

УДК 535.016,537.9,538.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОСКОПИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ В ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВАХ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ 4D-ТОПОЛОГИЧЕСКИХ НАНОКЛАСТЕРОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ НА ТВЕРДОЙ ПОВЕРХНОСТИ

© 2020 г. С. М. Аракелян^{1, *}, А. О. Кучерик¹, Т. А. Худаберганов¹, Д. Н. Бухаров¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых”,
Владимир, Россия

*E-mail: arak@vlsu.ru

Поступила в редакцию 20.09.2019 г.

После доработки 15.11.2019 г.

Принята к публикации 27.11.2019 г.

Рассмотрены функциональные физические характеристики (электрофизические и оптические свойства) нанокластерной тонкопленочной системы при изменении топологии/морфологии поверхностных твердотельных структур. Полученные особенности проявления фундаментальных физических эффектов в таких системах позволяют говорить о формировании нового направления — топологической фотоники, имеющей несомненную прикладную перспективу, в частности, в области фемтосекундной наноэлектроники.

DOI: 10.31857/S0367676520030059

ВВЕДЕНИЕ

В рассматриваемых нами наноструктурах термодинамические, кинетические/транспортные и структурные свойства зависят от размеров наночастиц, их формы и пространственного распределения на поверхности твердотельной подложки, включая аддитивное влияние поверхности и стерических факторов. При этом в зависимости от химического состава нанокластеров, морфологии/топологии частиц, межфазной поверхности/границы и реализуемого взаимодействия возникают квантовые размерные эффекты — как это и должно быть в гетерогенных системах соответствующего масштаба [1]. В данном случае управляющими термодинамическими параметрами, которые определяют фазовые переходы в конденсированных средах, являются пространственные характеристики кластерных систем аналогично температуре (как при температурных фазовых переходах) [2], внешним полям (например, как в жидких кристаллах) [3], а также длительности лазерного импульса (например, изменяемая траектория температурного фазового перехода на диаграмме давление/температура в фемтосекундном временном масштабе) [4].

В этом аспекте лазерные методы играют здесь ключевую роль и дают уникальную возможность регулировать такими процессами в зависимости

от условий, при которых формируются наноструктуры при лазерном воздействии с различной длительностью импульсов. Это позволяет говорить о 4D-процессах, что проявляется в электрофизике и оптике тонких нанокластерных пленок на твердой поверхности (см., например, [5]).

Численными методами с использованием оригинальных алгоритмов нами ранее были продемонстрированы процедуры управляемого получения тонких гранулированных металлических пленок с произвольной топологией при изменении соответствующих лазерно-индуцированных параметров задачи. Кроме того, обсуждалась также возможность предсказания как их оптических свойств, так и электропроводности с использованием методов компьютерного моделирования [6–8]. В результате получено хорошее совпадение с экспериментальными данными в качественном ходе рассматриваемых зависимостей [9–12].

В настоящей работе мы рассматриваем некоторые физические принципы для резкого увеличения электропроводности в пространственно-неоднородных гранулированных структурах в тонких многослойных кластерных пленках на твердой поверхности, когда свободные заряженные частицы распространяются по границам проводящих поверхностей (топологическая электропроводность).

