимости в нулевом порядке разложения по  $\rho_0/\lambda$  равны нулю. Однако в линейном приближении результат иной. Так, компоненты  $\sigma_{zx}$  и  $\sigma_{zy}$  в этом приближении имеют вид

$$\sigma_{z\beta} = \frac{q_x e^2}{m_e^2 \omega \Omega} \times \sum_{i,j} f_i \left\{ \frac{\langle j|x\hat{p}_z|i\rangle \langle i|\hat{p}_\beta|j\rangle}{\varepsilon_{ij} - \hbar\omega} + \frac{\langle j|x\hat{p}_z|i\rangle^* \langle i|\hat{p}_\beta|j\rangle^*}{\varepsilon_{ij} + \hbar\omega} \right\}, \quad (27)$$

где индекс  $\beta = x, y$  и матричный элемент

$$\begin{aligned} \langle j|x\hat{p}_z|i\rangle &= \frac{1}{2} \hbar k_{zp} \delta_{pp'} \\ &\times \int_0^{\rho_0} (R_{m-1,n'} R_{mn} \delta_{m-1,m'} + R_{m+1,n'} R_{mn} \delta_{m+1,m'}) \rho^2 d\rho. \end{aligned} \quad (28)$$

Рассуждения, аналогичные тем, которые привели к (25), дают результат

$$\begin{aligned} \langle j|x\hat{p}_z|i\rangle &\rightarrow -\langle j|x\hat{p}_z|i\rangle, \\ \langle j|x\hat{p}_z|i\rangle \langle i|\hat{p}_y|j\rangle &\rightarrow -\langle j|x\hat{p}_z|i\rangle \langle i|\hat{p}_y|j\rangle, \\ \langle j|x\hat{p}_z|i\rangle \langle i|\hat{p}_x|j\rangle &\rightarrow \langle j|x\hat{p}_z|i\rangle \langle i|\hat{p}_x|j\rangle. \end{aligned} \quad (29)$$

Поэтому в линейном по  $\rho_0/\lambda$  приближении  $\sigma_{zy} = 0$ , тогда как  $\sigma_{zx} \neq 0$ . Используя (20), можно записать

$$\sigma_{zx} = \frac{2i_0 q_x e^2}{\hbar \Omega} \sum_{n,n',m,p} f_{mnp} k_{zp} C_{mn}^2 (\mathcal{F}_{(-)} - \mathcal{F}_{(+)}), \quad (30)$$

где

$$\mathcal{F}_{(\mp)} = \frac{\mathcal{F}_{\mp} C_{m\mp 1, n'} \int_0^{\rho_0} I_{m\mp 1}(k_{m\mp 1, n'} \rho) I_m(k_{mn} \rho) \rho^2 d\rho}{(k_{mn}^2 - k_{m\mp 1, n'}^2) - k_w^4}.$$

Поглощение учитывается посредством замены  $\omega \rightarrow \omega + i_0/\tau$  в формулах (18), (21), (22) и (27). Если  $\tau = 0$ , то  $\sigma_{zz}$ ,  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  являются мнимыми величинами. Так как остальные компоненты тензора проводимости в нулевом приближении равны нулю, поглощение отсутствует ( $Q = 0$ ). Для оптических частот  $\omega \gg 1/\tau$  поглощение незначительно.

Произведя замену  $\omega \rightarrow \omega + i_0/\tau$  в (21), после простых преобразований получаем формулу Друде [12]

$$\sigma_{zz}(\omega) = \sigma(0) \frac{1 + i_0 \omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad (31)$$

где  $\sigma(0) \equiv e^2 \bar{n} \tau / m_e$  — статическая проводимость. Таким образом, компонента  $\sigma_{zz}(\omega)$  соответствует классической проводимости. Другие диагональные компоненты (22)

можно представить в виде

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \sigma_{zz} \{1 + S(\omega, \rho_0, L)\}, \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} S(\omega, \rho_0, L) &\equiv \frac{2}{Nm_e} \\ &\times \sum_{ij} \frac{f_i \varepsilon_{ij} (\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2 + 2\hbar \omega i_0 / \tau)}{(\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + 4\hbar^4 \omega^2 / \tau^2} |\langle j|\hat{p}_\alpha|i\rangle|^2 \end{aligned} \quad (33)$$

и  $\alpha = x, y$ .

