

## Оптична провідність металевого нанодруту з еліптичним перерізом

А.В. Коротун\*, А.О. Коваль

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

(Одержано 19.08.2015; опубліковано online 24.12.2015)

У роботі в рамках моделі вільних електронів з використанням методу збурення форми межі розраховано діагональні компоненти тензора провідності еліптичного нанодруту з урахуванням розмірної залежності енергії Фермі. Досліджено вплив геометрії поперечного перерізу та матеріалу дроту на частотні залежності дійсної та уявної частин оптичної провідності.

**Ключові слова:** Оптична провідність, Нанодріт, Осциляції, Тензор, Ексцентриситет.

PACS numbers: 73.21.Hb, 79.67.Lt

### 1. ВСТУП

Вивчення властивостей одномірних металевих систем представляє значний інтерес з точки зору їх практичного використання. Так, в [1] вперше розглянуто вплив геометрії на оптичну провідність систем зниженої розмірності, а в роботі [2] теоретично досліджено вплив квантування енергетичного спектра кругового металевого нанодруту на оптичне поглинання. Авторами [3] в рамках методу функціоналу густини досліджено оптичні властивості ультратонких дротів благородних металів.

Одним із основних методів експериментального дослідження таких систем є оптичні вимірювання [4,5]. Сучасні технології дозволяють вирощувати нанодрути з різною формою поперечного перерізу [6]. Теоретичні дослідження, в основному, проводять для циліндричних квантових дротів, для яких відомі точні розв'язки рівняння Шредингера. При цьому випадок дротів із більш складною формою поперечного перерізу, що отримуються внаслідок дії поперечних деформацій або одновісного тиску, залишається недостатньо дослідженим.

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

Тут  $i$  – уявна одиниця ( $i = \sqrt{-1}$ );  $m_e$  – маса вільного електрона;  $\Omega$  – об'єм дроту;

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

– коефіцієнт заповнення станів з енергією  $\varepsilon_i$ ,  $|i\rangle \equiv |p, m, n\rangle$ ,  $\langle j| \equiv \langle p', m', n'|$  – вектори початкового і кінцевого стану;  $\varepsilon_{ij} \equiv \varepsilon_i - \varepsilon_j$ ,  $T$  – температура. Надалі вважатимемо  $T = 0$ .

У випадку, коли електромагнітна хвиля падає перпендикулярно до осі симетрії дроту в нульовому наближенні розкладання  $\sigma_{\alpha\beta}$  за малим параметром  $\rho_0 / \lambda \ll 1$  ( $\lambda$  – довжина хвилі) компоненти тензора

в роботі [7] в рамках методу збурення форми межі отримано рівняння для визначення енергетичного спектра і розраховано розмірні осциляції енергії Фермі еліптичного нанодруту.

Метою даної роботи є дослідження впливу „еліптичності“ поперечного перерізу нанодруту на компоненти тензора оптичної провідності.

### 2. ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

В наближенні діагонального відгуку струм, індукований електромагнітною хвилею з частотою  $\omega$  і хвильовим вектором  $\mathbf{q}$  в тонкому металевому дроті з еліптичним перерізом, ефективний радіус якого  $\rho_0$  ( $\rho_0 = (a+b)/2$ ,  $a$  і  $b$  – велика та мала напівосі еліпсу), можна записати у вигляді

$$j_{\text{ind}\alpha} = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) \mathcal{E}_\beta, \quad (1)$$

де  $\{\alpha, \beta\} = x, y, z$ ,  $\mathcal{E}_\beta$  – компоненти електричного поля;  $\sigma_{\alpha\beta}$  – тензор оптичної провідності

провідності матимуть вигляд [8]:

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0; \quad \sigma_{zz} = \sigma_{dc}, \quad (3)$$

де

$$\sigma_{dc} = \sigma(0) \frac{1 + i\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2};$$

- провідність Друде;

$$\sigma(0) \equiv \frac{e^2 \bar{n} \tau}{m_e}$$

- статична провідність;  $\bar{n}$  – концентрація 3D-електронного газу;  $m_e$  – маса електрона.

