

Розмірна залежність енергії Фермі сферичного металевго нанокластера

А.В. Коротун*

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

(Одержано 04.04.2015; опубліковано online 20.10.2015)

У роботі в моделі вільних електронів та сферичної потенціальної ями нескінченної глибини отримано вираз для визначення розмірно-залежної енергії Фермі металевго нанокластера. Розрахунки проведено для кластерів Al та Au. Досліджено вплив зміни розмірності системи на еволюцію розмірних залежностей.

Ключові слова: Металевий кластер, Енергія Фермі, Осциляції, Розмірна залежність.

PACS numbers: 73.22. – f, 61.46.Bc

1. ВСТУП

При створенні композитних матеріалів використовується несуче нейтральне (непоглинаюче) середовище і вкраплені в нього металеві частинки [1]. Оптичні властивості таких систем, перш за все, визначаються фізичними властивостями їх компонентів [2, 3]. При цьому ефективні характеристики композиту можуть істотно відрізнятися як від властивостей металевих включень, так і діелектричної матриці [4-6]. Проте, практичному застосуванню нанокompозитних матеріалів заважає сильне поглинання світла металевими включеннями, якого неможливо позбавитися без використання лазерного середовища [7].

Отже, дослідження оптичних властивостей окремої наночастинки є актуальним питанням. В роботах

[8-10] показано, що основний внесок у оптичну провідність металевих наносистем визначається енергією Фермі, яка для даних систем має осцилюючий характер.

Метою даної роботи є вивчення розмірної залежності енергії Фермі сферичного металевго нанокластера.

2. ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Задачу про знаходження хвильових функцій та енергетичного спектру електронів у сферичній металевій наночастинці доцільно розв'язувати у сферичній системі координат. У цьому випадку рівняння Шредінгера з гамільтоніаном:

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

де m_e – маса вільного електрона; $U(r)$ – потенціальна енергія, яка для випадку сферичної ями (об'ємом Ω і радіусом r_0) нескінченної глибини має вигляд:

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r > r_0; \\ 0, & r < r_0. \end{cases}$$

допускає розділення змінних, і хвильова функція може бути записана як

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2)$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – кутова частина хвильової функції, а радіальна залежність хвильової функції описується функціями Бесселя напівцілого порядку

$$R_{nl}(r) = C_{nl} \frac{j_l(k_{nl}r)}{r}. \quad (3)$$

Тут

$$C_{nl} = \left\{ \int_0^{r_0} j_l^2(k_{nl}r) dr \right\}^{-\frac{1}{2}};$$

$k_{nl} = \alpha_{nl} / r_0$, α_{nl} – позитивні нулі сферичної функції Бесселя $j_l(\xi)$, $n = 1, 2, \dots$

Рівні енергії визначаються формулою

$$\varepsilon_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_{nl}^2. \quad (4)$$

Розглянемо тепер питання про знаходження розмірної залежності енергії Фермі металевих 0D-систем. Вважатимемо, що, як і у випадку 2D-систем [9] та 1D-систем [10], число заповнених станів у сферичній металевій наночастинці дорівнює числу електронів провідності:

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = 2 \int_0^{\varepsilon_F} \sum_{n,l} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{nl}) d\varepsilon = \bar{n} \Omega, \quad (5)$$

де $g(\varepsilon) = 2 \sum_{n,l} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{nl})$ – енергетична густина станів 0D-системи; \bar{n} – концентрація електронів провідно-

* andko@zntu.edu.ua

сті в 3D-металі; $\Omega = 4\pi r_0^3 / 3$ – об’єм сфери.

Для розрахунку інтеграла в (5) скористаємось розкладанням δ -функції в ряд Фур’є за синусами на скінченному інтервалі $\varepsilon \in (0, \varepsilon_F)$ [11]:

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_{nl}) = \frac{2}{\varepsilon_F} \sum_{m=1}^{\infty} \sin \frac{\pi m \varepsilon}{\varepsilon_F} \sin \frac{\pi m \varepsilon_{nl}}{\varepsilon_F}. \quad (6)$$

Підставляючи (6) в (5) та розраховуючи отримані інтеграли, матимемо:

$$\bar{n}\Omega = \begin{cases} \frac{8}{\pi} \sum_{\kappa=1}^{\infty} \frac{1}{2\kappa-1} \sum_{n,l} \sin \frac{\pi(2\kappa-1)\varepsilon_{nl}}{\varepsilon_F}, & m = 2\kappa-1; \\ 0, & m = 2\kappa. \end{cases} \quad (7)$$

