

Диэлектрическая функция металлических 1D-систем

А.В. Коротун*, В.П. Курбацкий, В.В. Погосов

Запорожский национальный технический университет, ул. Гоголя, 64, 69063 Запорожье, Украина

(Получено 26.08.2016; в отредактированной форме – 19.12.2016; опубликовано online 23.12.2016)

В модели свободных электронов и цилиндрической потенциальной ямы вычислены диагональные компоненты диэлектрического тензора металлических нанопроволочек различных металлов. Проведено сравнение сглаженной размерной зависимости энергии Ферми с результатами численных расчетов. Исследовано влияние размерности системы на частотные зависимости диэлектрического тензора.

Ключевые слова: Нанопроволочка, Диэлектрический тензор, Энергия Ферми, Осцилляции, Частотная зависимость.

DOI: 10.21272/jnep.8(4(2)).04070

PACS numbers: 73.21.Hb, 79.67.Lt

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследованию металлических нанопроволочек в настоящее время уделяется большое внимание в связи с широкими перспективами их применения в наноэлектронике [1-3]. В частности, металлические 1D-системы используются как оптические антенны [4-6] в спектроскопии для увеличения сечения комбинационного рассеяния [7] и как специализированные зонды для ближнепольной микроскопии [8].

Характерной чертой таких систем является анизотропия их оптических свойств, обусловленная эффектами размерного квантования. В связи с этим, такие величины как оптическая проводимость или диэлектрическая функция приобретают тензорный характер [9,10].

Целью данной работы является вычисление диагональных компонент диэлектрического тензора ме-

таллических нанопроволочек.

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Вследствие анизотропии оптических свойств металлических систем пониженной размерности связь между компонентами индукции \mathcal{D}_α и напряженности \mathcal{E}_β электрического поля носит нелокальный характер [10]:

$$\mathcal{D}_\alpha(\mathbf{r}, \omega) = \int \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathcal{E}_\beta(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}'. \quad (1)$$

Для определения диэлектрического тензора $\epsilon_{\alpha\beta}$ воспользуемся результатами [11], обобщенными на случай анизотропных систем:

$$\epsilon_{\alpha\beta} = 1 - \frac{8\pi e^2 \hbar^2}{m_e^2 \Omega} \sum_{i,j} \frac{f_i - f_j}{\epsilon_{ij}} \left\{ \langle j | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \hat{p}_\alpha | i \rangle - \frac{1}{2} \hbar q_\alpha \langle j | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | i \rangle \right\} \left\{ \langle i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \hat{p}_\beta | j \rangle + \frac{1}{2} \hbar q_\beta \langle i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | j \rangle \right\}. \quad (2)$$

Здесь i – мнимая единица ($i = \sqrt{-1}$); m_e – масса свободного электрона; Ω – объем системы;

$$f_i = \left\{ \exp\left(\frac{\epsilon_i - \epsilon_F}{k_B T}\right) + 1 \right\}^{-1}$$

– коэффициент заполнения состояний с энергией ϵ_i ; $|i\rangle$ та $|j\rangle$ – вектора начального и конечного состояний, соответственно $\epsilon_{ij} \equiv \epsilon_i - \epsilon_j$, T – температура. В дальнейшем будем считать $T = 0$.

В случае, когда электромагнитная волна падает перпендикулярно к оси симметрии проволочки в

нулевом приближении разложения $\epsilon_{\alpha\beta}$ по малому параметру $\rho_0 / \lambda \ll 1$ (ρ_0 – характерный размер системы; λ – длина волны) выражение (2) принимает вид

$$\epsilon_{\alpha\beta} = 1 - \frac{8\pi e^2 \hbar^2}{m_e^2 \Omega} \sum_{i,j} \frac{f_i - f_j}{\epsilon_{ij} (\epsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2)} \langle j | \hat{p}_\alpha | i \rangle \langle i | \hat{p}_\beta | j \rangle. \quad (3)$$

