РОЗМІРНІ ОСЦИЛЯЦІЇ ЕНЕРГІЇ ФЕРМІ МЕТАЛЕВИХ НАНОПЛІВОК ІЗ ПЕРІОДИЧНО МОДУЛЬОВАНОЮ ПОВЕРХНЕЮ

А. В. Коротун, І. М. Тітов

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

(Отримано 28 листопада 2018 р.; в остаточному вигляді — 28 січня 2019 р.)

Досліджено вплив періодичних мікронеоднорідностей поверхні на енергію Фермі металевих наноплівки. Розрахунок спектра проведено в межах квантово-механічної теорії збурень. Розглянуто випадки різних значень амплітуди модуляції. Проаналізовано особливості розмірної залежності відносної енергії Фермі наноплівки різних металів. Установлено, що для наноплівки із періодичною неоднорідністю поверхні енергія Фермі більша, ніж для “гладкої” плівки.

Ключові слова: металева наноплівка, періодична модуляція, енергія Фермі, теорія збурень.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.23.2601>

PACS number(s): 68.35.Ct, 73.20.At

І. ВСТУП

На сьогодні вивчення квантово-розмірних ефектів у металевих 2D-системах є актуальним [1–6]. У таких системах залежності енергії Фермі від товщини наноплівки мають осцилюючий характер, зумовлений розмірними ефектами. У багатьох роботах (див. [5] та посилання в ній) дослідження таких систем проведено у припущенні про ідеально гладкі поверхні плівки. Проте такий підхід є ідеалізованим, оскільки одержання однорідних за товщиною плівок у досліді є практично неможливе. Крім того, реальна наноструктура не може бути атомарно гладкою, тому що на її поверхні завжди є мікроскопічні неоднорідності, які й зумовлюють додаткове розсіювання електронів.

Історично першою спробою врахувати неоднорідності товщини плівки була одновимірна модель Намба [7, 8], у якій неоднорідності товщини розподілені за законом $h(y) = L + f(y) = L + A \sin \kappa y$, де A — амплітуда модуляції, L — середня товщина плівки, κ — величина, обернена просторовому періоду неоднорідності. Унаслідок того, що наноплівка являє собою 2D-систему, логічним є розгляд періодичної модуляції її поверхні у двох напрямках. Це підтверджується дослідженнями атомної топографії поверхні, наведеними в роботах [9, 10].

Тому врахування впливу двовимірної періодичної мікронеоднорідності на енергетичні характеристики металевих наноплівок є актуальним. У статті розраховано спектр електронів у наноплівці з періодично модульованою поверхнею та розмірні осциляції енергії Фермі за різних значень амплітуди модуляції для різних металів.

ІІ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Розглянемо металеву наноплівку з періодично модульованою у двох напрямках поверхнею, коли рівняння поверхні в декартовій системі координат має

вигляд $h(y, z) = L + A \sin \kappa y \sin \kappa z$ — періодична функція.

Вважатимемо модуляцію слабкою ($A \ll L$), а просторовий період модуляції $\Lambda = 2\pi/\kappa \sim a, b$, де a і b — поперечні розміри плівки ($a, b \gg L$). У цьому випадку маємо

$$L \ll \Lambda, \quad \kappa A \ll 1, \quad \left| \frac{\partial h}{\partial y} \right|, \quad \left| \frac{\partial h}{\partial z} \right| \ll 1. \quad (1)$$

Застосуємо перетворення координат

$$x' = \frac{L}{L + f(y, z)} x, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad (2)$$

яке випрямляє межі плівки. У нових координатах поверхні плівки збігатимуться з площинами $x' = 0$ та $x' = L$. Для того щоб записати рівняння Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi + U \psi = E \psi, \quad (3)$$

де ψ — хвильова функція електрона; U — потенціальна енергія; E — повна енергія; m_e — маса електрона; у новій системі координат, потрібно провести перетворення оператора Лапласа за формулою

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,k} \partial_i (\sqrt{g} g^{ik} \partial_k), \quad (4)$$

де g^{ik} — контраваріантний метричний тензор; $g = \det [(g^{ik})^{-1}]$ — його детермінант.