В результате перестановки индексов  $i$  и  $j$  выражение под знаком суммы в (33) меняет знак на противоположный, поэтому

$$\sum_{\substack{i,j \\ \varepsilon_i < \varepsilon_F \\ \varepsilon_j < \varepsilon_F}} \frac{f_i \varepsilon_{ij} (\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2 + 2\hbar^2 \omega i_0 / \tau)}{(\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + 4\hbar^4 \omega^2 / \tau^2} |\langle j|\hat{p}_\alpha|i\rangle|^2 = 0$$

и

$$\begin{aligned} S(\omega, \rho_0, L) &= \frac{2}{Nm_e} \\ &\times \sum_{\substack{i,j \\ \varepsilon_i < \varepsilon_F \\ \varepsilon_j > \varepsilon_F}} \frac{\varepsilon_{ij} (\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2 + 2\hbar^2 \omega i_0 / \tau)}{(\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + 4\hbar^4 \omega^2 / \tau^2} |\langle j|\hat{p}_\alpha|i\rangle|^2. \end{aligned} \quad (34)$$

При этом  $\varepsilon_{ij} < 0$ , т.е. в проводимости учитываются только переходы, связанные с поглощением. Важно отметить, что для всех частот  $\text{Im} S < 0$ . В оптической области действительной частью  $\sigma_{zz}$  можно пренебречь, а  $\text{Im} \sigma_{zz} > 0$ , отсюда следует, что на всех частотах  $\text{Re} \sigma_{xx,yy} > 0$  и  $Q > 0$ , как и должно быть.

Характерной особенностью низкоразмерных систем является наличие в спектральных характеристиках ярко выраженных пиков, соответствующих переходам между уровнями размерного квантования [4]. Если пики хорошо разрешаются,  $|\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{i'j'}| \gg \hbar/\tau$ , то можно приближенно считать, что каждое слагаемое в сумме (33) описывает пики на частоте  $\omega_{ij} \approx |\varepsilon_{ij}/\hbar|$ . Можно показать, что высота пиков в  $\text{Im} S$  вдвое больше, чем в  $\text{Re} S$ . Однако в  $\text{Im} S$  имеются только отрицательные минимумы, тогда как в  $\text{Re} S$  каждое слагаемое имеет и максимум, и минимум, которым соответствуют два близлежащих пика одинаковой высоты, но противоположной кривизны (речь идет о близлежащих максимуме и минимуме).

## 4. Результаты вычислений и их обсуждение

Вычисления проведены для значений электронных концентраций  $\bar{n} \equiv (4\pi r_s^3/3)^{-1}$ ,  $r_s = 3.01, 2.30$  и  $2.07 a_0$  для Au, Pb и Al соответственно ( $a_0$  — боровский радиус).

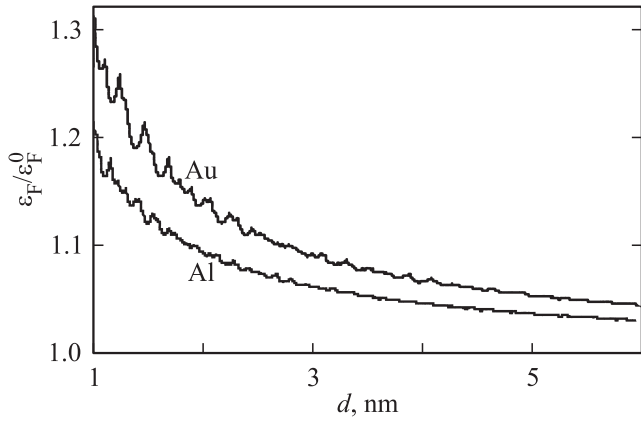


Рис. 3. Размерная зависимость энергии Ферми металлических нитей ( $d = 2\rho_0$ ).

