

Вплив шорсткості поверхні на осциляції енергії Фермі металевих наноплівки

А.В. Коротун^{1,*}, І.М. Тітов²

¹ Запорізький національний технічний університет, вул. Гоголя 64, 69063 Запоріжжя, Україна

² Таврійський державний агротехнологічний університет, пр. Б. Хмельницького 18, 72310 Мелітополь, Україна

(Одержано 03.08.2016, у відредагованій формі – 23.11.2016, опубліковано online 29.11.2016)

У роботі в рамках моделі вільних електронів та потенціальної ями скінченної глибини запропоновано підхід до врахування малоамплітудних неоднорідностей поверхні наноплівки. З використанням методу збурення форми межі розраховано енергетичний спектр електронів та розмірні осциляції енергії Фермі металевих плівок із шорсткою поверхнею. Встановлений зв'язок між характером рельєфу поверхні, амплітудою неоднорідностей, параметрами матеріалу та поведінкою відносної енергії Фермі. Розрахунки виконано для наноплівок Al, Cu та Au.

Ключові слова: Енергія Фермі, Металева наноплівка, Шорсткість, Осциляції, Збурення форми межі.

DOI: [10.21272/jnep.8\(4\(1\)\).04009](https://doi.org/10.21272/jnep.8(4(1)).04009)

PACS numbers: 68.35. – p, 73.20.At, 73.30. + y

1. ВСТУП

Металеві 2D-системи є предметом інтенсивних теоретичних та експериментальних досліджень останніх років у зв'язку з вдосконаленням технологій одержання суцільних нанометрових шарів [1-7]. В подібних структурах енергетичні характеристики (енергія Фермі, робота виходу, поверхнева енергія) залежать від товщини плівки і мають осцилюючий характер.

У переважній більшості випадків вивчення металевих 2D-структур ґрунтується на припущенні про однорідність наноплівок за товщиною. Проте на практиці одержання ідеально гладких шарів неможливе. Варіації товщини виникають внаслідок зернистої структури реальної плівки і мають масштаб від декількох десятків нанометра і більше. Таку ж за порядком величину має середня довжина вільного пробігу електронів. Крім того, в експериментальній роботі [8] показано, що наявність шорсткої поверхні призводить до немонотонної поведінки диференціальних вольт-амперних характеристик поблизу енергії Фермі і зміни тунельної провідності. Важливість врахування особливостей розмірної залежності енергії Фермі зумовлена також тим, що вона дає основний внесок в оптичне поглинання [9].

Отже, теоретичні розрахунки, що описують явища, пов'язані з ефектами розмірного квантування, потребують корекції.

Для врахування неоднорідності наноплівки за товщиною вибір підходу залежить від типу неоднорідності. Для плавних неоднорідностей використовують адіабатичне наближення і модель Намба [10]. Проте ці методи не можна застосовувати до плівок зі стохастичним рельєфом поверхні. До таких систем найчастіше використовують метод, що ґрунтується на переході у рівнянні Шредінгера до нової системи координат, в якій поверхня плівки буде гладкою [11]. Перевагою такого підходу є можливість виділення збурення, зумовленого неоднорідністю плівки за товщиною, в явному вигляді, не обмежуючись ади-

абатичним наближенням, проте отримуваний гамільтоніан не є ермітовим.

В роботах [12,13] для опису шорсткої поверхні застосовано фрактальний підхід, особливістю якого є те, що фрактальна поверхня передбачає самоподібність на усіх масштабах. Проте фізичні об'єкти, зокрема наноплівки, у зв'язку з наявністю мінімального характерного масштабу не є математично фрактальними. Внаслідок цього, як показано в роботі [8], використання фрактального опису шорсткої поверхні призводить до нефізичних результатів. Також у [8, 14] розглядається підхід, коли випадкова межа плівки описується гауссівською функцією. Проте використання цього підходу значно ускладнює розрахунки енергетичного спектра та густини станів. Тому у даній роботі для розрахунку спектра пропонується використання більш простого методу «варіації форми межі», відомого у фізиці ядра, механіці суцільного середовища, та фізиці низькорозмірних систем (див. роботи [15, 16] та посилання в них). Перевагою вказаного підходу є те, що випадкову неоднорідність поверхні наноплівки в першому порядку теорії збурень можна врахувати шляхом модифікації граничних умов для хвильової функції нульового наближення, оскільки поправка до гамільтоніану (за аналогією з [16]) пропорційна квадрату відносної амплітуди неоднорідності, і тому її можна не враховувати.