Поглощение учитывается заменой $\omega \rightarrow \omega + i/\tau$, в результате чего для диагональных компонент диэлектрического тензора получаем

$$\epsilon_{\alpha\alpha} = 1 - \frac{8\pi e^2 \hbar^2}{m_e^2 \Omega} \sum_{i,j} \frac{f_i (\epsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2 + \hbar^2 / \tau^2 + i 2\hbar^2 \omega / \tau)}{\epsilon_{ij} \left[(\epsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2 + \hbar^2 / \tau^2)^2 + 4\hbar^4 \omega^2 / \tau^2 \right]} \left| \langle j | \hat{p}_\alpha | i \rangle \right|^2. \quad (4)$$

где τ – время релаксации.

Для расчета диагональных компонент диэлектри-

ческого тензора воспользуемся выражениями для матричных элементов проекций оператора импульса, по-

* andko@zntu.edu.ua

лученными в работе [9]:

$$\langle j | \hat{p}_\alpha | i \rangle = \begin{cases} \hbar k_{zp} \delta_{ij}, & \alpha = z; \\ -\frac{i\hbar}{2} \delta_{pp'} k_{mn} C_{mn} \mathcal{G}_{(-)}, & \alpha = x; \\ \frac{\hbar}{2} \delta_{pp'} k_{mn} C_{mn} \mathcal{G}_{(+)}, & \alpha = y, \end{cases} \quad (5)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера и

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(\mp)} &= \mathcal{I}_{(-)} \delta_{m-1, m'} \mp \mathcal{I}_{(+)} \delta_{m+1, m'}; \\ \mathcal{I}_{(\mp)} &\equiv C_{m\mp 1, n} \int_0^{\rho_0} I_{m\mp 1}(k_{m\mp 1, n'} \rho) I_{m\mp 1}(k_{mn} \rho) \rho d\rho; \\ C_{mn} &= \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 |I'_m(k_{mn} \rho_0)|}; \end{aligned} \quad (6)$$

$I_m(\xi)$ – функции Бесселя m -го порядка, $n = 1, 2, \dots$; штрих означает производную по ξ ; числа k_{mn} – корни уравнения:

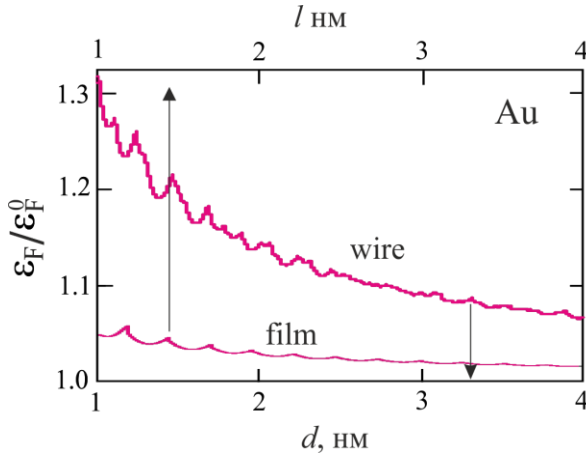
$$I_m(k_{mn} \rho_0) = 0. \quad (7)$$

Подставляя формулы (6)-(7) в (4), после достаточно громоздких преобразований и разделения действительной и мнимой частей диэлектрической функции, получаем

$$\text{Re} \epsilon_{\alpha\alpha} = 1 - \frac{k_p^4}{k_\omega^4 + \gamma^4} \left\{ 1 + \frac{\gamma^2}{k_\omega^2} S(\omega, \rho_0) \right\}, \quad (8)$$

$$\text{Im} \epsilon_{\alpha\alpha} = \frac{k_p^4 \gamma^2}{k_\omega^2 (k_\omega^4 + \gamma^4)} \{ 1 + S(\omega, \rho_0) \}, \quad (9)$$