На рис. 3 представлена размерная зависимость энергии Ферми тонких нитей Au и Al. Она имеет „осцилляционный“ вид. Однако в отличие от размерной зависимости энергии Ферми металлических пленок [13] изменение  $\varepsilon_F$  на рис. 3 имеет вид хаотической зависимости.

В случае пленки зубцы на кривой размерной зависимости (т.е. скачки производной  $d\varepsilon_F/dl$ ,  $l$  — толщина пленки) расположены регулярно с приблизительно постоянным периодом  $\Delta l \approx \pi/k_F^0$ . В случае нити зубец появляется всякий раз, когда увеличивающийся радиус  $\rho_0$  достигает такого значения  $\rho_{0m'n'}$ , при котором условие (12) начинает выполняться еще для одной пары чисел  $(m', n')$

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

Расстояние между соседними зубцами

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

получается при наложении корней функций Бесселя разных порядков и изменяется случайным образом только на первый взгляд.

Размах осцилляций в нити диаметром  $d$  и пленке толщиной  $l$  при  $d \cong l$  близок по величине. Как и в случае пленки, с увеличением диаметра проволоки ( $d \rightarrow \infty$ ) „период“  $\Delta d$  и амплитуда осцилляций стремятся к нулю.

Особенности размерной зависимости энергии Ферми нитей разных металлов объясняются исключительно разным значением  $k_F^0$ . Для Al-нити по сравнению с Au-нитью масштаб  $\Delta d$  осцилляций мельче (так как больше плотность распределения корней  $a_{mn} \approx k_F^0 \rho_0 / \pi$ ), амплитуда осцилляций и сглаженное значение  $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0$  меньше.

Сравним по порядку величины компоненты тензора проводимости для Au-нити. Для  $\hbar\omega = 1 \text{ eV}$  и частоты поглощения  $\hbar/\tau = 0.02 \text{ eV}$   $\sigma(0) = 4.6 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}$  и  $|\sigma_{zz}| \approx \sigma(0)/\omega\tau \approx 10^{16} \text{ s}^{-1}$ . В дальнейшем в качестве единиц проводимости будем использовать  $e^2/2a_0\hbar = 2.0 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$ . Тогда  $|\sigma_{zz}| \approx 0.5$ .

Используя соотношения

$$\text{Re } \sigma_{xx} = -|\sigma_{zz}| \text{Im } S$$

и

$$\text{Im } S \approx -\frac{\tau}{\hbar N m_e} |\langle m+1, n' | \hat{p}_x | mn \rangle|^2 \sum_p 1,$$

оценим другие диагональные компоненты тензора проводимости, например величину пика  $\text{Re } \sigma_{xx}$  на частоте  $\hbar\omega_{ij} = |\varepsilon_{ij}|$ . Примем во внимание, что

$$\sum_p 1 = \frac{2L}{\pi} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2} \cong \frac{2L}{\pi} k_F^0 \quad (35)$$

и

$$|\langle m+1, n' | \hat{p}_x | mn \rangle|^2 \propto k_{mn}^2 \cong \frac{1}{4} \hbar^2 k_F^0{}^2. \quad (36)$$

Тогда, используя  $k_F^0{}^3/3\pi^2 = N/\Omega$ , имеем

$$\text{Im } S \cong -\frac{3\hbar\tau}{2m_e\rho_0^2}.$$

Подставляя  $\tau = 2.1 \cdot 10^{-14} \text{ s}^{-1}$  (Au),  $d = 2\rho_0 = 2 \text{ nm}$ , получаем  $\text{Im } S \cong -1$ ,  $\text{Re } \sigma_{xx} \cong 1$ . В макроскопическом пределе  $\rho_0 \rightarrow \infty$  и  $\text{Re } \sigma_{xx} = 0$ ,  $\text{Im } \sigma_{xx} = \text{Im } \sigma_{zz}$ , как и следовало ожидать.

