

О влиянии диэлектрика на осцилляции энергии Ферми металлической эллиптической нанопроволоки

© А.В. Коротун, А.А. Коваль

Запорожский национальный технический университет,
Запорожье, Украина

E-mail: andko@zntu.edu.ua

(Поступила в Редакцию 6 марта 2015 г.

В окончательной редакции 6 апреля 2015 г.)

В модели свободных электронов и цилиндрической потенциальной ямы конечной глубины получены размерные зависимости энергии Ферми металлических 1D-систем эллиптического сечения в диэлектрической среде. Вычисления проведены для проволок Au в SiO₂ и Al₂O₃. Показано, что изменение геометрии поперечного сечения и наличие диэлектрика приводят к уменьшению значений энергии Ферми при сохранении общего характера размерных зависимостей.

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

1. Интерес к изучению свойств низкоразмерных квантовых систем в последнее время обусловлен перспективами их применения в элементах микро- и нанoeлектроники. В таких системах размерные зависимости характеристик имеют, как правило, осциллирующий характер (см. работы [1–5] и ссылки в них).

В работе [6] для случая эллиптической проволоки с малым эксцентриситетом предложен метод возмущения формы границы и получено уравнение для определения спектра. Однако при этом использована модель потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками, что является оправданным при рассмотрении изолированной нанопроволоки, находящейся в вакууме. В реальных условиях нанопроволоки располагаются либо на диэлектрической подложке, либо в диэлектрической матрице. Учет влияния диэлектрика можно по аналогии с работой [7] выполнить в модели потенциальной ямы конечной глубины.

При изучении электронных свойств металлических наносистем важной характеристикой является энергия Ферми, которая определяет основной вклад в оптическую проводимость [2,8]. Поэтому целью настоящей работы является анализ влияния диэлектрика на размерные осцилляции энергии Ферми металлической нанопроволоки эллиптического сечения.

2. Представим профиль потенциальной энергии электронов проволоки длиной $\mathcal{L} \gg \rho_0$ в виде цилиндрического потенциального ящика глубиной $U_0 < 0$ и радиусом $\rho_0 \simeq \lambda_F^0$ (λ_F^0 — фермиевская длина волны электрона в 3D-металле). В этом случае радиальную часть волновой функции можно записать в виде

$$R_{mn}(\rho) = \begin{cases} A_{mn} I_m(k_{mn}\rho), & \rho \leq \rho_0; \\ B_{mn} K_m(\chi_{mn}\rho), & \rho > \rho_0, \end{cases} \quad (1)$$

где $k_{mn} = \sqrt{k_0^2 - \chi_{mn}^2}$, $\hbar k_0 = \sqrt{2m_e|U_0|}$, I_m — функция Бесселя, K_m — функция Макдональда, $m = 0, \pm 1,$

$\pm 2, \dots$ (азимутальное квантовое число), m_e — масса электрона. Число $n = 1, 2, 3, \dots$ нумерует корни характеристического уравнения для заданного значения m , которое следует из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе ямы:

$$k_{mn} \frac{I'_m(k_{mn}\rho_0)}{I_m(k_{mn}\rho_0)} = \chi_{mn} \frac{K'_m(\chi_{mn}\rho_0)}{K_m(\chi_{mn}\rho_0)}. \quad (2)$$

Для решения уравнения (2) воспользуемся теорией возмущений [9]

$$k_{mn} = k_{mn}^{(0)} + k_{mn}^{(1)}, \quad |k_{mn}^{(1)}/k_{mn}^{(0)}| \ll 1, \quad (3)$$

где в качестве нулевого приближения $k_{mn}^{(0)}$ взято значение, соответствующее спектру бесконечно глубокой цилиндрической ямы. Числа $k_{mn}^{(0)}$ определяются решением уравнения

$$I_m(k_{mn}^{(0)}) = 0.$$

Поправка первого порядка имеет вид

$$k_{mn}^{(1)} = \frac{k_{mn}^{(0)} K_m(\chi_{mn}^{(0)} \rho_0)}{\rho_0 \chi_{mn}^{(0)} K'_m(\chi_{mn}^{(0)} \rho_0)}, \quad (4)$$

где $\chi_{mn}^{(0)} = \sqrt{k_0^2 - k_{mn}^{(0)2}}$.

Уровни энергии металлической нанопроволоки определяются формулой

$$\epsilon_{mnp} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_{mn}^2 + k_{zp}^2), \quad (5)$$

где k_{zp} — проекция волнового вектора на ось симметрии проволоки.