где индекс $\alpha = x, y$; $k_\omega^2 \equiv 2m_e \omega / \hbar$; $\gamma^2 \equiv 2m_e / \hbar \tau$; $k_p^2 \equiv 2m_e \omega_p / \hbar$; $\omega_p^2 \equiv 4\pi \bar{n} e^2 / m_e$ – плазменная частота;



$$S(\omega, \rho_0) \equiv \frac{2}{Nm_e} \sum_{i,j} f_{mnp} k_{mn}^2 C_{mn}^2 \{ \mathcal{F}_{(-)} + \mathcal{F}_{(+)} \}; \quad (10)$$

$$\mathcal{F}_{(\mp)} = \frac{(k_{mn}^2 - k_{m\mp 1, n'}^2) \{ (k_{mn}^2 - k_{m\mp 1, n'}^2)^2 - 3k_\omega^4 + \gamma^4 \}}{[(k_{mn}^2 - k_{m\mp 1, n'}^2)^2 - k_\omega^4 + \gamma^4]^2 + 4k_\omega^4 \gamma^4} \mathcal{I}_{(\mp)}^2; \quad (11)$$

f_{mnp} – ступенчатая функция

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

Для проведения численных расчетов по формулам (8)–(11) их необходимо дополнить соотношением, определяющим уровень Ферми металлической нанопроволочки [9]:

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 \rho_0^2} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2}. \quad (12)$$

Здесь суммирование происходит по всем значениям m и n , для которых $k_{mn} < k_F$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Вычисления были проведены для значений электронных концентраций $\bar{n} = (4\pi r_s^3 / 3)^{-1}$, $r_s = 3,01a_0$, $2,11a_0$ та $2,07a_0$ для Au, Cu та Al соответственно (a_0 – боровский радиус; r_s – среднее расстояние между электронами).

На рис. 1 представлена размерная зависимость энергии Ферми проволочек Au и Al. Она имеет "осциллирующий" вид. Однако в отличие от размерной зависимости энергии Ферми металлических пленок [12], изменение ϵ_F на рис. 1 имеет хаотический вид.

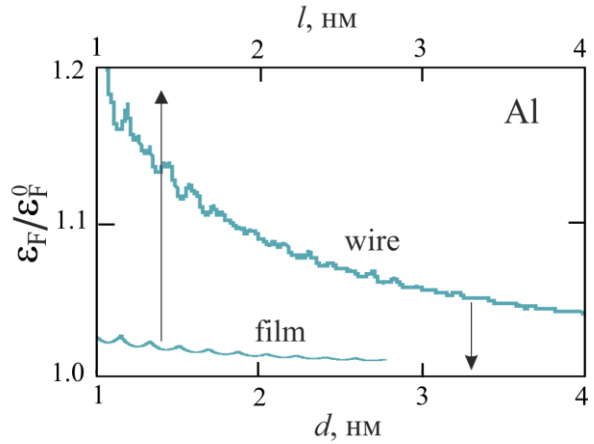


Рис. 1 – Размерная зависимость энергии Ферми металлических проволочек ($d = 2\rho_0$) и пленок [10]

В случае пленки зубцы на размерной зависимости (т. е. скачки производной $d\epsilon_F / dl$, l – толщина

пленки) расположены регулярно с примерно постоянным периодом $\Delta l \approx \pi / k_F^0$. На размерной зависимо-

сти энергии Ферми проволочки зубец появляется тогда, когда увеличивающийся радиус ρ_0 достигает такого значения $\rho_{0m'n'}$, при котором условие $k_{mn} < k_F$ 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 различных порядков и изменяется, на первый взгляд, случайным образом.

Размах осцилляций в проволочке и пленке при $d \cong l$ величины одного порядка. Как и в случае пленки, с увеличением размера $d \rightarrow \infty$ "период" Δd и амплитуда осцилляций стремятся к нулю.