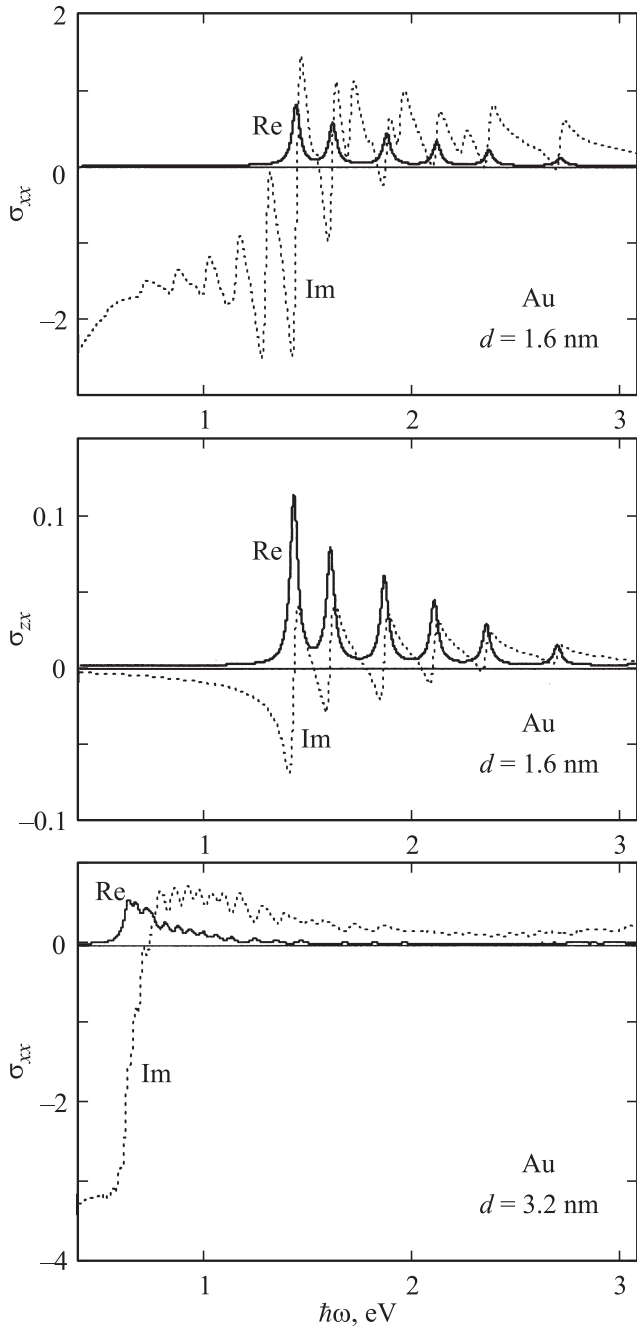
Сравнивая (18) и (27), можно убедиться, что  $|\sigma_{zx}/\sigma_{xx}| \cong q_x \rho_0$ . Для  $\lambda = 10^3 \text{ nm}$ ,  $d = 2 \text{ nm}$  получаем  $|\sigma_{zx}/\sigma_{xx}| \cong 10^{-2}$ .

На рис. 4 представлена частотная зависимость  $\text{Re } \sigma_{xx}$  и  $\text{Im } \sigma_{xx}$  для Au-нити диаметром 1.6 nm. При таком малом диаметре отчетливо проявляются пики, соответствующие переходам между уровнями размерного квантования. Положение пиков вполне предсказуемо, несмотря на довольно сложный спектр  $k_{mn}$ .