Компоненти контраваріантного метричного тензора обчислюють за формулою

$$g^{ik}(x', y', z') = \left[\frac{\partial x_i}{\partial x} \frac{\partial x_k}{\partial x} + \frac{\partial x_i}{\partial y} \frac{\partial x_k}{\partial y} + \frac{\partial x_i}{\partial z} \frac{\partial x_k}{\partial z} \right] \quad (5)$$

Використовуючи формули (4)–(5), отримаємо оператор Лапласа в нових координатах у першому наближенні за A/L :

$$\Delta \cong \left(1 - 2\frac{A}{L} \sin \kappa y' \sin \kappa z'\right) \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} - \frac{A}{L} \kappa \left(\cos \kappa y' \sin \kappa z' \frac{\partial}{\partial y'} + \sin \kappa y' \cos \kappa z' \frac{\partial}{\partial z'} \right) + 2\frac{A}{L} \kappa^2 x' \sin \kappa y' \sin \kappa z' \frac{\partial}{\partial x'}. \quad (6)$$

Відповідно до квантовомеханічної теорії збурень запишемо гамільтоніан електрона у вигляді

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta' + U = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}, \quad (7)$$

де

$$U = \begin{cases} U_0, & x' > L; \\ 0, & 0 \leq x' \leq L; \\ U_0, & x' < 0 \end{cases} \quad (8)$$

— потенціальна енергія (U_0 — глибина потенціальної

ями);

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x'^2} + \frac{\partial}{\partial y'^2} + \frac{\partial}{\partial z'^2} \right) + U \quad (9)$$

— незбурений гамільтоніан;

$$\hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[-2\frac{A}{L} \sin \kappa y' \sin \kappa z' \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + 2\frac{A}{L} \kappa^2 x' \sin \kappa y' \sin \kappa z' \frac{\partial}{\partial x'} - \frac{A}{L} \kappa \left(\cos \kappa y' \sin \kappa z' \frac{\partial}{\partial y'} + \sin \kappa y' \cos \kappa z' \frac{\partial}{\partial z'} \right) \right] \quad (10)$$

— оператор збурення.

У першому порядку теорії збурень поправка для власних значень енергії визначається співвідношенням.

$$E_n^{(1)} = \int_{V'} \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dV', \quad (11)$$

де хвильова функція електрона в нульовому наближенні у скінченній ямі має вигляд:

$$\psi(x') = \begin{cases} A_n e^{\kappa_n x'}, & x' < 0; \\ A_n \frac{k_0}{k_{x'n}} \sin \left(k_{x'n} x' + \arcsin \frac{k_{x'n}}{k_0} + \pi n \right), & 0 < x' < L; \\ A_n e^{\kappa_n (L-x')}, & x' > L. \end{cases} \quad (12)$$

Тут

$$A_n = \left[\frac{1}{\kappa_n} + \frac{k_0^2 L}{2k_{x'n}^2} - \frac{k_0^2}{2k_{x'n}^3} \sin k_{x'n} L \cos \left(k_{x'n} L + 2 \arcsin \frac{k_{x'n}}{k_0} \right) \right]^{-\frac{1}{2}},$$

$k_0^2 \equiv 2m_e |U_0| / \hbar^2$, $\kappa_n^2 = k_0^2 - k_{x'n}^2$, а $k_{x'n}$ визначаються розв'язком трансцендентного рівняння

$$k_{x'n} L = \pi n - 2 \arcsin \frac{k_{x'n}}{k_0}. \quad (13)$$

Повні (тривимірні) хвильові функції електрона в плівці

$$\Psi_n^{(0)}(x', y', z') = \frac{2}{\sqrt{ab}} \Psi_n^{(0)}(x') \sin k_{y'} y' \sin k_{z'} z' \quad (14)$$

$$\Psi_n^{(0)*}(x', y', z') = \frac{2}{\sqrt{ab}} \Psi_n^{(0)*}(x') \sin k_{y'} y' \sin k_{z'} z'$$