Дві інші діагональні компоненти визначаються виразом

\* andko@zntu.edu.ua

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{i e^2 \bar{n}}{m_e \omega} + \frac{i e^2}{m_e^2 \omega \Omega} \sum_{i,j} \frac{f_i \varepsilon_{ij}}{\varepsilon_{ij}^2 - \hbar^2 \omega^2} \left| \langle j | \hat{p}_\alpha | i \rangle \right|^2, \quad (4)$$

де індекс  $\alpha = x, y$ , а проєкції оператора імпульсу дорівнюють (див. додаток А)

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} = -i \hbar \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\sin \varphi}{\rho} \left( 1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sin^2 \varphi \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{p}_y &= -i \hbar \frac{\partial}{\partial y} = -i \hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\cos \varphi}{\rho} \left( 1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sin^2 \varphi \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Тут  $\varepsilon = \sqrt{1 - b^2 / a^2} \ll 1$  – ексцентриситет дроту.

Оскільки доданки у формулах (5), зумовлені еліптичністю поперечного перерізу дроту, пропорційні квадрату ексцентриситету, то ними можна знехтувати і скористатися виразами для матричних елементів проєкцій імпульсу для випадку кругового дроту [8]. При цьому діагональні компоненти тензора провідності можуть бути записані у вигляді

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{dc} \{ 1 + S(\omega, \rho_0) \}, \quad (6)$$

де

$$S(\omega, \rho_0) \equiv \frac{2}{N m_e} \sum_{i,j} f_{mnp} k_{mn}^2 C_{mn}^2 \{ \Phi_{(-)} + \Phi_{(+)} \}; \quad (7)$$

$f_{mnp}$  – східчаста функція

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

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

$I_m(\xi)$  – функції Бесселя  $m$ -го порядку,  $n = 1, 2, \dots$ ; штрих означає похідну за  $\xi$ ;

$$\Phi_{(\mp)} = \frac{(k_{mn}^2 - k_{m\mp 1, n'}^2) \left( (k_{mn}^2 - k_{m\mp 1, n'}^2)^2 - k_\omega^4 + \gamma^4 + 2i k_\omega^2 \gamma^2 \right)}{\left[ (k_{mn}^2 - k_{m\mp 1, n'}^2)^2 - k_\omega^4 + \gamma^4 \right]^2 + 4k_\omega^4 \gamma^4} \mathcal{F}_{(\mp)}^2, \quad (8)$$

де  $k_\omega^2 \equiv 2m_e \omega / \hbar$ ;  $\gamma^2 \equiv 2m_e / \hbar \tau$ ;

$$\mathcal{F}_{(\mp)} \equiv C_{m\mp 1, n} \int_0^{\rho_0} I_{m\mp 1}(k_{m\mp 1, n'} \rho) I_{m\mp 1}(k_{mn} \rho) \rho d\rho; \quad (9)$$

числа  $k_{mn}$  – корені рівняння [7]:

$$(1 + \varepsilon m) I_m(k_{mn} \rho_0) - \varepsilon k_{mn} \rho_0 I_{m+1}(k_{mn} \rho_0) = 0, \quad (10)$$

Для проведення чисельних розрахунків за формулами (6)-(10) до них потрібно додати співвідношення, яке визначає рівень Фермі металевого нанодроту [8]:

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 \rho_0^2} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2}. \quad (8)$$

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки було проведено для значень електронних концентрацій  $\bar{n} = (4\pi r_s^3 / 3)^{-1}$ ,  $r_s = 3,01a_0$ ,  $2,11a_0$  та  $2,07a_0$  для Au, Cu та Al відповідно ( $a_0$  – борівський радіус;  $r_s$  – середня відстань між електронами).