Определим, например, положение пика в  $\text{Re } \sigma_{xx}$ , имеющего наибольшую высоту. Как уже отмечалось при оценке компонент тензора проводимости, высота пиков пропорциональна произведению  $|\langle m+1, n' | \hat{p}_x | mn \rangle|^2 \sum_p 1$ . Матричный элемент имеет максимальную величину при  $n' = n$ , так как соответствующий интеграл в (23) при этом условии принимает максимальное значение. Далее, используя (35) и (36), легко определить, что наибольшая высота достигается при  $m = 0$ ,  $n' = n = n_F$ . Число  $n_F \approx k_F^0 \rho_0 / \pi$  для диаметра  $d = 1.6 \text{ nm}$  равно 3. В результате получаем

$$\hbar\omega_{\max} = \frac{\hbar^2(k_{1,3}^2 - k_{0,3}^2)}{2m_e} = \frac{\hbar^2(a_{1,3}^2 - a_{0,3}^2)}{2m_e\rho_0^2} = 1.40 \text{ eV},$$

что хорошо согласуется с данными, приведенными на рис. 4.



**Рис. 4.** Расчетные зависимости безразмерных (в единицах  $e^2/2a_0\hbar$ ) действительной и мнимой частей компонент  $\sigma_{\alpha\beta}$  нанопроволок Au различного диаметра  $d$ .

Рис. 4 демонстрирует важный факт неотрицательности  $\text{Re } \sigma_{xx}$  на всех частотах. В отличие от этого  $\text{Im } \sigma_{xx}$  является знакопеременной функцией частоты. Порядок величины пиков  $\text{Re } \sigma_{xx}$  также легко тестируется аналитическими оценками.

Представляет интерес сравнить результаты исследования оптической проводимости тонких металлических нитей с аналогичными результатами для тонких пленок [14]. Исходный пункт, которым можно считать

формулу (22) при  $\alpha = x$ , одинаков в обоих случаях (пленка предполагается ориентированной перпендикулярно оси  $x$ ).

Для пленки толщиной  $l$  и продольными размерами  $a$  и  $b$  ( $l \ll a, b$ ) выражение для проводимости (в единицах  $e^2/2a_0\hbar$ ) имеет вид [14]

$$\text{Re } \sigma_{xx} = \left(\frac{4}{l}\right)^3 \frac{a_0\gamma^2}{\pi} H_{(-)}, \quad (37)$$

$$\text{Im } \sigma_{xx} = -\left(\frac{4}{l}\right)^3 \frac{a_0k_\omega^2}{\pi} H_{(+)}, \quad (38)$$

где  $k_\omega^2 \equiv 2m_e\omega/\hbar$  и

$$H_{(\mp)} = \sum_{m=1}^{m_F} \sum_{m'=1}^{m_{\max}} \frac{\{1 - (-1)^{m+m'}\} \kappa_m \kappa_{m'} l^2}{(l\kappa_m + 2)(l\kappa_{m'} + 2)} \times \frac{k_{xm}^2 k_{xm'}^2 (k_F^2 - k_{xm}^2)}{(k_{xm}^2 - k_{xm'}^2)^3 \{(k_{xm}^2 - k_{xm'}^2)^2 - k_\omega^4\}} \times \frac{(k_{xm'}^2 - k_{xm}^2)^2 \mp k_\omega^4 \mp \gamma^4}{\{(k_{xm'}^2 - k_{xm}^2)^2 - k_\omega^4 + \gamma^4\}^2 + 4k_\omega^4 \gamma^4}, \quad (39)$$

$$m_F = \left[ \frac{lk_F}{\pi} + \frac{2}{\pi} \arcsin\left(\frac{k_F}{k_0}\right) \right], \quad m_{\max} = \left[ \frac{lk_0}{\pi} \right] + 1. \quad (40)$$

Величина затухания  $\gamma = \sqrt{2m_e/\hbar\tau}$ . Расчет в [14] выполнялся для ямы конечной глубины  $U_0$ , поэтому величины  $k_{xm}$  являются корнями уравнения