Энергия Ферми определяется путем подсчета числа занятых электронных состояний в проволоке с учетом размерного квантования [2]

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 \rho_0^2} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2}, \quad (6)$$

где \bar{n} — концентрация электронов проводимости ($\epsilon_F^0 \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m_e$ — энергия Ферми электронов в 3D-ме-

талле, $k_F^0 = \sqrt[3]{3\pi^2\bar{n}}$; числа k_{mn} определяются выражением (3). Здесь суммирование выполняется по всем значениям m и n , для которых $k_{mn} < k_F$.

3. Для нахождения спектра электронов в эллиптической квантовой проволоке с малым эксцентриситетом ($\epsilon = (a - b)/a \ll 1$, a и b — соответственно большая и малая полуоси эллипса), как и в работе [6], воспользуемся методом возмущения формы границы. Вследствие того что в гамильтониане отсутствуют члены, пропорциональные первому порядку по ϵ , модифицируем граничное условие (2). За нулевое приближение для волновых функций примем радиальные волновые функции, определяемые соотношением (1). В этом случае

$$\rho_0 = \frac{a + b}{2}$$

— эффективный радиус.

Ввиду малости эксцентриситета эллиптического сечения проволоки значение волновых функций на границе можно разложить в ряд Тейлора и ограничиться первыми двумя членами разложения

$$\begin{aligned} R_1 &= R_1^{(0)} + \epsilon\rho_0 \frac{d}{d\rho} R_1^{(0)}, \\ R_2 &= R_2^{(0)} + \epsilon\rho_0 \frac{d}{d\rho} R_2^{(0)}, \end{aligned} \quad (7)$$

где индексы 1 и 2 обозначают радиальные волновые функции внутри и вне проволоки.

Подставляя разложение (7) в граничное условие (2), после ряда математических преобразований получаем уравнение

$$\begin{aligned} &I_m(k_{mn}\rho_0)(1 + \epsilon) \\ &\times \left[\chi_{mn}I_m(k_{mn}\rho_0) - k_{mn}K_m(\chi_{mn}\rho_0)I_{m+1}(k_{mn}\rho_0) \right] \\ &= \epsilon\rho_0(k_{mn}^2 - \chi_{mn}^2)I_m(k_{mn}\rho_0)K_m(\chi_{mn}\rho_0). \end{aligned} \quad (8)$$

Соотношение (8) определяет спектр электронов в эллиптической квантовой проволоке с малым эксцентриситетом в случае потенциальной ямы конечной глубины.

В дальнейшем используем формулы (6) и (8) для определения размерной зависимости энергии Ферми.

4. Расчеты были проведены для нанопроволок золота с концентрацией электронов $\bar{n} = 3/4\pi r_s^3$ ($r_s = 3.01a_0$, a_0 — боровский радиус), погруженных в SiO_2 ($\chi = 1.1$ eV, $\epsilon = 4$, где χ — электронное средство, ϵ — диэлектрическая проницаемость) и Al_2O_3 ($\chi = 1.35$ eV, $\epsilon = 9$) [10].

Учет зонной структуры диэлектрика [5] требует переопределения работы выхода электронов из проволоки, а следовательно и значения глубины ямы. Так, в отличие от случая проволоки в вакууме

$$U_0 = \epsilon_F^0 + W_0, \quad (9)$$

где W_0 — работа выхода полубесконечный металл–вакуум, наличие диэлектрика приводит к зависимости глуби-