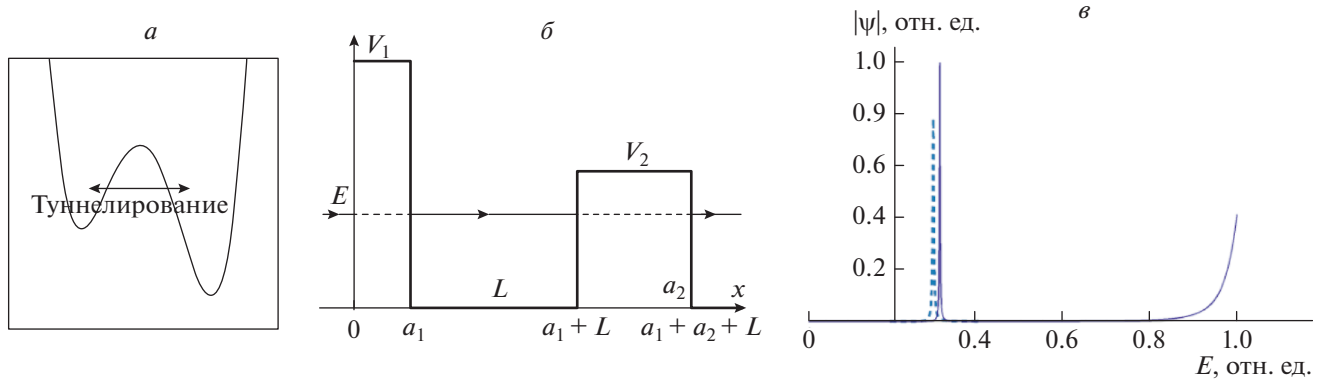


Рис. 1. Двойная потенциальная яма (а) и барьеры (б) для прохождения электрона с энергией E в присутствии внешнего электрического поля; (в) эффект резонансного туннелирования (в величине модуля волновой функции $|\Psi|$). При дальнейшем увеличении энергии электрона рост наблюдается из-за преодоления энергетического барьера. Обозначения параметров приведены непосредственно на рисунках.

Принципиальный пункт нашего исследования – выявление аналогий со сверхпроводимостью, т.е. тенденций и основного тренда в аспекте резкого увеличения электропроводности, основанных на ряде фундаментальных эффектов в нанокластерных структурах с определенной топологией. При этом основные характеристики сверхпроводимости, известные в монокристаллических образцах (т.е. значение критического тока – обычно, до нескольких сотен ампер; поведение в магнитных полях – эффект Мейснера, влияние температуры и т.д.) [2], нами не обсуждаются. Однако акцент делается на возможных механизмах, ответственных за высокую электропроводимость и особенности получения прыжковой проводимости в таких неоднородных поверхностных структурах тонкой пленки на твердой подложке (толщиной до 100 нм). Такая тенденция к реальной сверхпроводимости в конкретных случаях, очевидно, определяется соответствующим выбором элементного состава топологических пленок [13], но сам факт скачка в физических характеристиках исследуемых нами структур представляет значительный интерес в прикладном аспекте как триггерное устройство для разработки на новых физических принципах элементов и устройств фотоники и наноэлектроники [13, 14].

Кроме того, само состояние электронных энергетических уровней в такой гранулированной структуре определяет возможность (и эффективность) сверхпроводимости по механизму связанных пар электронов [15].

МЕТОДИКА РАСЧЕТА И РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДИМОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ

Речь идет о двух типах электропроводимости в квантовой теории – туннельной и прыжковой

электропроводимостях в присутствии внешнего электрического поля [16].

Туннельная проводимость

При квантовом туннелировании, когда частица массы m^* с энергией E проходит через потенциальный барьер шириной $(r_b - r_a)$ и высотой V в классически запрещенной области потенциала ($E < V$) – рис. 1а, волновая функция убывает, как известно [16], по экспоненциальному закону

$$\psi \sim \exp \left\{ -\frac{\sqrt{8m}}{\hbar} \int_{r_a}^{r_b} \sqrt{(V - E)} dr \right\}. \quad (1)$$

В двубарьерном потенциале (рис. 1б) может образоваться проходящая волна (для квантовой частицы – электрона), которая фактически воспринимает потенциальный барьер как фазовый объект. Это связано с тем, что при $E < V$ между двумя потенциальными барьерами с высотами V_1 и V_2 происходит конструктивная интерференция для проходящей волны (усиливающая проходящую волну) и деструктивная интерференция для обратной волны (ослабляющая ее) при определенных параметрах потенциальных барьеров, удовлетворяющих интерференционным условиям. Данное явление резонансного туннелирования приводит к усилению квантовой когерентности для проходящей волны с энергией, равной собственным значениям энергии квантовых барьеров. Это продемонстрировано на рис. 1в, где можно видеть резкий пик пропускания около определенного уровня энергии – фактически, максимум в спектре пропускания. Данный эффект очень сильно зависит от формы потенциальных барьеров, а также от неоднородностей потенциала и процессов диссипации (они играют деструктивную роль). В нашей задаче это определяется топологией системы [17].