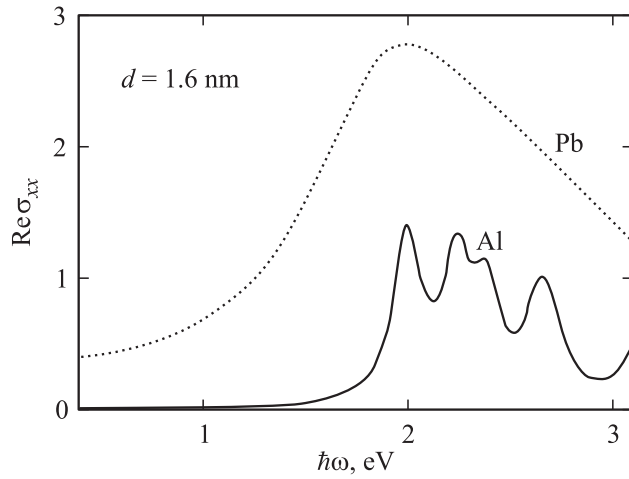
$$k_{xm}l = -2 \arcsin(k_{xm}/k_0) + \pi m,$$

где  $\hbar k_0 = \sqrt{2m_e|U_0|}$  и  $\kappa_m = \sqrt{k_0^2 - k_{xm}^2}$  в (39). Квадратные скобки в (40) означают целую часть числа.

Отличия связаны с размерностью систем, что выражается в существенном различии энергетических спектров, а также в том, что после пересчета квазинепрерывных состояний в случае нити остается суммирование по двум индексам  $m, n$ , а в случае пленки — по одному (который нумерует значения  $x$ -компоненты импульса электронов). Этой особенностью объясняется на порядок меньшая величина пиков в частотной зависимости проводимости нити по сравнению с пленкой. Действительно,

$$\frac{\text{Re } \sigma_{xx}^{\text{wire}}}{\text{Re } \sigma_{xx}^{\text{film}}} \cong \frac{\Omega_1^{-1} \sum_p 1}{\Omega_2^{-1} \sum_{p,n} 1} = \frac{2L}{\pi} \frac{\sqrt{k_F^2 - k_{nm}^2}}{\pi \rho_0^2 L} \left( \frac{ab}{\pi^2} \frac{\pi(k_F^2 - k_m^2)}{abl} \right)^{-1} \cong \frac{l}{k_F^0 \rho_0^2}.$$

При  $l = \rho_0 \cong 1 \text{ nm}$  и  $k_F^0 \cong 10 \text{ nm}^{-1}$  имеем  $\text{Re } \sigma_{xx}^{\text{wire}} / \text{Re } \sigma_{xx}^{\text{film}} \cong 10^{-1}$ .



**Рис. 5.** Расчетные частотные зависимости действительной части  $\sigma_{xx}$  проволок Al и Pb диаметром  $d = 1.6$  nm.

Что касается различного положения пиков, то оно исчерпывающим образом объясняется структурой энергетических спектров 1D- и 2D-систем.

Проследим размерную зависимость проводимости тонких металлических нитей. С ростом  $d$  пики смещаются влево (рис. 4), причем смещение  $\Delta\omega = \omega' - \omega = \omega(\rho_0^2/\rho_0'^2 - 1)$ . Это значит, что более удаленные пики (с большим значением  $\omega$ ) смещаются сильнее ближних и интервал частот, занимаемый пиками, сужается. В то же время во всем интервале частот появляются новые пики, так как при возрастании  $\rho_0$  увеличивается число уровней и число возможных переходов между ними. Расстояние между пиками уменьшается, и когда оно приближается к  $\hbar/\tau$ , пики начинают накладываться друг на друга.