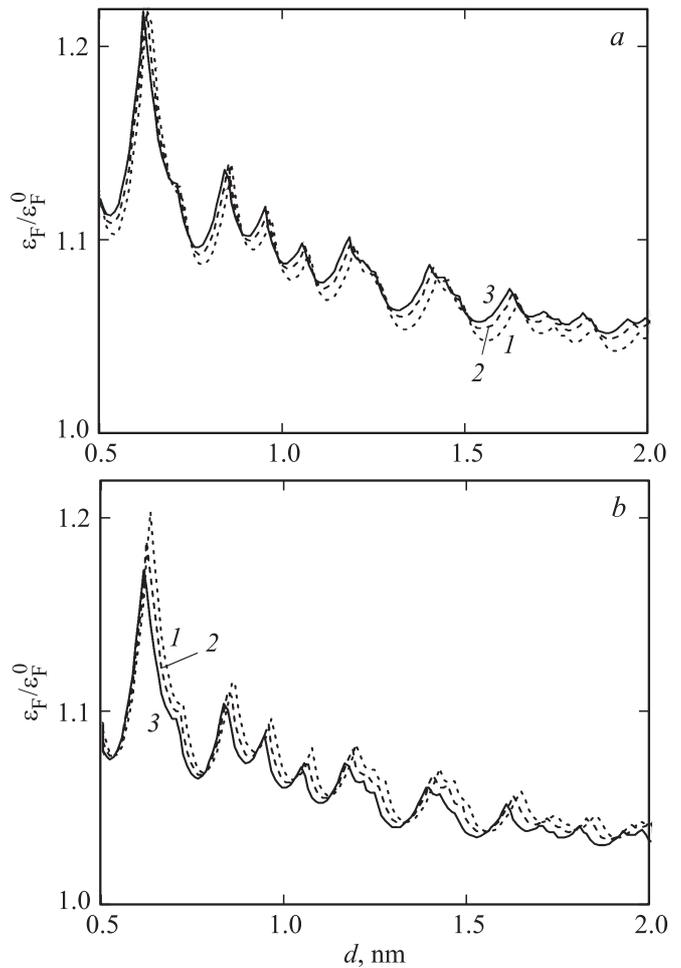


Рис. 1. Размерная зависимость энергии Ферми нанопроволоки Au с эксцентриситетом $\epsilon = 0$ (1), 0.05 (2), 0.1 (3) в различных средах. a — вакуум, b — Al_2O_3 .

ны потенциальной ямы $U(\epsilon)$ от величины диэлектрической проницаемости

$$U(\epsilon) = \epsilon_F^0 + W_d, \quad (10)$$

а величина W_d представляет собой барьер Шоттки (высоту потенциального барьера на границе металл–диэлектрик).

Существует два подхода к определению W_d : I — работа выхода в диэлектрик определяется как $W_d = W_0 - \chi$; II — значения W_d берутся из результатов самосогласованных расчетов [5].

Влияние геометрии поперечного сечения проволоки, находящейся в вакууме, на размерные осцилляции энергии Ферми продемонстрировано на рис. 1, a . Кривая 1 соответствует случаю круговой проволоки ($\epsilon = 0$), а кривые 2 и 3 — эллиптической проволоке с эксцентриситетом $\epsilon = 0.05$ и 0.1 соответственно. Как видно из рисунка, деформация поперечного сечения приводит к незначительному уменьшению амплитуды осцилляции и сдвигу минимумов и максимумов влево, что объясняется

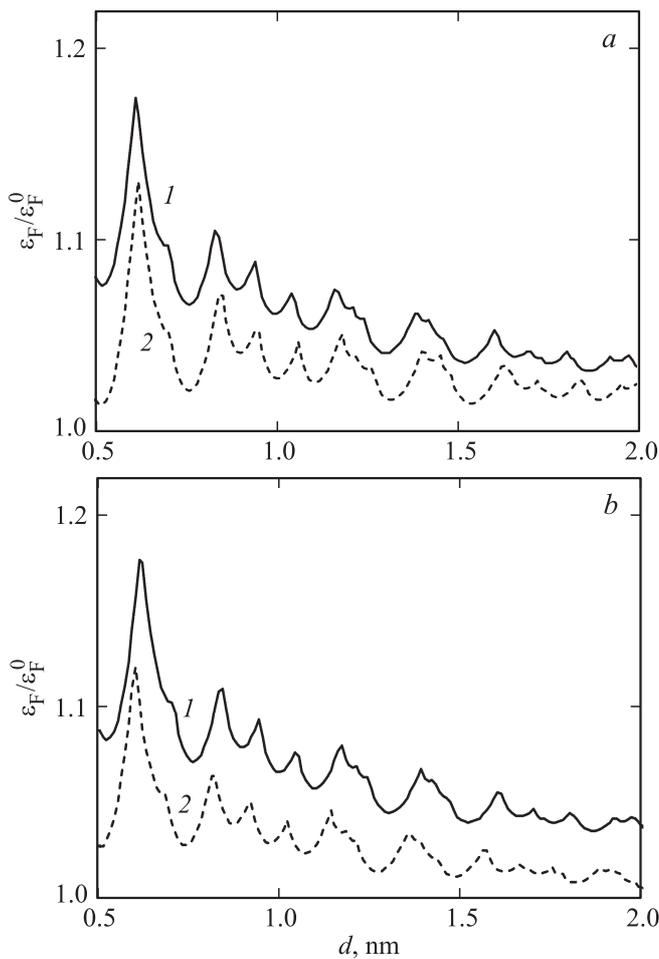


Рис. 2. Размерная зависимость энергии Ферми нанопроволоки Au с $\epsilon = 0.1$ в Al_2O_3 (a) и SiO_2 (b): 1 — подход I, 2 — подход II.

„проседанием“ энергетических уровней и уменьшением расстояния между ними.

На рис. 1, b приведены размерные зависимости энергии Ферми для проволок золота в Al_2O_3 , кривые 1–3 соответствуют аналогичным кривым на рис. 1, a. Наличие диэлектрического окружения приводит к более значительному уменьшению амплитуды осцилляции по сравнению со случаем вакуума, особенно выраженному для двух первых максимумов. Это связано с уменьшением глубины потенциальной ямы, обусловленным наличием диэлектрика. При этом величина сдвига минимумов и максимумов влево для кривых 2 и 3 остается неизменной.