Метою даної роботи є дослідження впливу шорсткості поверхні нанометрових металевих плівок на осциляції енергії Фермі в рамках методу «збурення форми межі».

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Припустимо, що електрони провідності тонкої металеві плівки товщиною L знаходяться в прямокутному потенційному ящику глибиною $U_0 < 0$, форма якого повторює форму плівки з гладкими поверхнями. Поздовжні розміри плівки набагато більші за її товщину $a, b \gg L$. У цьому випадку проявляє себе кван-

* andko@zntu.edu.ua

тування поперечної компоненти імпульсу, що призводить до формування підзон.

Незбурені стани в плівці описуються хвильовими функціями

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{ab}} \psi_m(x) e^{\frac{2\pi n y i}{a}} e^{\frac{2\pi p z i}{b}}, \quad (1)$$

де $n = \pm 1, \pm 2, \dots$; $p = \pm 1, \pm 2, \dots$; $m = \pm 1, \pm 2, \dots$, а $\psi(x)$ дорівнює

$$\psi_m(x) = \begin{cases} B_1 e^{m x}, & x < -\frac{L}{2}; \\ A_1 \cos k_{xm} x + A_2 \sin k_{xm} x, & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}; \\ B_4 e^{-m x}, & x > \frac{L}{2}. \end{cases} \quad (2)$$

Тут $k_m = \sqrt{k_0^2 - k_{xm}^2}$; $\hbar^2 k_0^2 = 2m_e U_0$; m_e – маса електрона.

Вважаючи плівку шорсткою, а неоднорідності малими ($\xi = \hbar/L \ll 1$, де \hbar – максимальна амплітуда

$$\left(\frac{2}{m} - k_{xm}^2 \right) \sin k_{xm} L + 2 \frac{m}{k_{xm}} \cos k_{xm} L = \xi k_{xm} L \left(k_{xm}^2 \cos k_{xm} L - \frac{2}{m} \cos^2 \frac{k_{xm} L}{2} + \frac{3}{2} m k_{xm} \sin k_{xm} L \right). \quad (4)$$

Розмірна залежність енергії Фермі визначається розв'язком трансцендентного рівняння [17]

$$m_F \varepsilon_F = \frac{\pi \hbar^2}{m_e} L \bar{n} + \sum_{m=1}^{m_F} \varepsilon_m; \quad \varepsilon_{i_F} \leq \varepsilon_F; \quad m = 1, 2, \dots, m_F, \quad (5)$$

де ε_m – енергія m -ої електронної підзони, якій відповідає хвильова функція $\psi_m(x)$; m_F – номер останньої зайнятої або частково зайнятої підзони; \bar{n} – концентрація електронів провідності у 3D-металі.

3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки було проведено для наноплівок Al, Cu та Au з опуклим ($h > 0$) та увігнутим ($h < 0$) рельєфом, концентрацією електронів $\bar{n} = 3/4\pi r_s^3$ зі значеннями середньої відстані між електронами $r_s = 2,07a_0$, $2,11a_0$ та $3,01a_0$, відповідно (a_0 – борівський радіус).

Результати розрахунків розмірних залежностей енергії Фермі для плівки Cu наведено на рис. 1. Як бачимо з цього рисунку, якісний характер розмірної залежності зберігається. Так, максимуми досягаються в усіх випадках за одних і тих же значень L , а зі зростанням L амплітуди осциляцій зменшуються. Кількісно значення $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0$ для випадку шорстких плівок на 2 – 4 % менші порівняно з ідеально гладкою плівкою. Також виявляється, що для плівок Cu величина $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0 < 1$ при $h = 0,05$ і $0,1$ нм.

На рис. 2 наведені розмірні залежності енергії

шорсткості), можна скористатись методом „збурення форми межі“. Розкладаючи значення хвильової функції $\psi(x)$ та її похідної на межах $x = \pm L/2$ в ряд Тейлора, можна записати:

$$\begin{aligned} \psi_1 \left(-\frac{L}{2} \right) - \xi \frac{L}{2} \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=-\frac{L}{2}} &= \psi_2 \left(-\frac{L}{2} \right) - \xi \frac{L}{2} \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=-\frac{L}{2}}; \\ \psi_2 \left(\frac{L}{2} \right) + \xi \frac{L}{2} \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=\frac{L}{2}} &= \psi_3 \left(\frac{L}{2} \right) + \xi \frac{L}{2} \frac{d\psi_3}{dx} \Big|_{x=\frac{L}{2}}; \\ \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=-\frac{L}{2}} - \xi \frac{L}{2} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \Big|_{x=-\frac{L}{2}} &= \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=-\frac{L}{2}} - \xi \frac{L}{2} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} \Big|_{x=-\frac{L}{2}}; \\ \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=\frac{L}{2}} + \xi \frac{L}{2} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} \Big|_{x=\frac{L}{2}} &= \frac{d\psi_3}{dx} \Big|_{x=\frac{L}{2}} + \xi \frac{L}{2} \frac{d^2\psi_3}{dx^2} \Big|_{x=\frac{L}{2}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Після підстановки (2) в (3) та наступного спрощення, матимемо в лінійному за ξ наближенні (див. додаток А) наступне рівняння для визначення енергетичного спектра:

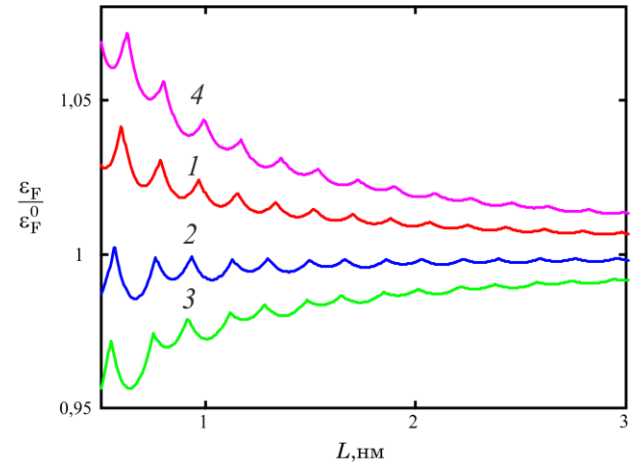


Рис. 1 – Розмірна залежність енергії Фермі плівок Cu за різних значень амплітуди неоднорідності: 1 – $h = 0$; 2 – $h = 0,05$ нм; 3 – $h = 0,1$; 4 – $h = -0,05$ нм

Фермі різних металів за фіксованого значення амплітуди неоднорідності $h = 0,05$ нм. Як бачимо з рисунку, для плівок Al і Cu енергія Фермі тим менша, чим більше величина неоднорідностей. Кількісна різниця результатів для цих випадків полягає в тому, що амплітуди осциляцій у випадку Au значно більші, ніж у випадку Cu та Al. Це пов'язано з тим, що розмах осциляцій визначається величиною π/k_F^0 , яка для Al найменша. Зменшення величини енергії Фермі шорстких плівок різних металів з опуклим рельєфом пояснюється збільшенням «середньої» ширини потенціальної ями і, відповідно, просіданням енергетичних рівнів.

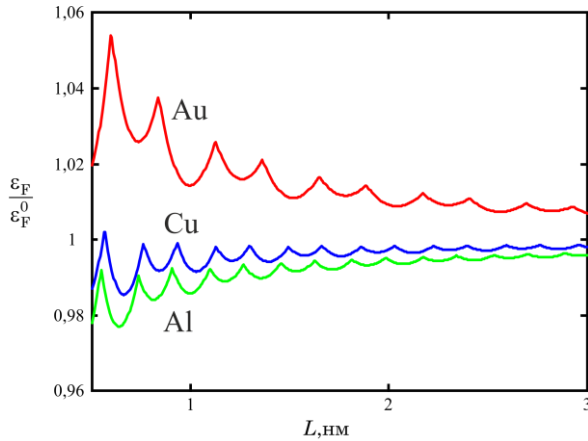


Рис. 2 – Розмірна залежність енергії Фермі плівок різних металів при $h = 0,05$ нм

4. ВИСНОВКИ

В роботі досліджено вплив шорсткості поверхні металевих 2D-систем на розмірні осциляції енергії Фермі. У рамках методу збурення форми межі розраховано енергетичний спектр електронів у шорстких плівках нанометрової товщини. Проведено порі-

вняння з випадком плівки з ідеально гладкою поверхнею.

Встановлено, що незалежно від матеріалу наноплівки енергія Фермі зменшується зі збільшенням амплітуди неоднорідності. Це пов'язано зі збільшенням «середньої» ширини потенціальної ями і просіданням енергетичних рівнів. У випадку увігнутого рельєфу поверхні спостерігається зворотний ефект – збільшення величини відносної енергії Фермі.