На рис. 1 наведені частотні залежності  $\text{Re} \sigma_{xx}$  та  $\text{Im} \sigma_{xx}$  для нанодроту Au радіусом 1 нм з різними значеннями ексцентриситету. Як видно з рисунку, зі збільшенням величини  $\varepsilon$  піки зсуваються ліворуч, а амплітуда осциляцій збільшується. Це пояснюється

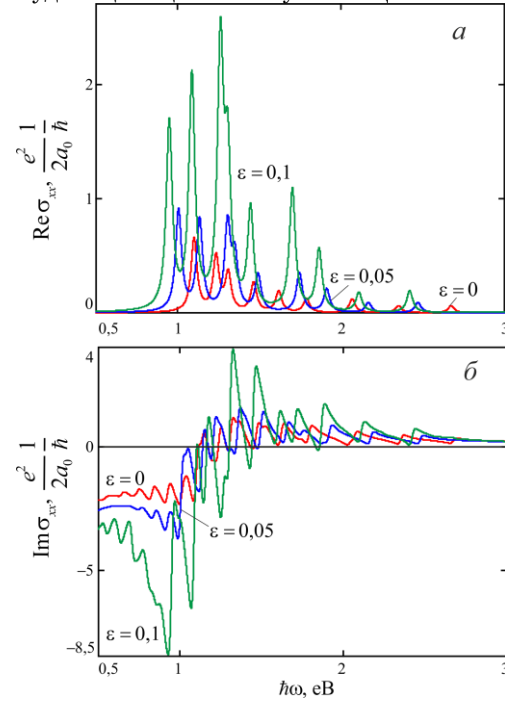


Рис. 1 – Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин компоненти  $\sigma_{xx}$  для нанодроту Au радіусом  $\rho_0 = 1$  нм за різних значень ексцентриситету

тим, що при деформації поперечного перерізу дроту енергетичні рівні знижуються [7], відстань між ними зменшується, а отже, й оптичні переходи починаються за менших частот.

Результати розрахунків частотних залежностей дійсної та уявної частин оптичної провідності дротів Au з різними ефективними радіусами при фіксованому значенні ексцентриситету наведено на рис. 2. Зі зростанням  $\rho_0$  піки, як і у випадку збільшення ексцентриситету також зміщуються ліворуч, причому більш віддалені піки зміщуються сильніше за ближні, відстань між ними зменшується й при її наблизненні до  $\hbar / \tau$  піки накладаються один на одний. Разом з тим в усьому інтервалі частот з'являються нові піки, що зумовлене збільшенням числа рівнів розмірного квантування, а отже, і числа переходів між ними.