Особенности размерной зависимости энергии Ферми нанопроволочек различных металлов объясняются исключительно различными значениями k_F^0 . Для проволочки Al по сравнению с проволочкой Au масштаб Δd осцилляций мельче (поскольку больше плотность распределения корней $a_{mn} \approx k_F^0 \rho_0 / \pi$), амплитуда и сглаженное значение $\epsilon_F / \epsilon_F^0$ меньше.

Воспользуемся результатами численного расчета, представленными на рис. 1, для проверки сглаженной размерной зависимости [8]:

$$\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} = \frac{k_F^2}{k_F^{02}} \cong A^2 + \frac{2AB}{k_F^0 \rho_0}, \quad (13)$$

где $A^2 = 1,10$, $AB = 1,22$.

$$\frac{\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1,10\right)_{Au}}{\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1,10\right)_{Al}} = \frac{\left(k_F^0\right)_{Au}}{\left(k_F^0\right)_{Al}} = \frac{1,75 \cdot 10^{10}}{1,21 \cdot 10^{10}} = 1,45.$$

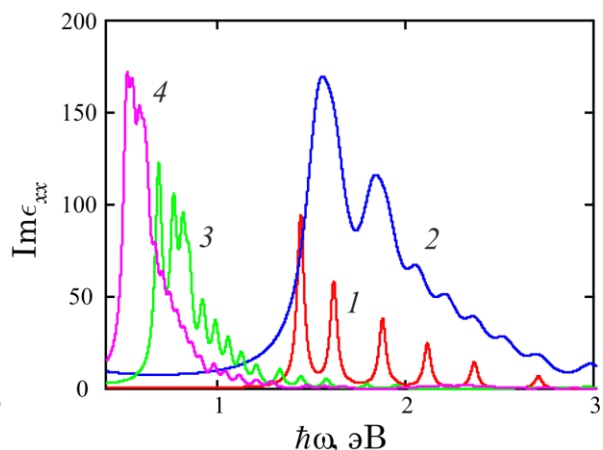
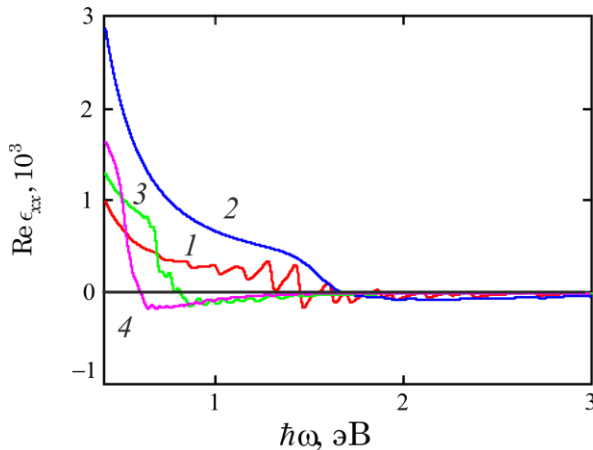


Рис. 2 – Частотная зависимость диагональной компоненты диэлектрического тензора нанопроволочек золота разного диаметра

Согласно рис. 1, для $d = 1$ нм

$$\frac{\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1\right)_{Au}}{\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1\right)_{Al}} \approx \frac{0,30}{0,19} = 1,58.$$

Если взять во внимание достаточно большую погрешность считывания данных с рисунка, согласие между результатами вычислений по формуле (13) и численного расчета можно признать удовлетворительным.

Далее проверим обратно пропорциональную зависимость $\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1,1\right) \propto \frac{1}{d}$. Результаты проверки приведены в табл. 1 и показывают достаточно хорошее согласие.