Співвідношення (7) представляє собою трансцендентне рівняння для визначення розмірно-залежної енергії Фермі.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

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

Результати розрахунків, наведені на рис. 1, демонструють суттєву роль ефектів розмірного квантування в залежності енергії Фермі від діаметра кластера. При значеннях $d \approx 1,4 \div 1,6$ нм та 2,4 нм (для кластерів Au) осциляції мають найбільший розмах. Це пояснюється тим, що за таких значень діаметру сферичний нанокластер містить магічне число атомів. За значень $d > 2,4$ нм амплітуда осциляцій зменшується і прагне до нуля.

Як і у випадку нанодротів (рис. 2), розмірна залежність ε_F має видимість хаотичності. Проте, «хаотичні» осциляції енергії Фермі нанодротів є дрібномасштабними, в той час як для кластерів Al та Au розмах осциляцій досягає значень від 0,4 до $0,45\varepsilon_F / \varepsilon_F^0$.

На розмірній залежності енергії Фермі кластера, як і для дроту, максимум з’являється всякий раз, коли радіус r_0 , що збільшується, досягає такого значення, при якому умова $a_{nl} < k_F r_0$ починає виконуватися ще для однієї пари чисел (n', l') . Відстань між сусідніми максимумами

$$\Delta d_{cl} \approx 2(a_{n'l'} - a_{nl}) / k_F^0$$

отримується при накладанні коренів сферичних функцій Бесселя різних порядків.

Відмінності в розмірних залежностях енергії Фермі кластерів Al та Au зумовлені різними значеннями електронної густини \bar{n} цих металів. Для кластерів Al, також як і для дротів, масштаб осциляцій Δd_{cl} більш дрібний, оскільки більше густина розподілу коренів a_{nl} .

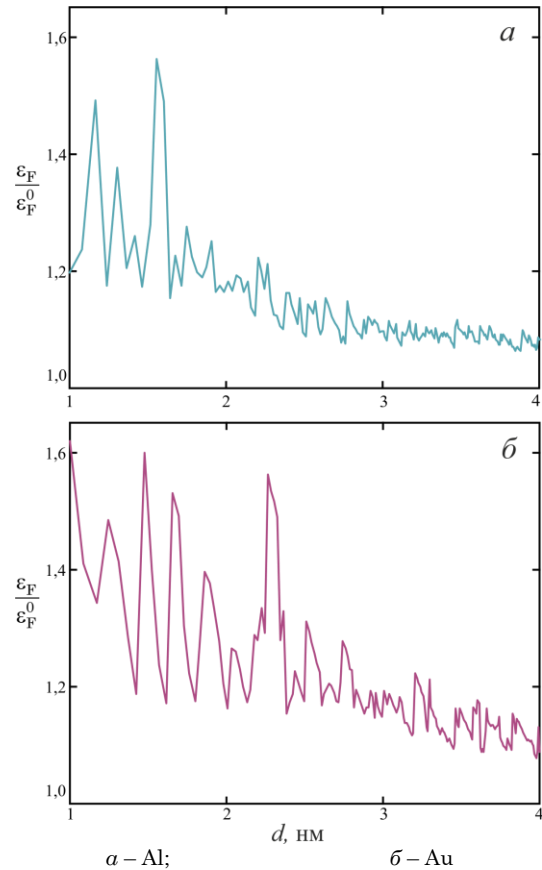


Рис. 1 – Розмірна залежність енергії Фермі нанокластерів різних металів

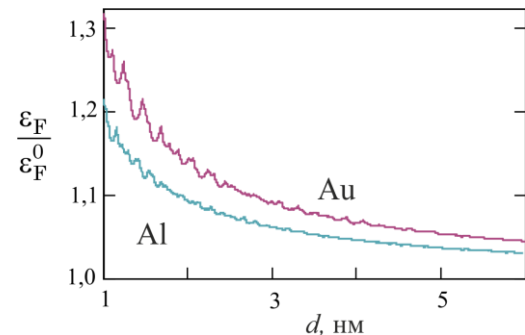


Рис. 2 – Розмірна залежність енергії Фермі нанодротів золота та алюмінію [10]

4. ВИСНОВКИ

Вперше запропоновано процедуру для визначення енергії Фермі металевих 0D-систем. Розрахована розмірна залежність для кластерів різних металів має „осциляційний“ вигляд. Зі збільшенням діаметра нанокластера, як і у випадку нанодроту, амплітуда осциляцій прагне до нуля, а їх період – до нескінченності.