Показано, що для плівок Cu з опуклим рельєфом поверхні значення енергії Фермі менші, ніж для випадку об'ємного металу.

Крім того, амплітуди осциляцій енергії Фермі для плівок Al значно більші, ніж для плівок Cu, що пояснюється більшим значенням ϵ_F^0 для випадку алюмінію.

ДОДАТОК А ОДЕРЖАННЯ РІВНЯННЯ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА

Наведемо процедуру одержання рівняння (4). Підставляючи значення функцій та їх похідних у точках $x = \pm L/2$ в граничні умови (3), отримуємо однорідну систему лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} B_1 e^{-i_m \frac{L}{2}} - B_1 \xi \frac{L}{2} i_m e^{-i_m \frac{L}{2}} = A_1 \cos \frac{k_{xm} L}{2} - A_2 \sin \frac{k_{xm} L}{2} - \xi \frac{L}{2} k_{xm} \left(A_1 \sin \frac{k_{xm} L}{2} + A_2 \cos \frac{k_{xm} L}{2} \right); \\ B_4 e^{-i_m \frac{L}{2}} - B_4 \xi \frac{L}{2} i_m e^{-i_m \frac{L}{2}} = A_1 \cos \frac{k_{xm} L}{2} + A_2 \sin \frac{k_{xm} L}{2} + \xi \frac{L}{2} k_{xm} \left(-A_1 \sin \frac{k_{xm} L}{2} + A_2 \cos \frac{k_{xm} L}{2} \right); \\ i_m \left(B_1 e^{-i_m \frac{L}{2}} - B_1 \xi \frac{L}{2} i_m e^{-i_m \frac{L}{2}} \right) = k_{xm} \left[A_1 \sin \frac{k_{xm} L}{2} + A_2 \cos \frac{k_{xm} L}{2} + \xi \frac{L}{2} k_{xm} \left(A_1 \cos \frac{k_{xm} L}{2} - A_2 \sin \frac{k_{xm} L}{2} \right) \right]; \\ i_m \left(B_4 e^{-i_m \frac{L}{2}} - B_4 \xi \frac{L}{2} i_m e^{-i_m \frac{L}{2}} \right) = k_{xm} \left[A_1 \sin \frac{k_{xm} L}{2} - A_2 \cos \frac{k_{xm} L}{2} + \xi \frac{L}{2} k_{xm} \left(A_1 \cos \frac{k_{xm} L}{2} + A_2 \sin \frac{k_{xm} L}{2} \right) \right]. \end{cases} \quad (A.1)$$

Система (A.1) матиме розв'язок за умови рівності нулю її визначника. Тому матимемо

$$\begin{aligned} & i_m^2 \left(\sin k_{xm} L + \xi L \cos^2 \frac{k_{xm} L}{2} \right) - k_{xm}^2 \left(\sin k_{xm} L + \xi L k_{xm} \cos k_{xm} L - \xi^2 \frac{L^2}{4} k_{xm}^2 \sin k_{xm} L \right) + \\ & + i_m k_{xm} \left(2 \cos k_{xm} L - \frac{3}{2} \xi L k_{xm} \sin k_{xm} L + \xi^2 \frac{L^2}{4} k_{xm}^2 (1 - \cos k_{xm} L) \right) = 0. \end{aligned} \quad (A.2)$$

Відкидаючи у виразі (A.2) члени, пропорційні ξ^2 , приходимо до рівняння (4).

Влияние шероховатости поверхности на осцилляции энергии Ферми металлических нанопленок

А.В. Коротун¹, И.Н. Титов²

¹ Запорозький національний технічний університет, ул. Гоголя 64, 69063 Запорозжє, Україна

² Тавричеський державний аграрно-технологічний університет, пр. Б. Хмельницького 18, 72310 Мелітополь, Україна

В работе в рамках модели свободных электронов и потенциальной ямы конечной глубины предложен подход к учету малоамплитудных неоднородностей поверхности нанопленок. С использованием метода возмущения формы границы рассчитан энергетический спектр электронов и размерные ос-

цилляции энергии Ферми металлических пленок с шероховатой поверхностью. Установлена связь между характером рельефа поверхности, амплитудой неоднородностей, параметрами материала и поведением относительной энергии Ферми. Расчеты выполнены для Al, Cu и Au.