Прыжковая проводимость

Зависящая от температуры волновая функция $\psi \sim \exp\{-W/k_B T\}$, где W – энергия частицы, k_B – постоянная Больцмана, T – температура, учитывает влияние некогерентных процессов, когда электрон получает энергию от фононов (термоактивный переход). Тогда электропроводимость σ зависит от температуры T и размерности системы d следующим образом $\sigma \sim \sigma_0 \exp\{-(T_0/T)^{d+1}\}$, где σ_0 и T_0 – начальные значения параметров, $T \geq T_0$ [18].

Эта задача может быть сведена к тому же туннельному механизму с вариацией параметров потенциальных ям и барьеров, но уже при фиксированном значении температуры; аналогично также влияние локальных полей из-за пространственной неоднородности пленки [9, 10].

В следующем разделе мы приведем результаты расчетов для этих двух случаев.

ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ КВАЗИОДНОМЕРНУЮ ЦЕПОЧКУ НАНОКЛАСТЕРОВ

В условиях туннелирования электрона (с энергией E) через гребенку потенциальных барьеров, в общем случае при разных расстояниях между ними и высоте барьеров, рассчитаем пропускание (энергетические спектры пропускания) для электронов в такой гребенке.

Потенциальной барьер представляем в виде потенциала Морзе [19]:

$$V(r) = D_e \left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)^2, \quad (2)$$

где D_e – высота потенциального барьера; $a = \omega_0 \sqrt{m_e/2D_e}$ – ширина потенциального барьера; ω_0 – частота гармонического осциллятора, который аппроксимирует потенциал Морзе; r_0 – положение локального минимума (положение равновесия).

Результаты расчета для пропускания электронов T с помощью матрицы переноса – transfer matrix approach [20, 21] – представлены на рис. 2. Сравнительно близкое и далекое расположение потенциальных барьеров относительно друг друга определяется их собственной шириной. Параметры расчета: плотность валентных электронов $N_e = 40$, параметр Вигнера–Зейтца $r_s = 2.1$ (он пропорционален $1/N_e^{1/2}$) эффективная масса электрона $m_e^* = 1.4m_e = 0.708\text{MeV}$, $\hbar/\tau = 10^{-3} E_F$ (τ – временной параметр), энергия Ферми $E_F = 6$ эВ.

На рис. 2в, 2д приведены зависимости спектров пропускания от E/E_F для цепочки нанокластеров (10 кластеров в 1D-модели Кронига–Пенни) [2].

Квантово-механическое туннелирование электронов может происходить как в самом локализованном нанокластере, так и из определенного нанокластера в соседние нанокластеры (делокализованная система). Резонансное туннелирование относится к туннелированию, в котором коэффициент прохождения электронов через неоднородную структуру достигает резкого пика при определенных энергиях электрона. Для электронов с энергией, приблизительно соответствующей уровню виртуальной резонансной энергии квантовой ямы, коэффициент пропускания близок к единице. Поэтому электрон с этой резонансной энергией может пересекать потенциальный барьер, не отражаясь. Это резонансное явление аналогично тому, что имеет место для света в оптическом резонаторе Фабри–Перо при соответствующих фазовых соотношениях.

В случае сильно неупорядоченной системы нанокластеров происходит подавление эффекта резонансного туннелирования. Однако, здесь оказывается возможным учет механизма прыжковой проводимости, который может рассматриваться также в рамках проявления эффектов туннелирования, но уже при влиянии изменения температуры – эффект термоактивации [12, 22] и/или из-за влияния локального поля – изменение высоты потенциального барьера [10].

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОНОВ В НАНОКЛАСТЕРНОЙ СИСТЕМЕ В ФОРМАТЕ ИНТЕГРАЛА ПО ТРАЕКТОРИЯМ

Не останавливаясь на деталях расчета, приведем только полученные нами конечные результаты для ряда зависимостей.