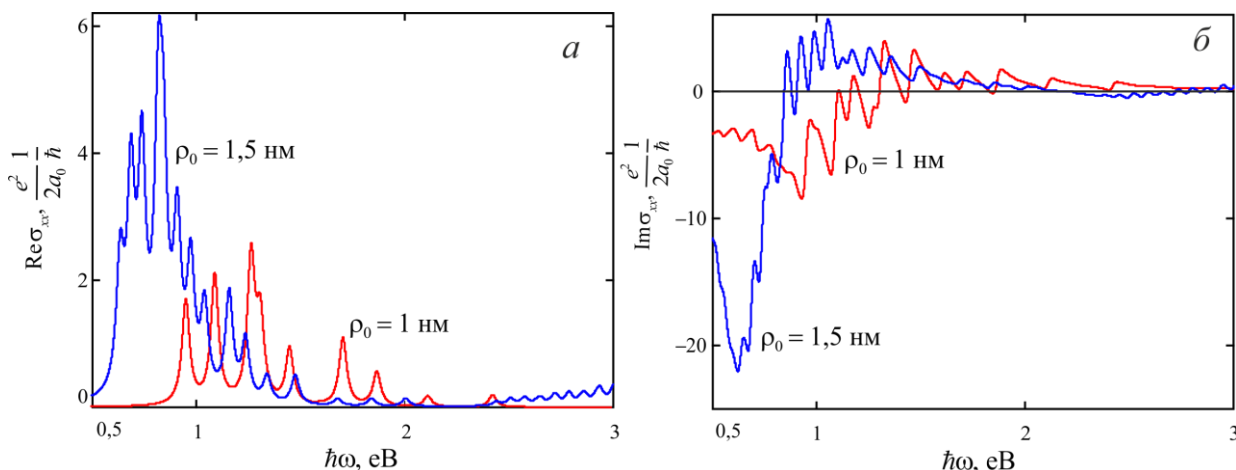


Рис. 2 – Розрахункові частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин компоненти  $\sigma_{xx}$  для нанодроту Au з ексцентриситетом  $\varepsilon = 0,1$  за різних значень ефективного радіусу

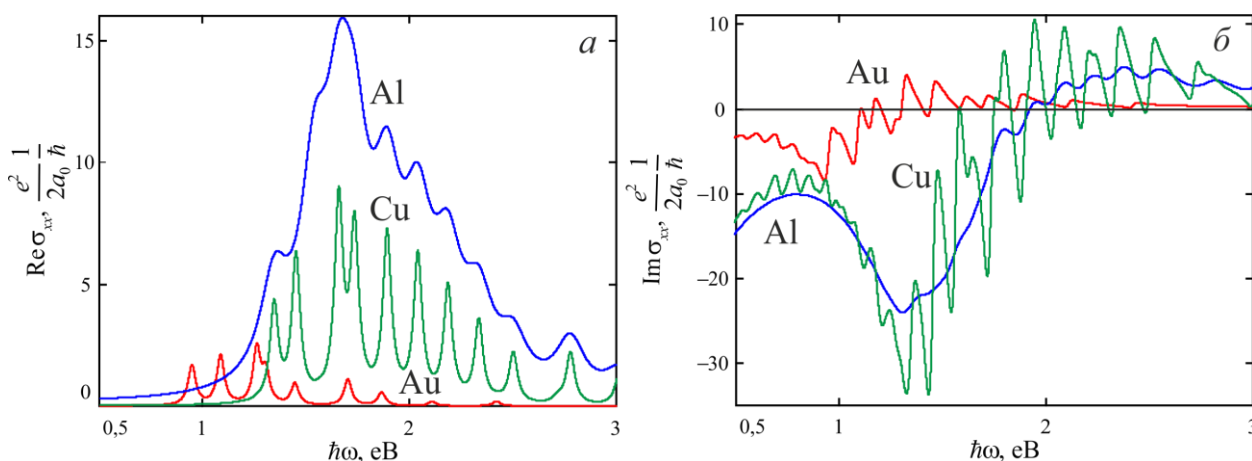


Рис. 3 – Розрахункові частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин компоненти  $\sigma_{xx}$  для дротів різних металів із ексцентриситетом  $\varepsilon = 0,1$  та ефективним радіусом  $\rho_0 = 1$  нм

Частотні залежності оптичної провідності для різних металів за фіксованих значень ефективного радіусу та ексцентриситету наведено на рис. 3. Отримані результати вказують на якісно різний характер частотних залежностей дійсної та уявної частин провідності для Au, Cu та Al.

Так, для Au осциляції  $\text{Re}\sigma_{xx}$  є дрібномасштабними, для Cu максимальна амплітуда осциляцій на порядок більша, ніж для Au. У випадку Al частотна залежність має один виражений максимум, а на всій кривій проявляються малоамплітудні осциляції.

На залежностях  $\text{Im}\sigma_{xx}(\hbar\omega)$  для золота також спостерігаються осциляції малої амплітуди, для міді розмах осциляцій найбільший, а для алюмінію крива практично гладка й осциляції з'являються лише при  $\hbar\omega \approx 2$  еВ.

Такий характер частотних залежностей пояснюється відмінностями в часі релаксації електронів різних металів. Для Al час релаксації найменший (табл. 1), так що ширина піків – найбільша. Для розрахунків нами використовувалися значення  $\tau$  для 3D-металів [9].