Таблица 1 – Результаты проверки обратно пропорциональной зависимости $\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1,1\right) \propto \frac{1}{d}$

№	d , нм	$\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1,1\right) \propto \frac{1}{d}$ по рис. 1 для Au	$\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_F^0} - 1,1\right) \propto \frac{1}{d}$ расчет по формуле (13)
1	1	1	1
2	1,5	0,64	0,67
3	2	0,47	0,50
4	3	0,31	0,33
5	4	0,23	0,25
6	5	0,18	0,20

На рис. 2 приведены частотные зависимости действительной и мнимой частей диагональной компоненты ϵ_{xx} диэлектрического тензора нанопроволочек Au диаметром $d=1,6, 2, 3$ и 4 нм (кривые 1 – 4, соответственно). Для $\text{Re}\epsilon_{xx}$ осцилляции имеют место только для проволочек диаметром $1,6$ нм и с увеличением диаметра исчезают. Амплитуда осцилляций достигает максимального значения при $\hbar\omega \approx 1,5$ эВ. В то время как значения $\text{Im}\epsilon_{xx}(\hbar\omega)$ с увеличением диаметра сдвигается в область меньших частот, амплитуда осцилляций возрастает, расстояния между пиками уменьшается, а для $d=4$ нм – осцилляции сглаживаются. Это обусловлено тем, что с увеличением величины d возрастает число уровней размерного квантования, а значит и число возможных переходов между ними.

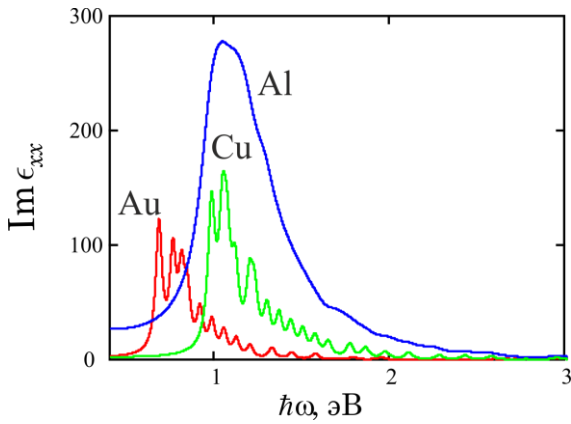


Рис. 3 – Частотная зависимость мнимой части диэлектрической функции проволочек различных металлов

$$\Phi_{(\mp)} = \sum_{m=1}^{m_F} \sum_{m'=1}^{m_{\max}} \frac{k_{xm}^2 k_{xm'}^2 (k_F^2 - k_{xm}^2) \{1 - (-1)^{m+m'}\} \left\{ (k_{xm'}^2 - k_{xm}^2)^2 \mp k_0^4 \mp \gamma^4 \right\}}{(1 + 2/L\kappa_m)(1 + 2/L\kappa_{m'}) (k_{xm}^2 - k_{xm'}^2)^3 \left\{ \left((k_{xm'}^2 - k_{xm}^2)^2 - k_0^4 + \gamma^4 \right)^2 + 4\gamma^4 k_0^4 \right\}}; \quad (16)$$

$$m_F \equiv \left[\frac{Lk_F}{\pi} + \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{k_F}{k_0} \right], \quad m_{\max} \equiv \left[\frac{Lk_0}{\pi} \right] + 1. \quad (17)$$

Квадратные скобки в (17) означают целую часть числа. Поскольку расчет в [14] выполнялся для ямы конечной глубины U_0 , то величины k_{xm} являются корнями уравнения

$$k_{xm} l = \pi m - 2 \arcsin \left(\frac{k_{xm}}{k_0} \right), \quad (18)$$

где $\hbar k_0 \equiv \sqrt{2m_e |U_0|}$; $\kappa_m \equiv \sqrt{k_0^2 - k_{xm}^2}$.