Амплитуда вероятности перехода частицы из одной точки в другую для распространения зарядовых частиц между двумя локализованными в пространстве состояниями с нормальными координатами (q' , q'') в соответствующие моменты времени (t' , t'') определяется оператором эволюции системы U в формализме пропагатора K [23, 24]:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \int Dq \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L dt\right), \quad (3)$$

где $Dq = \frac{1}{A} \prod_{j=1}^{n-1} \frac{1}{A} q_j(t_j)$ – мера в континуальном интеграле, а Лагранжиан представляем в обычной квадратичной форме (координаты x , y и потенциала V):

$$L = \frac{\dot{x}^2}{2} + \frac{\dot{y}^2}{2} - V(x, y). \quad (4)$$

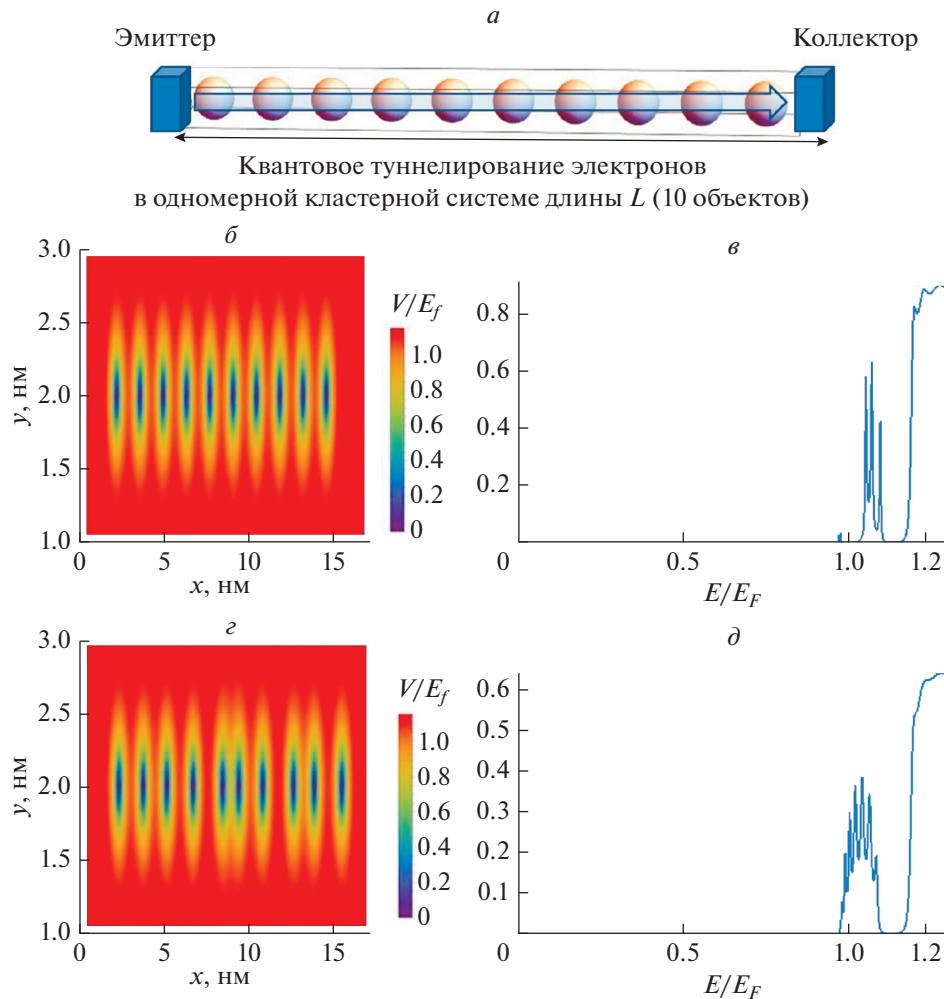


Рис. 2. Потенциал квазиодномерной (типа Кронига–Пенни) нанокластерной матрицы – вход (emitter), выход (collector) – одномерная из 10 нанокластеров сверхрешетка (а); зависимость в упорядоченных – (б, е) структурах и неупорядоченных структурах – (в, д). Слева – сверху/внизу – профили потенциала для упорядоченного/неупорядоченного расположения кластеров в пространстве (x, y); справа (в, д) – их пропускание T (энергетические спектры пропускания), соответственно.