На рис. 5 представлены зависимости  $\text{Re } \sigma_{xx}$  нитей Al и Pb диаметром 1.6 nm. Неожиданным результатом является полное отсутствие пиков в проводимости Pb-нити. Как оказалось, это объясняется малым временем релаксации электронов свинца  $\tau = 1.4 \cdot 10^{-15}$  s, так что ширина пиков  $\hbar/\tau = 0.44$  eV. В этом отношении Al ( $\hbar/\tau = 0.08$  eV) занимает промежуточное положение между Au и Pb. Для расчетов нами использованы времена релаксации электронов  $\tau$  для 3D-металлов, взятые из [15].

Несмотря на отсутствие пиков в частотной зависимости проводимости Pb-нити, ее максимум может быть найден таким же способом, как ранее было определено положение пика наибольшей частоты в проводимости Au-нити, с тем отличием, что теперь  $n_F = 4$ ,

$$\hbar\omega_{\max} = \hbar^2(a_{1,4}^2 - a_{0,4}^2)/2m_e = 2.1 \text{ eV}.$$

Эта величина хорошо согласуется с данными прямых вычислений на рис. 5, если принять во внимание большую ширину пиков.

Различие полученных результатов для Al и Pb вследствие разных значений  $\tau$  неожиданно указывает на тот вид размерных зависимостей, который следует ожидать для неоднородных по толщине пленок и нитей [16–20]. Если размеры неоднородности 1D- и 2D-систем эффективно приводят к сильному снижению величины  $\tau$ , то измеренные размерные зависимости компонент проводимости будут выглядеть заметно сглаженными независимо от сорта металла.

Влиянию неоднородностей на проводимости пленок и проволок будет посвящена отдельная публикация.

## 5. Заключение

Проведено исследование проводимости тонких металлических нитей в инфракрасной области спектра. В приближении свободных электронов сделаны аналитические оценки, а также рассчитаны размерные осцилляции энергии Ферми. Введен тензор проводимости для тонких металлических нитей и вычислены его компоненты с использованием разложения по степеням  $\rho_0/\lambda$ . Доказан принципиальный факт неоднородности действительной части диагональных компонент тензора проводимости. Влияние размерности систем установлено сравнением результатов вычислений оптической проводимости тонких нитей и пленок. Расчеты компонент тензора проводимости выполнены для нитей Au, Al и Pb.

## Приложение. Вычисление матричных элементов проекций импульса

Используя общую запись компонент оператора импульса в цилиндрической системе координат

$$\hat{p}_z = -i_0\hbar \frac{\partial}{\partial z},$$

$$\hat{p}_x = -i_0\hbar \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\sin\varphi}{\rho} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right),$$

$$\hat{p}_y = -i_0\hbar \left( \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\cos\varphi}{\rho} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

и волновую функцию (2)–(7), получим

$$\begin{aligned} \langle j|\hat{p}_z|i\rangle &= -i_0\hbar \iiint \left( R_{m'n'}\Phi_{m'}^*Z_p^*R_{mn}\Phi_m \frac{dZ_p}{dz} \right) \rho d\rho d\varphi dz \\ &= \hbar k_{zp}\delta_{mm'}\delta_{nn'}\delta_{pp'}. \end{aligned} \quad (\text{П1})$$

