ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ, 2020, том 121, № 5, с. 451–453

ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

УДК 537.8

ЭЛЕКТРОННЫЕ КВАНТОВЫЕ ВОЛНЫ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОПРОВОЛОКАХ

© 2020 г. Е. А. Памятных*

Уральский федеральный университет, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия

**e-mail: epamyatn@mail.ru*

Поступила в редакцию 26.08.2019 г.
После доработки 17.12.2019 г.
Принята к публикации 23.12.2019 г.

Показано, что квантование поперечного движения электронов в металлических нанопроволоках приводит к возникновению окон прозрачности в области квазиклассического бесстолкновительного затухания волн и к возможности существования нового типа возбуждений в таких системах – квантовых волн.

Ключевые слова: электронные квантовые волны, металлические нанопроволоки

DOI: 10.31857/S0015323020050095

Перспективы использования металлических нанопроволок в качестве элементов различных наноустройств [1–5] требуют широких исследований, нацеленных на предсказание и обнаружение принципиально новых физических эффектов в таких системах. Ниже показано, что наряду с уже довольно хорошо изученными (и отраженными в обширной литературе) особенностями электромагнитных и других характеристик нанопроволок в квантовых металлических нанопроволоках возможен новый эффект – существование особого типа волн, называемых квантовыми волнами.

Отличительной особенностью металлических квантовых нанопроволок является размерное квантование поперечного движения электронов при сохранении квазиклассического движения вдоль проволоки. В этом случае для вырожденной фермиевской системы электронов продольная скорость на поверхности Ферми принимает дискретный ряд значений, что приводит к возникновению “окон прозрачности” в области квазиклассического бесстолкновительного поглощения волн и открывает возможность распространения новых волн – так называемых квантовых волн. Такого типа возбуждения рассматривались ранее для электронных систем металлов и полупроводников в сильном магнитном поле [6–9].

Для выяснения принципиальной возможности существования квантовых волн в металлических нанопроволоках и понимания основных особенностей их распространения рассмотрим простую модельную систему – длинный металлический цилиндр круглого сечения длиной L и радиуса R ($R \ll L$).

В цилиндрических координатах (r, φ, z) с осью z, направленной вдоль оси цилиндра, волновые функции $\psi_\nu(\mathbf{r})$ (при условии обращения в нуль на боковой поверхности цилиндра) и спектр энергий ε_ν электронов описываются выражениями:

$$\psi_\nu(\mathbf{r}) = \psi_{l,n,p}(r,\varphi,z) = \\ = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{p}{\hbar}z} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} \frac{\sqrt{2}}{R\left|I_l'(\alpha_{l,n})\right|} I_l(\alpha_{l,n} r/R), \qquad (1)$$

$$\varepsilon_\nu = \varepsilon_{l,n,p} = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\alpha_{l,n}^2 + \frac{p^2}{2m} = \varepsilon_{l,n} + \frac{p^2}{2m}.$$

Здесь $I_l(\xi)$ – модифицированная функция Бесселя, $I_l'(\xi) = dI_l(\xi)/d\xi$, $\alpha_{l,n}$ – положительные нули функции $I_l(\xi)$, p – компонента импульса электронов вдоль оси цилиндра.

Благодаря квантовым эффектам электроны оказываются фактически разбиты на группы, относящиеся к различным энергиям поперечного движения $\varepsilon_{l,n}$. При этом продольные скорости электронов ($v \equiv v_z$) каждой группы оказываются заключенными (при $T = 0$) в конечном интервале $-v_{l,n} < v < v_{l,n}$, где $v_{l,n} = = \sqrt{2(\varepsilon_F - \varepsilon_{l,n})/m}$, ε_F – энергия Ферми электронов. Связанные с ними области бесстолкновительного затухания для волн, распространяющихся вдоль проволоки, суммируются так, что возникают “окна прозрачности” – области, где бесстолкновительное затухание отсутствует, что и открывает возможность распространения волн.

В квантовом случае возбужденное неравновесное состояние электронной системы с собственными волнами частоты ω описывается уравнением для неравновесной части матрицы плотности $\delta\rho_{\nu\nu'}$:

$$-i\omega\delta\rho_{\nu\nu'} + \frac{1}{i\hbar}(\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_{\nu})\delta\rho_{\nu\nu'} + \\ + \frac{1}{i\hbar}(f_{\nu'} - f_{\nu})W_{\nu\nu'} = J_{\nu\nu'}[\delta\rho]. \quad (2)$$

Здесь $f_{\nu} = f(\varepsilon_{\nu})$ – равновесная фермиевская функция распределения, $W_{\nu\nu'}$ – матричный элемент энергии возмущения. Величина $J_{\nu\nu'}[\delta\rho]$, стоящая в правой части уравнения ("интеграл столкновений"), связана с рассеянием электронов. Ее роль при распространении волн приводит к их столкновительному затуханию. Для изучения собственных волн рассмотрим решения, в которых роль затухания минимальна, заменив это слагаемое на релаксационный член – $\delta\rho_{\nu\nu'}/\tau$, где τ – время релаксации, и будем рассматривать решения в пределе $(1/\tau) \to 0$.