Підставляючи в (11) хвильові функції (12) та (14), матимемо

$$E_n^{(1)} = \frac{\hbar^2 A}{\pi^2 m_e L} \left(\kappa_n^{(0)2} - \frac{L}{2} k_0^2 \left[\frac{1}{\kappa_n^{(0)}} + \frac{k_0^2 L}{2k_{x'n}^{(0)2}} - \frac{k_0^2}{2k_{x'n}^{(0)3}} \sin k_{x'n}^{(0)} L \cos \left(k_{x'n}^{(0)} L + 2 \arcsin \frac{k_{x'n}^{(0)}}{k_0} \right) \right]^{-1} \right). \quad (15)$$

Отже, енергетичний спектр електронів у тонкій металевій плівці можна записати

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(k_{\parallel}^2 + k_{x'n}^2 \right), \quad (16)$$

де $k_{\parallel}$ — хвильовий вектор електрона у площині плівки, а величина поперечної компоненти хвильового вектора $k_{x'n}$ визначається в першому порядку теорії збурень так:

$$k_{x'n} \cong k_{x'n}^{(0)} + k_{x'n}^{(1)}, \quad (17)$$

$k_{x'n}^{(0)}$ — корені рівняння (13) у нульовому наближенні, а $k_{x'n}^{(1)} = m_e E_n^{(1)} / \hbar^2 k_{x'n}^{(0)}$.

Інтегруючи густину станів двовимірного електронного газу за $k_{\parallel}$ та прирівнюючи кількість заповнених станів до кількості електронів провідності, отримаємо рівняння для визначення розмірно-залежної енергії Фермі ε_F :

$$k_F^2 = \frac{1}{n_F} \left(2\pi \bar{n} L + \sum_{n=1}^{n_F} k_{x'n}^2 \right), \quad (18)$$

де $\hbar^2 k_F^2 = 2m_e \varepsilon_F$; $\bar{n}$ — концентрація електронів провідності у 3D-металі; n_F — номер останньої зайнятої або частково зайнятої підзони.

Рис. 1. Розмірна залежність енергії Фермі плівок різних металів: а — Al; б — Au; в — Cu; 1 — $A/L = 0$; 2 — $A/L = 0,05$; 3 — $A/L = 0,1$.

III. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки проведено для наноплівок Al, Cu та Au з концентрацією електронів $\bar{n} = 3/4\pi r_s^3$, із відповідними значеннями $r_s = 2.07a_0, 2.11a_0, 3.01a_0$ (a_0 — борівський радіус).

У всьому діапазоні розмірів дотримується нерівність $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0 > 1$. Зубці на розмірній залежності (тобто стрибки похідної $d\varepsilon_F/dL$) розташовуються регулярно з приблизно сталим періодом $\Delta L \approx \pi/k_F^0$ ($k_F^0 = \sqrt{2m_e \varepsilon_F^0}$). Зі збільшенням середньої товщини плівки $L \rightarrow \infty$ амплітуда осциляцій прямує до нуля, а їхній “період” ΔL — до нескінченності.

Як видно з рис. 1, врахування модуляції поверхні приводить до збільшення енергії Фермі порівняно з гладкою плівкою (крива 1) за збереження загального характеру залежності.

Особливості розмірної залежності енергії Фермі плівок різних металів демонструє рис. 2. Криві $\varepsilon_F(L)$ для різних металів якісно подібні, проте амплітуди й періоди відрізняються. Відмінності в періодах осциляцій пояснюються тільки різними значеннями ε_F^0 . Так, для плівок Al порівняно з плівками Au масштаб осциляцій ΔL дрібніший, оскільки більша величина ε_F^0 , амплітуда осциляцій і згладжене значення $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0$ менші. Плівки Cu в цьому плані близькі до плівок Al, що пояснюється близькими значеннями ε_F^0 .

Рис. 2. Розмірна залежність енергії Фермі плівок різних металів при $A/L = 0,1$.