Для простоты рассмотрим вольт-амперную характеристику для квазиодномерной цепочки нанокластеров длиной L – одномерная траектория в формате модели Кронига–Пенни (рис. 2а). Тогда для электрического тока I , вызванного приложенным к системе нанокластеров напряжением U , получаем после интегрирования (по импульсам в сфере Ферми) для плотности тока (амплитуды прохождения электронов) следующее выражение [18]:

$$I = -eA \int_0^{p_F} \frac{\hbar k_z}{m^*} T(k_z) \frac{2\pi(p_F^2 - \hbar^2 k_z^2)}{(2\pi\hbar)^3} \hbar dk_z, \quad (5)$$

где множитель $\frac{2\pi(p_F^2 - \hbar^2 k_z^2)}{(2\pi\hbar)^3} \hbar dk_z$ – число электронов в сфере Ферми, импульсы которых лежат в интервале от $\hbar k_z$ до $\hbar(k_z + dk_z)$, p_F – импульс Ферми, A – площадь сечения структуры.

Результаты выполненного расчета по рассмотренной процедуре представлены на рис. 3.

Как только напряжение на микроконтактах соответствует энергии одного из резонансных состояний системы, туннельный ток увеличивается, практически в соответствии с законом Ома (область 1, рис. 3 – показана в мелком масштабе). При положительном смещении зарядов к правому контакту относительно левого, благодаря приложенному напряжению, уровень энергии Ферми начинает соответствовать резонансному уровню E_F . Это приводит к значительному увеличению тока (область 2 на рис. 3). При большем значении смещения заряда ток перестает течь, когда уровень E_F падает ниже края ширины зоны проводимости. Результатом является заметное снижение величины тока с увеличением напряжения, что соответствует возникновению области отрицательного диф-

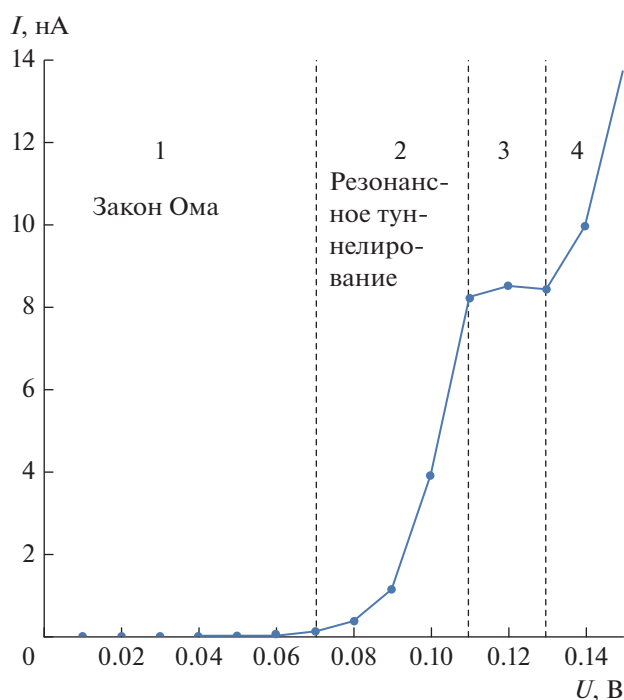


Рис. 3. Вольт-амперная характеристика для квазиодномерной цепочки нанокластеров, где I – ток, U – напряжение, и указаны различные режимы для полученных зависимостей (1–4) – пояснения даны в тексте.

ференциального сопротивления и/или режиму со значительным подавлением тока (область 3 на рис. 3). При большем значении смещения зарядов ток снова увеличивается по мере того, как зарядовые частицы (электроны) приобретают достаточную кинетическую энергию для преодоления барьеров (область 4 на рис. 3).

Таким образом, осуществима реализация различных режимов в электрофизике подобных нанокластерных тонкопленочных систем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты дают нам возможность рассмотреть новые физические принципы создания топологических функциональных элементов оптоэлектроники и фотоники в гибридной схеме (оптика + электрофизика) с помощью различных пространственных структур ансамбля нанокластеров в тонких пленках на твердой подложке при комнатной температуре, которые являются по сути несоизмеримыми структурами с регулируемым лазерным излучением симметричными свойствами [17]. Управляя их топологией, оказывается возможным резкое увеличение как электропроводности, так и оптического отклика по сравнению с монолитными однородными образцами [9, 11, 12].