В случае продольных электромагнитных волн с $l = 0$ и длиной волны $2\pi/k$ величина $W_{\nu\nu'}$ отвечает взаимодействию электронов с потенциалом поля волны $\varphi_{k\omega}$:

$$W_{\nu\nu'}(k) = e\varphi_{k\omega}n_{\nu\nu'}(-k) = e\varphi_{k\omega}\delta_{nn'}\delta_{p,p-\hbar k}, \\ n_{\nu\nu'}(-k) = \langle\nu|\exp(ikz)|\nu'\rangle. \quad (3)$$

Находя с помощью (2) и (3) связанную с распространяющимся возмущением неравновесную плотность электронов $n_{k\omega}$:

$$n_{k\omega} = \frac{1}{V}\sum_{\nu\nu'} n_{\nu'\nu}(k)\delta\rho_{\nu\nu'}, \quad (4)$$

и подставляя ее в уравнение для скалярного потенциала

$$-k^2\varphi_{k\omega} = -4\pi e n_{k\omega}, \quad (5)$$

нетрудно получить уравнение для потенциала поля волны $\varphi_{k\omega}$ или плотности заряда $en_{k\omega}$.

Дисперсионное уравнение для таких волн, как условие существования нетривиального решения этого уравнения, запишется тогда в виде

$$1 + \frac{4\pi e^2}{k^2}\frac{1}{V}\sum_{\nu\nu'}\frac{f_{\nu} - f_{\nu'}}{\hbar\omega - \varepsilon_{\nu} + \varepsilon_{\nu'} + i\hbar/\tau}\times \\ \times n_{\nu'\nu}(k)n_{\nu\nu'}(-k) = 0. \quad (6)$$

В рассматриваемом нами случае распространения волн вдоль проволоки имеем $n_{\nu\nu'}(-k) = \delta_{nn'}\delta_{p,p-\hbar k}$ и из (6) получаем:

$$1 - \frac{4\pi e^2}{k^2}\frac{m}{\pi\hbar^2 k}\frac{L}{V}\sum_{l,n}\left\{\ln\frac{\omega^2 - k^2\left(v_{l,n} - \frac{\hbar k}{2m}\right)^2}{\omega^2 - k^2\left(v_{l,n} + \frac{\hbar k}{2m}\right)^2} + \right. \\ \left. + i\pi\int_{-\infty}^{\infty} dp\left(f_{n,p} - f_{n,p-\hbar k}\right)\delta\left(\frac{\omega m}{k} + \frac{\hbar k}{2} - p\right)\right\} = 0. \quad (7)$$

Второе слагаемое в фигурной скобке в этом выражении связано с бесстолкновительным затуханием волн. Оно показывает, что на плоскости (ω, k) в области квазиклассического бесстолкновительного поглощения волн

$$-k\left(v_{\mathrm{F}} - \frac{\hbar k}{2m}\right) < \omega < k\left(v_{\mathrm{F}} + \frac{\hbar k}{2m}\right) \quad (8)$$

возникают "окна прозрачности", определяемые условиями одновременного выполнения неравенств:

$$k\left(-v_{\mathrm{n}} - \frac{\hbar k}{2m}\right) < \omega < k\left(v_{\mathrm{n}} - \frac{\hbar k}{2m}\right), \\ k\left(-v_{\mathrm{n}} + \frac{\hbar k}{2m}\right) < \omega < k\left(v_{\mathrm{n}} + \frac{\hbar k}{2m}\right), \quad (9)$$

в которых бесстолкновительное затухание отсутствует.

Пронумеруем для удобства изложения граничные скорости электронов, отвечающие различным уровням поперечного движения, в порядке их убывания одним числом $s = 1, 2, 3, \ldots, s_{\min}$, где $s_{\min}$ – номер граничной скорости, отвечающей электронам с наибольшей поперечной энергией, которая еще может быть меньше энергии Ферми.

Окна прозрачности разбиваются на три типа. Первые из них (области $\langle 1\rangle$ на рис. 1) существуют при относительно малых k и на плоскости (k, ω) имеют "лепестковую" форму, ограниченную параболами $\omega_s^-(k) = k(v_s - \hbar k/2m)$ и $\omega_{s+1}^+(k) = k(v_{s+1} + \hbar k/2m)$. Второй тип окон (области $\langle 2\rangle$ на рис. 1) лежит в области достаточно больших k и на плоскости (k, ω) имеет треугольную форму, ограниченную отрезками парабол $\omega_s^-(k) = k(v_s - \hbar k/2m)$, $\omega_{s+1}^+(k) = k(-v_{s+1} + \hbar k/2m)$ и прямой $\omega = 0$. Между этими группами окон лежит параболическое окно прозрачности (область $\langle 3\rangle$ на рис. 1), ограниченное параболой $\omega_{s_{\min}}^-(k) = k(v_{s_{\min}} - \hbar k/2m)$ и прямой $\omega = 0$.