IV. ВИСНОВКИ

У межах теорії збурень розраховано енергетичний спектр електронів нанорозмірних металевих плівок із періодично модульованою у двох напрямках поверхнею.

Установлено, що поведінка розмірних осциляцій енергії Фермі плівок різних металів визначається значеннями електронної густини. Так, для металів із

більшою концентрацією електронів період, амплітуда осциляцій та згладжені значення енергії Фермі менші.

Продemonстровано, що для всіх розглянутих металів і амплітуд модуляцій, для яких проведено розрахунки, зі збільшенням середньої товщини плівки амплі-

туда осциляцій прямує до нуля, а їхній період — до нескінченості.

Показано, що врахування періодичної неоднорідності поверхні плівки приводить до збільшення величини енергії Фермі порівняно з “гладкою” плівкою.

-
- [1] M. Liu *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 125427 (2012); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.125427>.
 - [2] R. T. Tung, Appl. Phys. Rev **1**, 011304 (2014); <https://doi.org/10.1063/1.4858400>.
 - [3] А. В. Бабич, Физ. мет. металловед. **115**, 1 (2014).
 - [4] R.-Y. Liuet *al.*, Phys. Rev. B. **92**, 115415 (2015); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.115415>.
 - [5] A.V. Korotun, Phys. Solid State **57**, 391 (2015); <https://doi.org/10.1134/S1063783415020213>.
 - [6] A. C. Korotun, A. V. Babich, Ya. V. Karandas, Phys. Metals Metallogr. **117**, 426 (2016); <https://doi.org/10.1134/S0031918X16050112>.
 - [7] А. П. Шпак, Р. І. Бігун, З. В. Стасюк, Ю. А. Куницький, Наносист. наноматер. нанотехнол. **8**, 339 (2010).
 - [8] Y. Namba, Jap. J. Appl. Phys. **9**, 1326 (1970); <https://doi.org/10.1143/JJAP.9.1326>.
 - [9] J. Yu, Y. Namba, Appl. Phys. Lett. **73**, 3607 (1998); <https://doi.org/10.1063/1.122839>.
 - [10] Y. Namba, J. Yu, J.M. Bennett, K. Yamashita, Appl. Opt. **39**, 2705 (2000); <https://doi.org/10.1364/AO.39.002705>.

THE SIZE OSCILLATIONS OF FERMI ENERGY OF METAL NANOFILMS WITH A PERIODICALLY MODULATED SURFACE

A. V. Korotun, I. M. Titov

Zaporizhia National Technical University, 64, Zhukovsky St., Zaporizhia, UA-69063, Ukraine

Quantum-dimensional effects, due to the quantization of the finite movements of conduction electrons across the film, play a significant role in nanometer metal films. In particular, there dimensional oscillations of the Fermi energy, which, in turn, contribute to the oscillation of the optical and electrophysical characteristics of metal 2D systems. In real conditions, the production of nanofilms with perfectly smooth surfaces is virtually impossible. STM Surface Surveys indicate the existence of a two-dimensional periodic relief.

The effect of the heterogeneities of a two-dimensional periodic surface on the dimensional energy oscillations of the Fermi energy of metal nanofilms for a small modulation amplitude has been investigated. Therefore, the calculation of the electron spectrum was carried out within the framework of the quantum-mechanical perturbation theory, and the operator of perturbation in the Hamiltonian is a consequence of the transition to a coordinate system associated with a perfectly smooth surface of the nanofilament. The dependence of the Fermi energy has been found on condition that the number of filled states and the number of conduction electrons in a bulk metal are equal. The calculations were performed for different values of the amplitude of modulation.

The features of dimensional dependence of the Fermi energy of the films of different metals were analyzed. It has been established that in the case of nanofilms with the periodic heterogeneity of the surface, the Fermi energy values are larger than for films with perfectly smooth surfaces, and with an increase in the thickness of the film, the amplitude of the oscillations of the Fermi energy goes to zero, while their period increases to infinity.