Принципиальная проблема здесь – сопоставление лазерно-индуцированных топологических параметров подобных структур с их функциональными физическими свойствами. В полном объеме эта задача вряд ли разрешима, но даже нахождение доминирующих тенденций представляет значительный интерес. В частности, здесь речь идет о новых механизмах образования связанных электронов (Куперовских пар), но не за счет стандартного фононного механизма (см., например, [2]), а из-за топологических особенностей (см. [11]). Развитие этих подходов – предмет наших дальнейших исследований. Принципиальным при этом является анализ возможности достижения сверхпроводящих состояний – благодаря оптимальному выбору соответствующего элементного состава для таких структур [13].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проектом № ФЦПИР 1185/19 (соглашение № 075-15-2019-1838) с Минобрнауки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Tambasco J.-L., Corrielli G., Chapman R.J. et al.* // *Sci. Adv.* 2018. V. 4. № 9. Art. № EAAT3187.
2. *Лифишиц Е.М., Путаевский Л.П.* Статистическая физика. Часть 2. Теория состояния конденсата. М.: Физматлит, 2015. 440 с.
3. *Жен П.* Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
4. *Downer M.C.* // *Int. J. Thermophys.* 1993. V. 14. № 3. P. 361.
5. *Аракелян С.М., Кучерик А.О., Прокошев В.Г. и др.* Введение в фемтосекундную нанофотонику. Фундаментальные принципы и методы лазерной диагностики и управления наноструктурированными материалами. М.: Логос, 2015. 744 с.
6. *Истратов А.В., Кучерик А.О. и др.* Программный модуль расчета коэффициентов отражения, прохождения и поглощения в видимом диапазоне для тонких наноструктурированных пленок. Свид. гос. рег. прогр. ЭВМ. № 2016612072. 2016.
7. *Истратов А.В., Кутровская С.В. и др.* Программный модуль расчета Вольт-амперных характеристик тонких металлических наноструктурированных пленок. Свид. гос. рег. прогр. ЭВМ. № 2016663558. 2016.
8. *Бухаров Д.Н., Истратов А.В.* Моделирование процесса образования тонкой пленки. Свид. гос. рег. прогр. ЭВМ. № 2014660377. 2014.
9. *Kavokin A., Kutrovskaya S., Kucherik A. et al.* // *Superlat. Microstruct.* 2017. V. 109. P. 454.
10. *Антипов А.А., Аракелян С.М., Емельянов В.И. и др.* // *Квант. электрон.* 2011. V. 41. № 8. С. 735.
11. *Аракелян С.М., Осипов А.В., Скрябин И.О. и др.* // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2017. Т. 81. № 12. С. 1604; *Arakelian S.M., Osipov A.V., Scryabin I.O. et al.* // *Bull. Rus. Acad. Sci. Phys.* 2017. V. 81. № 12. P. 1416.

12. *Kucherik A.O., Kutrovskaya S.V., Osipov A.V. et al.* // *Sci. Rep.* 2017. V. 7. № 1. P. 10284.
13. *Zhang T., Jiang Y., Song Z. et al.* // *Nature.* 2019. V. 566. P. 475.
14. *Maddury S., Muhtar A., Ajay M.K. et al.* // *arXiv: 1808.07695v1.* 2018.
15. *Кресин В.З., Овчинников Ю.Н.* // *УФН.* 2008. Т. 178. № 5. С. 449.
16. *Ландау Л.Д., Лифшиц Э.М.* Квантовая механика. Теоретическая физика. М.: Наука, 1986. 736 с.
17. *Аракелян С.М., Худаберганов Т.А., Истратов А.В. и др.* // *Опт. и спектроск.* 2019. Т. 127. № 1. С. 125; *Arakelian S.M., Khudaberganov T.A., Istratov A.V. et al.* // *Opt. Spectrosc.* 2019. V. 127. № 1. P. 121.
18. *Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А.* Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000.
19. *Dahl J.P., Springborg M.* // *J. Chem. Phys.* 1988. V. 88. № 7. P. 4535.
20. *Jirauschek C.* // *Quant. Electron.* 2009. V. 45. P. 1059.
21. *Walker J.S., Gathright J.* // *Math. Comp. Phys.* 1992. V. 6. P. 393.
22. *Kucherik A.O., Kutrovskaya S.V., Osipov A.V. et al.* // *Sci. Rep.* 2019. V. 9. № 338. P. 1.
23. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. Нью-Йорк: McGraw – Hill Book Company, 1965. 384 с.
24. *Sakurai J.J.* *Modern quantum mechanics.* Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1993.