Для следующего матричного элемента запишем

$$\begin{aligned}
 \langle j|\hat{p}_x|i\rangle &= -i_0\hbar \iiint \left\{ R_{m'n'}\Phi_{m'}^*Z_{p'}^* \left( \cos\varphi\Phi_m \frac{dR_{mn}}{d\rho} - \frac{\sin\varphi}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\varphi} R_{mn} \right) Z_p \right\} \rho d\rho d\varphi dz \\
 &= -i_0 \frac{\hbar}{2} \delta_{pp'} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (e^{-i_0m'\varphi} e^{i_0(m-1)\varphi} + e^{-i_0m'\varphi} e^{i_0(m+1)\varphi}) d\varphi \int_0^{\rho_0} R_{m'n'} \frac{dR_{mn}}{d\rho} \rho d\rho \right. \\
 &\quad \left. + \frac{m}{2\pi} \int_0^{2\pi} (e^{-i_0m'\varphi} e^{i_0(m-1)\varphi} - e^{-i_0m'\varphi} e^{i_0(m+1)\varphi}) d\varphi \int_0^{\rho_0} R_{m'n'} R_{mn} d\rho \right\} \\
 &= -i_0 \frac{\hbar}{2} \delta_{pp'} \int_0^{\rho_0} \left\{ (\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'}) R_{m'n'} \frac{dR_{mn}}{d\rho} \rho + m(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) R_{m'n'} R_{mn} \right\} d\rho \\
 &= -\frac{i_0\hbar}{2} \delta_{pp'} \int_0^{\rho_0} \left\{ \delta_{m-1,m'} (-mR_{m'n'} R_{mn} + k_{mn} C_{mn} C_{m'n'} I_{m'}(k_{m'n'}\rho) I_{m-1}(k_{mn}\rho) \rho + mR_{m'n'} R_{mn}) \right. \\
 &\quad \left. + \delta_{m+1,m'} (mR_{m'n'} R_{mn} - k_{mn} C_{mn} C_{m'n'} I_{m'}(k_{m'n'}\rho) I_{m+1}(k_{mn}\rho) \rho - mR_{m'n'} R_{mn}) \right\} d\rho. \tag{П2}
 \end{aligned}$$

После сокращений получим выражение для  $\langle j|\hat{p}_x|i\rangle$  в (19). Аналогично выводится и формула для  $\langle j|\hat{p}_y|i\rangle$ .

## Список литературы

- [1] R.D. Fedorovich, A.G. Naumovets, P.M. Tomchuk. Phys. Rep. **328**, 73 (2000).
- [2] R. Otero, A.L. Vazquez de Parga, R. Miranda. Phys. Rev. B **66**, 115401 (2002).
- [3] A. Gloskovskii, D.A. Valdaitsev, M. Cinchetti, S.A. Nepijko, J. Lange, M. Aeschlimann, M. Bauer, M. Klimenkov, L.V. Viduta, P.M. Tomchuk, G. Schönhense. Phys. Rev. B **77**, 195427 (2008).
- [4] В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Погосов, Е.В. Васютин. ФТТ **50**, 909 (2008).
- [5] F. Neubrech, T. Kolb, R. Lovrincic, G. Fahsold, A. Pucci. Appl. Phys. Lett. **89**, 253104 (2006).
- [6] O.L. Muskens, V. Giannini, J.A. Sanchez-Gil, J. Gomes Rivas. Nano Lett. **7**, 9, 2871 (2007).
- [7] M. Klevenz, F. Neubrech, R. Lovrincic, M. Jaloehowski, A. Pucci. Appl. Phys. Lett. **92**, 133116 (2008).
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Физматлит, М. (2001). С. 479.
- [9] D.M. Wood, N.W. Ashcroft. Phys. Rev. B **25**, 6255 (1982).
- [10] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Лёш. Специальные функции. Наука, М. (1968). 344 с.
- [11] А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. Уравнения математической физики. Наука, М. (1977). 736 с.
- [12] Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. Мир, М. (1974). С. 315.
- [13] В.П. Курбацкий, В.В. Погосов. ФТТ **46**, 1861 (2004).
- [14] В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Погосов. УФЖ **53**, 569 (2008).
- [15] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Мир, М. (1979). Т. 1. С. 25.
- [16] Z. Tesanovic, M.V. Jaric, S. Maekawa. Phys. Rev. Lett. **57**, 2760 (1986).
- [17] N. Trivedi, N.W. Ashcroft. Phys. Rev. B **38**, 12298 (1988).
- [18] G. Fishman, D. Calecki. Phys. Rev. Lett. **62**, 1302 (1989); Phys. Rev. B **43**, 11581 (1991).
- [19] I.V. Ponomarev, A.E. Meyerovich. Phys. Rev. B **65**, 155413 (2002).
- [20] Y. Cheng, A.E. Meyerovich. Phys. Rev. B **73**, 085404 (2006).