Таблиця 1 – Час релаксації, уширення рівнів та значення електронної концентрації деяких 3D-металів

Метал	$\tau, 10^{-14}$ с	$\hbar/\tau, \text{eV}$
Au	3,0	0,022
Cu	2,7	0,024
Al	0,8	0,082

Зауважимо, що, як і у випадку кругового дроту,  $\text{Re}\sigma_{xx}$  залишається додатною величиною в усьому діапазоні частот, в той час як  $\text{Im}\sigma_{xx}$  є знакозмінною функцією частоти.

#### 4. ВИСНОВКИ

Встановлено, що зміну форми поперечного перерізу дроту в першому порядку теорії збурень можна врахувати шляхом модифікації граничної умови для радіальної хвильової функції електронів у круговому дроті, оскільки поправки до оператора імпульсу, як і до гамільтоніану (див. [12]), пропорційні квадрату ексцентриситету, і тому їх можна не враховувати.

Розраховано частотні залежності діагональних компонентів тензора оптичної провідності для еліп-

тичних дротів різних металів із різним діаметром. Залежності мають осциляційний характер.

Проведено порівняння результатів розрахунків оптичної провідності з випадком кругового дроту. Відмінності в цих залежностях пов'язані зі зниженням енергетичних рівнів, а отже, і зменшенням енергії Фермі у випадку еліптичного нанодроту.

Показано, що збільшення величини ефективного радіуса при фіксованому ексцентриситеті призводить до зсуву піків на частотних залежностях провідності в бік менших частот внаслідок збільшення числа переходів між рівнями розмірного квантування.

Досліджено вплив матеріалу на частотні залежності компонент тензора провідності на прикладі дротів Au, Cu та Al. Малоамплітудні осциляції для Al пояснюються малим значенням його часу релаксації порівняно з іншими металами, що зумовлює більшу величину уширення.

### ДОДАТОК А

#### ОБЧИСЛЕННЯ ПОПРАВОК ДО ОПЕРАТОРА ІМПУЛЬСУ ДЛЯ ЕЛІПТИЧНОГО НАНОДРОТУ З МАЛИМ ЕКСЦЕНТРИСИТЕТОМ

Для знаходження проєкцій оператора імпульсу  $\hat{p}_x$  і  $\hat{p}_y$  потрібно, за аналогією з роботою [12], похідні  $\partial/\partial x$  і  $\partial/\partial y$ , записані в еліптичній циліндричній системі координат  $(\xi, \eta, z)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta}; \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta}, \end{aligned} \quad (A1)$$

виразити через змінні циліндричної системи координат  $(\rho, \varphi, z)$ , використовуючи зв'язки між ними

$$\begin{aligned} \rho^2 &= f^2 (\text{ch}^2 \xi \cos^2 \eta + \text{sh}^2 \xi \sin^2 \eta); \\ \text{tg } \varphi &= \text{tg } \eta \text{ th } \xi, \end{aligned} \quad (A2)$$

Виражаючи похідні за координатами еліптичної циліндричної системи координат через похідні за координатами циліндричної системи координат

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} &= \frac{\partial \rho}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \\ \frac{\partial}{\partial \eta} &= \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \end{aligned} \quad (A3)$$

після обчислення відповідних похідних:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \xi} &= \frac{f \text{sh } \xi \text{ch } \xi}{\sqrt{\text{ch}^2 \xi \cos^2 \eta + \text{sh}^2 \xi \sin^2 \eta}}; \\ \frac{\partial \rho}{\partial \eta} &= -\frac{f \sin \eta \cos \eta}{\sqrt{\text{ch}^2 \xi \cos^2 \eta + \text{sh}^2 \xi \sin^2 \eta}}; \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} &= \frac{\sin \eta \cos \eta}{\text{ch}^2 \xi \cos^2 \eta + \text{sh}^2 \xi \sin^2 \eta}; \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} &= \frac{\text{sh } \xi \text{ch } \xi}{\text{ch}^2 \xi \cos^2 \eta + \text{sh}^2 \xi \sin^2 \eta}, \end{aligned} \quad (A4)$$