На рис. 4 приведены зависимости $\text{Im}\epsilon_{xx}(\hbar\omega)$ для проволочки Al диаметром $d=2$ нм и пленки Al толщиной $l=2$ нм [14]. Как видно из рисунка, осцилляции имеют место в различных частотных интервалах: для проволочки при $\hbar\omega > 1,8$ эВ, а для пленки – при $\hbar\omega < 1,8$ эВ. Это объясняется тем, что в проволочке расстояния между уровнями размерного

квантования больше, чем в пленке. На рис. 3 изображены частотные зависимости $\text{Im}\epsilon_{xx}$ для проволочек различных металлов диаметром $d=3$ нм. Для Al диэлектрическая функция имеет один максимум и осцилляции отсутствуют. С увеличением частоты осцилляции затухают как для Cu, так и для Au. Такое поведение диэлектрической функции объясняется малым значением времени релаксации электронов алюминия $\tau = 0,8 \cdot 10^{-14}$ с [13], так что ширина пиков примерно составляет $\hbar/\tau = 0,082$ эВ по сравнению с двумя другими металлами.

Сравним результаты расчетов диэлектрической функции металлических нанопроволочек с аналогичными результатами для тонких пленок [14]. Исходный пункт, которым можно считать формулу (4) при $\alpha = x$, одинаков в обоих случаях (пленка ориентирована перпендикулярно оси x).

Для пленки толщиной l и продольными размерами a и b ($l \ll a, b$) выражение для диэлектрической функции имеет вид [14]:

$$\text{Re}\epsilon_{xx} = 1 + \left(\frac{4}{L} \right)^4 \frac{L}{a_0} \Phi_{(-)}, \quad (14)$$

$$\text{Im}\epsilon_{xx} = \left(\frac{4}{L} \right)^4 \frac{L}{a_0} \frac{\gamma^2}{k_\omega^2} \Phi_{(+)}, \quad (15)$$

где

квантования больше, чем в пленке.

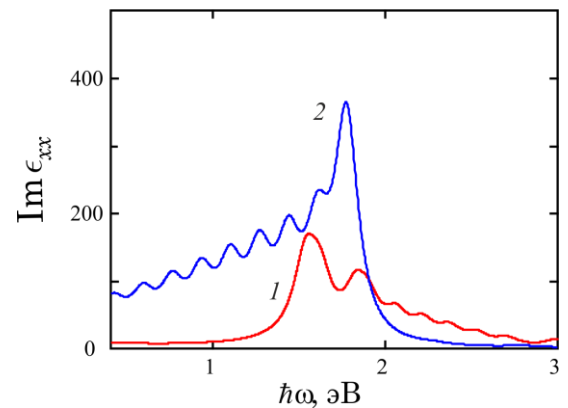


Рис. 4 – Частотная зависимость мнимой части диэлектрической функции проволочки (1) и пленки (2) алюминия

4. ВЫВОДЫ

В работе вычислены диагональные компоненты

диэлектрического тензора металлических нанопроволочек с учетом размерной зависимости энергии Ферми. Сравнение сглаженной размерной зависимости с результатами численных расчетов из точной процедуры показало хорошее согласие.

Исследована эволюция частотных зависимостей действительной и мнимой частей диэлектрической функции при вариации диаметра. Установлено, что с увеличением диаметра проволочки пики смещаются влево, расстояние между ними уменьшается, и они накладываются друг на друга.

Поведение мнимых частей диэлектрической

функции для различных металлов качественно подобно, а количественно отличаются тем, что значения $(\hbar\omega)_{\min}$, с которого начинаются осцилляции разные, вследствие отличия в значениях электронных концентраций и времен релаксации.

Показано, что частотные области, в которых имеют место осцилляции, для проволок и пленок разные, что объясняется отличиями в размерности системы и появлением дополнительного ограничения на движение электронов с понижением размерности системы.

The Dielectric Function of Metal 1D-systems

A.V. Korotun, V.P. Kurbatsky, V.V. Pogoso

Zaporizhzhya National Technical University, 64, Gogol st., 69063 Zaporizhzhya, Ukraine

The dielectric tensor diagonal components for a metal nanowires of different metals has been calculated within the model of free electrons and cylindrical potential well. The smooth size dependence of the Fermi energy has been comparison with the results of the numerical calculations. The influence of the dimension of the systems on the frequency dependence of the dielectric tensor has been investigated.