Встановлено, що зміна розмірності металевих систем призводить до відмінностей у розмірних залежностях енергії Фермі. Так, в 1D-системах осциляції є дрібномасштабними, а при переході до 0D-систем – їх розмах істотно збільшується. Це пов’язане з додатковим обмеженням руху носіїв заряду в 0D-системах та суттєвою відмінністю в густині електронних станів у цих системах.

Размерная зависимость энергии Ферми сферического металлического нанокластера

А.В. Коротун

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

В работе в модели свободных электронов и сферической потенциальной ямы бесконечной глубины получено выражение для определения размерно-зависящей энергии Ферми металлического нанокластера. Расчеты проведены для кластеров Al и Au. Исследовано влияние изменения размерности системы на эволюцию размерных зависимостей.

Ключевые слова: Металлический кластер, Энергия Ферми, Осцилляции, Размерная зависимость.

Size Dependence of the Fermi Energy of Spherical Metal Nanocluster

A.V. Korotun

Zaporizhzhya National Technical University, 64, Zhukovskiy Str., 69063 Zaporizhia, Ukraine

In this paper, expression for the determination of the size-dependent Fermi energy of a metal nanocluster in the model of free electrons and spherical potential well of infinite depth is obtained. The calculations are performed for Al and Au clusters. The effect of the change of the system dimension on the evolution of size dependences is investigated.

Keywords: Metal cluster, Fermi energy, Oscillations, Size dependence.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. И.Д. Морохов, Л.И. Трусов, В.Н. Лаповок, *Физические явления в ультрадисперсных средах* (М.: Энергоиздат: 1984) (I.D. Morokhov, L.I. Trusov, V.N. Lapovok, *Fizicheskiye yavleniya v ul'tradispersnykh sredakh* (M.: Energoizdat: 1984)).
2. П.М. Томчук, *УФЖ* **57**, 552 (2012) (P.M. Tomchuk, *Ukr. J. Phys.* **57**, 552 (2012)).
3. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Погосов, *ЖТФ* **82**, 130 (2012) (V.P. Kurbatskiy, A.V. Korotun, V.V. Pogosov, *Techn. Phys.* **57** No 9, 1311 (2012)).
4. А. Ораевский, И. Проценко, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 641 (2000) (A. Orayevskiy, I. Protsenko, *JETP Lett.* **72**, 641 (2000)).
5. S.G. Moiseev, *Physica B: Phys. Condens. Matter.* **405**, 3042 (2010).
6. А.В. Кильдишев, В.М. Шалаев, *УФН* **181**, 59 (2011) (A.V. Kildishev, V.M. Shalaev, *Phys. Usp.* **54**, 53 (2011)).
7. С.Г. Моисеев, Е.А. Папанина, С.В. Сухов, *Квант. эл.* **37**, 446 (2007) (S.G. Moiseyev, Ye.A. Pashinina, S.V. Sukhov, *Kvant. el.* **37**, 446 (2007)).
8. П.М. Томчук, *УФЖ* **47**, 73 (2002) (P.M. Tomchuk, *Ukr. J. Phys.* **47**, 73 (2002)).
9. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Погосов, Е.В. Васютин, *ФТТ* **50**, 909 (2008) (V.P. Kurbatskiy, A.V. Korotun, V.V. Pogosov, Ye.V. Vasyutin, *Phys. Solid State* **50**, 949 (2008)).
10. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, А.В. Бабич, В.В. Погосов, *ФТТ* **51**, 2371 (2009) (V.P. Kurbatskiy, A.V. Korotun, A.V. Babich, V.V. Pogosov, *Phys. Solid State* **51**, 2520 (2009)).
11. Л.К. Мартисон, Ю.И. Малов, (Под ред. В.С. Зарубина, А.П. Крищенко) *Дифференциальные уравнения математической физики* (М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана: 2002) (L.K. Martison, Yu.I. Malov, (Pod red. V.S. Zarubina, A.P. Krishchenko) *Differentsial'nyye uravneniya matematicheskoy fiziki* (M.: MGTU im. N. E. Baumana: 2002)) [in Russian].