Ключевые слова: Энергия Ферми, Металлическая нанопленка, Шероховатость, Осцилляции, Возмущение формы границы.

Influence of Surface Roughness on the Fermi Energy of the Oscillations of Metal Nanofilms

A.V. Korotun¹, I.M. Titov²

¹ Zaporizhzhya National Technical University, 64, Gogol st., 69063 Zaporizhzhya, Ukraine

² Taurian State Agrotechnology University, 18, B. Khmelnitsky prosp., 72310 Melitopol, Ukraine

In a work the approach to accounting low-amplitude irregularities of surface nanofilms have been proposed in the free-electron model and the potential well of finite depth. The energy spectrum of electrons and the size oscillations of the Fermi energy of metal film with a rough surface have been calculated within the boundary shape perturbation method. The relations between relief and surface character, amplitude irregularities, material parameters and behavior relative to the Fermi energy have been established. The calculations have been carried out for Al, Cu, and Au.

Keywords: Fermi Energy, Metal nanofilm, Roughness, Oscillations, The boundary shape perturbation.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- Pucci, F. Kost, G. Fahsold, M. Jalochoowski, *Phys. Rev. B* **74**, 125428 (2006).
- M. Hövel, B. Gompf, M. Dressel, *Phys. Rev. B* **81**, 035402 (2010).
- S. Laref, J. Cao, A. Asaduzzaman, K. Runge, P. Deymier, R.W. Ziolkowski, M. Miyawaki, K. Muralidharan, *Opt. Expr.* **21**, 11827 (2013).
- W. Ming, S. Blair, F. Liu, *J. Phys.: Condens. Matter.* **26**, 505302 (2014).
- M. Lončarić, J. Sancho-Parramon, H. Zorc, S. Šegota, P. Dubček, S. Bernstorff, *Thin Sol. Films* **591**, 204 (2015).
- A.V. Korotun, Ya.V. Karandas, *J. Nano- Electron. Phys.* **7** No 2, 02018 (2015).
- S.W. Kim, L. Pang, B. Hong, J. Ptasinski, Ye.Fainman, *Opt. Lett.* **41**, 1522 (2016).
- В.Д. Борман, П.В. Борисюк, О.С. Васильев, М.А. Пушкин, В.Н. Тронин, И.В. Тронин, В.И. Троян, Н.В. Скородумова, Б. Йоханссон, *Письма в ЖЭТФ* **86**, №6, 450 (2007) (V.D. Borman, P.V. Borysyuk, O.S. Vasyl'ev, M.A. Pushkun, V.N. Tronyn, Y.V. Tronyn, V.Y. Troyan, N.V. Skorodumova, B. Yohansson, *ZhETF Lett.* **86**, No 6, 450 (2007)).
- В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Порогов, *УФЖ* **53**, 569 (2008) (V.P. Kurbatskiy, A.V. Korotun, V.V. Pohosov, *Ukr. J. Phys.* **53**, 569 (2008)).
- R.I. Bihun, Z.V. Stasyuk, O.A. Balitskii, *Phys. B* **487**, 73 (2016).
- Z. Teanović, M.V. Jarić, S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2760 (1986).
- А.А. Потапов, *Фракталы в радиофизике и радиолокации: Топология выборки* (Москва: Университ. книга: 2005) (A.A. Potapov, *Fraktaly v radiofizike i radiolokatsii: Topologiya vyboraki* (Moskva: Universit. kniga: 2005)).
- R.C. Munoz, C.A. Gonzalez-Fuentes, R. Henriquez, A. Espinosa, G. Kremer, L. Moraga, A. Ibañez-Landeta, S. Bahamondes, S. Donoso, M. Flores, *J. Appl. Phys.* **110**, 023710 (2011).
- S. Chatterjee, A.E. Meyerovich, *Phys. Rev. B* **84**, 165432 (2011).
- В.П. Дзюба, Ю.Н. Кульчин, В.А. Милічко, *ФТТ* **56**, 355 (2014) (V.P. Dzyuba, Yu.N. Kul'chin, V.A. Milichko, *Phys. Solid State* **56**, 355 (2014)).
- А.В. Коротун, *ФТТ* **56**, 1197 (2014) (A.V. Korotun, *Phys. Solid State* **56**, 1197 (2014)).
- В.П. Курбацкий, В.В. Порогов, *ФТТ* **46**, 526 (2004) (V.P. Kurbatskiy, V.V. Pogosov, *Phys. Solid. State* **46**, 526 (2004)).