Keywords: Nanowire, Dielectric tensor, Fermi Energy, Oscillations, Frequency dependence.

Діелектрична функція металевих 1D-систем

А.В. Коротун, В.П. Курбацький, В.В. Погосов

Запорізький національний технічний університет, вул. Гоголя, 64, 69063 Запоріжжя, Україна

У моделі вільних електронів та циліндричної потенціальної ями розраховані діагональні компоненти діелектричного тензора металевих нанодротів різних металів. Проведено порівняння згладженої розмірної залежності енергії Фермі з результатами чисельних розрахунків. Досліджено вплив розмірності системи на частотні залежності діелектричного тензора.

Ключові слова: Нанодріт, Діелектричний тензор, Енергія Фермі, Осциляції, Частотна залежність.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Gloskovskii, D.A. Valdaitsev, M. Nepijko, J. Lange, V. Aeschlimann, V. Bauer, M. Klimenkov, L.V. Viduta, P.M. Tomchuk, G. Schonhense, *Phys. Rev. B* **77** No 19, 195427 (2008).
2. A. Kumar, As. Kumar, P.K. Ahluwalia, *Phys. E* **46**, 259 (2012).
3. K. Moors, B. Sorée, Z. Tokei, W. Magnus, [arXiv:1503.08015v3](https://arxiv.org/abs/1503.08015v3).
4. A. Pucci, F. Neubrech, D. Weber, S. Hong, T. Toury, M. Lamy de la Chapelle, *phys. status solidi b* **247** No 8, 2071 (2010).
5. А.Е. Краснок, И.С. Максимов, А.И. Денисюк, П.А. Белов, А.Е. Мирошниченко, К.Р. Симовский, Ю.С. Кившарь, *УФН* **183**, 561 (2013) (A.Ye. Krasnok, I.S. Maksimov, A.I. Denisyuk, P.A. Belov, A.Ye. Miroshnichenko, K.R. Simovskiy, Yu.S. Kivshar', *Usp.-Phys.* **183**, 561 (2013)).
6. D.A. Zuev, S.V. Makarov, I.S. Mukhin, S.V. Starikov, I.A. Morozov, I.I. Shishkin, A.E. Krasnok, P.A. Belov, *Adv. Mater.* **28** No 16, 3087 (2016).
7. M. Fan, G.F. Andrade, A.G. Brolo, *Anal. Chim. Acta* **693**, 7 (2011).
8. T.H. Taminiau, F.D. Stefani, F.B. Segerink, N.F. van Hulst, *Nature Photon.* **2**, 234. (2008).
9. В.П. Курбацький, А.В. Коротун, А.В. Бабич, В.В. Погосов, *ФТТ* **51**, 2371 (2009) (V.P. Kurbatsky, A.V. Korotun, A.V. Babich, V.V. Pogoso, *Phys. Solid State* **51**, 2371 (2009)).
10. V.P. Kurbatsky, V.V. Pogoso, *Phys. Rev. B* **81**, 155404 (2010).
11. D.M. Wood, N.W. Ashcroft, *Phys. Rev. B* **25**, 6255 (1982).
12. В.П. Курбацький, В.В. Погосов, *ФТТ* **46**, 526 (2004) (V.P. Kurbatsky, V.V. Pogoso, *Phys. Solid State* **46**, 543 (2004)).
13. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, Т. 1 (Москва: Мир: 1979) (N. Ashcroft, N. Mermin, *Fizika tverdogo tela, T. 1* (Moskva: Mir: 1979)).
14. В.П. Курбацький, А.В. Коротун, В.В. Погосов, Е.В. Васютин, *ФТТ* **50**, 909 (2008) (V.P. Kurbatsky, A.V. Korotun, V.V. Pogoso, Ye.V. Vasyutin, *Phys. Solid State* **50**, 949 (2008)).