Вещественная часть уравнения (7) определяет законы дисперсии для волн. При этом дисперсионные кривые квантовых волн для рассматривае-

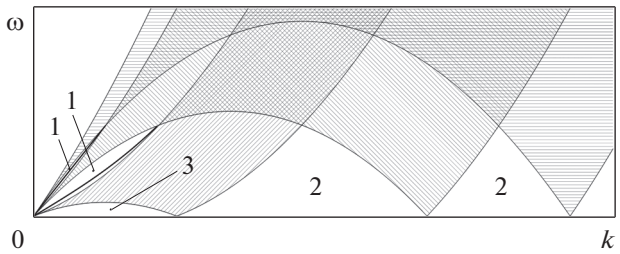

Рис. 1. Окна прозрачности и дисперсионные кривые квантовых волн для модельного случая трех заполненных уровней квантования поперечной энергии электронов. Области бесстолкновительного затухания, связанные с электронами, относящимися различным уровням поперечной энергии, заштрихованы линиями с разным наклоном.

мой нами модели лежат в лепестковых окнах прозрачности и в длинноволновом пределе отвечают акустическому закону дисперсии. Существование таких волн физически связано с наличием различных групп электронов на поверхности Ферми. Поэтому число различных ветвей квантовых волн оказывается на единицу меньше числа занятых электронных уровней поперечного движения (то есть уровней с $\varepsilon_{l,n} < \varepsilon_F$).

В частности, для модельного случая двух занятых уровней квантования с продольными скоростями электронов на поверхности Ферми v_1 и v_2 существует одна ветвь квантовых волн, для фазовой скорости которых $u = \omega/k$ в длинноволновом приближении получаем $u \approx \sqrt{v_1 v_2}$.

При большом числе занятых уровней квантования число квантовых волн с акустическим законом дисперсии в длинноволновом приближении велико, а их фазовые скорости лежат в интервале от скорости, близкой к фермиевской, до минимальной скорости порядка $\hbar/(mR)$. При этом дисперсионная кривая “медленной” волны лежит примерно посередине нижнего лепесткового окна прозрачности. Для волн со скоростями, близкими к фермиевской (“быстрые” волны), дисперсионные кривые близки к границам областей прозрачности.

Принципиальным для существования квантовых волн является квантованность поперечной энергии электронов. Поэтому квантовые волны будут существовать и в более реалистичных моделях, чем рассмотренная нами, отличаясь лишь в деталях. Конечные температуры и столкновения, приводящие к размытию границ окон прозрачности и ухудшающие собственно возможности появления решений дисперсионного уравнения, ограничивают условия наблюдения квантовых волн.

Существование квантовых волн должно проявляться, в частности, в эффектах поглощения и отражения волн системами, содержащими квантовые металлические проволоки.

Для иллюстрации описанной выше картины квантовых волн, на рис. 1 показаны области прозрачности и дисперсионные кривые квантовых волн для модельного случая трех заполненных уровней квантования.

Работа поддержана Минобрнауки РФ в рамках Госзадания, проект 5719.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Демиховский В.Я., Вугалтер Г.А.* Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.
2. *Kumar A., Kumar As., Ahluwalia P.K.* Ab initio study structural, electronic and dielectric properties of free standing ultrathin nanowires of noble metals // Phys. E. 2012. V. 46. P. 259–269.
3. *Pucci A., Neubrech F., Weber D., Hong S., Touru T., Lamy de la Capelle M.* Surface enhanced infrared spectroscopy using gold nanoantennas // Phys. St. Sol. B. 2010. V. 247. № 8. P. 2071–2074.
4. *Величко Е.А., Николаенко А.П.* Наноцилиндры из благородных металлов как рассеиватели плоской электромагнитной волны. // Радиофизика и электроника. 2015. Т. 6. С. 62–69.
5. *Коротун А.В.* Энергия Ферми металлической нанопроволоки эллиптического сечения // ФТТ. 2014. Т. 56. С. 1197–1200.
6. *McWhorter A.L., May W.G.* Acoustic plasma waves in semimetals // IBM – J. Res. Develop. 1964. V. 8. P. 285.
7. *Константинов О.В., Перель В.И.* Волны звукового типа в электронной плазме металлов в квантующем магнитном поле // ЖЭТФ. 1968. Т. 53. С. 2034–2040.
8. *Зырянов П.С., Окулов В.И., Силин В.П.* Квантовые спиновые волны // Письма в ЖЭТФ. 1968. Т. 8. С. 489–492.
9. *Окулов В.И., Памятных Е.А., Силин В.П.* Электронные квантовые волны в магнитном поле. М.: ЛЕННАРД, 2020. 224 с.