з використанням співвідношень

$$\begin{aligned} \text{ch } \xi &= \frac{1}{\varepsilon}; \quad \text{sh } \xi = \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon} \cong \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2\right); \\ \sin^2 \eta &\cong \sin^2 \varphi; \quad \cos^2 \eta \cong \cos^2 \varphi; \\ f &= \frac{\varepsilon \rho}{\sqrt{1-\varepsilon^2 \sin^2 \varphi}} \cong \varepsilon \rho \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \sin^2 \varphi\right), \end{aligned} \quad (A5)$$

після деяких математичних перетворень отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\sin \varphi}{\rho} \left(1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sin^2 \varphi\right) \frac{\partial}{\partial \varphi}; \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\cos \varphi}{\rho} \left(1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sin^2 \varphi\right) \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (A6)$$

Отже, з урахуванням еліптичності поперечного перерізу дроту, проєкції оператора імпульсу  $\hat{p}_x$  і  $\hat{p}_y$  матимуть вигляд (5).

## Оптическая проводимость металлической нанопроволоки с эллиптическим сечением

А.В. Коротун, А.А. Коваль

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

В работе в рамках модели свободных электронов с использованием метода возмущения формы границы рассчитаны диагональные компоненты тензора проводимости эллиптической проволоки с учетом размерной зависимости энергии Ферми. Исследовано влияние геометрии поперечного сечения и материала проволоки на частотные зависимости действительной и мнимой частей оптической проводимости.

**Ключевые слова:** Оптическая проводимость, Нанопроволока, Осцилляции, Тензор, Эксцентриситет.

**Optical Conductivity of Metal Nanowires with Elliptical Cross Section**

A.V. Korotun, A.O. Koval'

*Zaporizhzhya National Technical University, 64, Gogol Str, 69063 Zaporizhia, Ukraine*

In this paper, the conductivity tensor diagonal components of elliptical wire have been calculated in the model of free-electron with the use the boundary shape perturbation method with due regard for the size dependence of the Fermi energy. The effect of the cross-sectional geometry and matter of the wires on the frequency dependence of the real and imaginary parts of the optical conductivity has been investigated.

**Keywords:** Optical conductivity, Nanowire, Oscillations, Tensor, Eccentricity.

**СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ**

1. R. Ruppin, H. Yatom, *phys. status solidi b* **74**, 647 (1976).
2. П.М. Томчук, *УФЖ* **47** № 9, 833 (2002) (P.M. Tomchuk, *Ukr. J. Phys.* **47** No 9, 833 (2002)).
3. A. Kumar, As. Kumar, P.K. Ahluwalia, *Physica E* **46**, 259 (2012).
4. F. Neubrech, T. Kolb, R. Lovrincic, G. Fahsold, A. Pucci, J. Aizpurua, T. W. Cornelius, M. E. Toimil-Molares, R. Neumann, S. Karim, *Appl. Phys. Lett.* **89** No 25, 253104 (2006).
5. 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**, 195427 (2008).
6. P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 133105 (2006).
7. А.В. Коротун, *ФТТ* **56**, 1197 (2014) (A.V. Korotun, *Phys. Solid State* **56** No 6, 1245 (2014)).
8. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, А.В. Бабич, В.В. Погосов, *ФТТ* **51**, 2371 (2009) (V.P. Kurbatsky, A.V. Korotun, A.V. Babich, V.V. Pohosov, *Phys. Solid State* **51** No 12, 2520 (2009)).
9. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, Т. 1 (Москва: Мир: 1979) (N. Ashcroft, N. Mermin, *Fizika tverdogo tela*, V. 1 (Moskva: Mir: 1979)).