Сравнение результатов расчетов, приведенных на рис. 1, a и b свидетельствует о том, что наличие диэлектрического окружения для любой геометрии поперечного сечения приводит к уменьшению значений энергии Ферми примерно на 5–6%.

Результаты расчетов энергии Ферми нанопроволок Au в Al_2O_3 и SiO_2 , иллюстрирующие применение подходов I и II, приведены на рис. 2 (кривые 1 и 2

соответственно). В обоих случаях независимо от вида диэлектрика имеет место следующее.

1. Для проволоки любого диаметра значения энергии Ферми, рассчитанные в рамках подхода I, больше, чем в подходе II, однако это различие составляет $\sim 3\text{--}4\%$ для Al_2O_3 (рис. 2, a) и $\sim 5\text{--}6\%$ для SiO_2 (рис. 2, b), что связано с большим различием в значениях χ и W_d для SiO_2 .

2. Величины $\epsilon_F^{\text{max}} - \epsilon_F^{\text{min}}$ для подходов I и II различаются незначительно.

3. Расположение минимумов и максимумов на размерных зависимостях и „период“ осцилляции не меняются.

Отметим, что аналогичные осцилляции энергии Ферми имеют место в объемном металле, находящемся в квантующем магнитном поле [11–13]. При этом роль эффективного диаметра d для 1D-систем в 3D-случае играет индукция магнитного поля \mathcal{B} . Качественно характер зависимости $\epsilon_F^{3D}(\mathcal{B})$ объясняется тем, что при изменении магнитного поля расстояние между пиками плотности состояний также меняется и пики периодически пересекают уровень Ферми, что и обуславливает появление „зубцов“ на зависимости энергии Ферми от индукции магнитного поля, аналогичных „зубцам“ на зависимости $\epsilon_F^{1D}(d)$. Кроме того, размах осцилляции для трехмерного и одномерного случаев близок по величине [11].

5. В работе исследовано влияние диэлектрического окружения на осцилляции энергии Ферми 1D-металлических систем с различной геометрией поперечного сечения. В рамках метода возмущения формы границы с учетом конечной глубины ямы рассчитан энергетический спектр электронов в ультратонких эллиптических нанопроволоках с малым эксцентриситетом.

Показано, что деформация кругового сечения проволок приводит к уменьшению значений энергии Ферми с увеличением эксцентриситета вследствие „проседания“ энергетических уровней и уменьшения расстояний между ними. Влияние диэлектрика сводится к уменьшению максимумов на размерной зависимости энергии Ферми.

Преимуществом предложенной в работе процедуры определения энергии Ферми по сравнению с ее определением с помощью самосогласованных расчетов является относительная простота. В дальнейшем воспользуемся полученными результатами для расчета компонент тензора оптической проводимости эллиптической нанопроволоки. Этому будет посвящена отдельная публикация.

Авторы выражают благодарность рецензенту за ценные замечания.

Список литературы

- [1] М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. ФТТ **50**, 354 (2008).
- [2] В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, А.В. Бабич, В.В. Погосов. ФТТ **51**, 2371 (2009).
- [3] В.Д. Дымников. ФТТ **53**, 5, 847 (2011).

- [4] K. Yaji, I. Mochizuki, S. Kim, Y. Takeichi, A. Harasawa, Y. Ohtsubo, P. LeFèvre, F. Bertran, A. Taleb-Ibrahimi, A. Kakizaki, F. Komori. *Phys. Rev. B* **87**, 241 413 (2013).
- [5] А.В. Бабич, В.В. Погосов. *ФТТ* **55**, 177 (2013).
- [6] А.В. Коротун. *ФТТ* **56**, 1197 (2014).
- [7] А.В. Коротун. *ФТТ* **57**, 371 (2015).
- [8] П.М. Томчук. *УФЖ* **47**, 833 (2002).
- [9] В.В. Погосов, Е.В. Васютин, В.П. Курбацкий, А.В. Коротун. *ФТТ* **48**, 1849 (2006).
- [10] Э.Х. Родерик. *Контакты металл–полупроводник. Радио и связь*, М. (1982). 208 с.
- [11] Н.Б. Брандт, С.М. Чудинов. *Электроны и фононы в металлах*. Изд-во МГУ, М. (1990). 335 с.
- [12] П.С. Киреев. *Физика полупроводников*. Высш. шк., М. (1975). 584 с.
- [13] Д. Шенберг. *Магнитные осцилляции в металлах*. Мир, М. (1986). 680 с.