

А.В. КОРОТУН, Я.В. КАРАНДАСЬ

Національний університет "Запорізька політехніка"
(Вул. Жуковського, 64, Запоріжжя 69063; e-mail: andko@zntu.edu.ua)

ЕНЕРГЕТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕТАЛЕВИХ НАНОДРОТІВ З ПЕРІОДИЧНО МОДУЛЬОВАНОЮ ПОВЕРХНЕЮ

УДК 538.975

З використанням теорії збурень знайдено енергетичний спектр електронів у металевому нанодроті з періодично модульованою поверхнею. Для розв'язку поставленої задачі було здійснено перехід у систему координат, що "спрямляє" межі. Досліджено вплив амплітуди модуляції на розмірні осциляції енергії Фермі таких систем. Показано, що збільшення амплітуди модуляції приводить до зменшення енергії Фермі дроту. Розрахунки було проведено для дротів Au, Cu та Al.

Ключові слова: нанодріт, енергія Фермі, амплітуда модуляції, теорія збурень.

1. Вступ

Результатом розвитку нанотехнологій став синтез і використання металевих наноструктур різноманітних конфігурацій, що мають, відповідно, різні оптичні властивості. Серед вказаних об'єктів окреме місце посідають структури, що мають нанометрові розміри лише у двох напрямках – металеві нанопровідники [1–9]. Інтерес до вивчення властивостей 1D-систем пов'язаний із їх широким застосуванням у нанофотоніці, зокрема, як елементів оптичних антен [10, 11], у спектроскопії для збільшення перерізу комбінаційного розсіювання [12] та одномолекулярної флуоресцентної спектроскопії [13], як зондів для оптичної мікроскопії ближнього поля [14], а також як складових частин лазерів, біосенсорів та інших пристроїв [15].

При одержанні металевих нанодротів вплив неоднорідних за довжиною механічних напружень може призводити до відхилення форми поверхні дроту від циліндричної. Найбільш поширеними випадками викривлення поверхні дротів є стохастичний рельєф і періодична модуляція вздовж осі нанодроту. Останній випадок, зокрема, може бути пов'язаний із кристалічною будовою поверхні, вна-

слідок чого потенціальне поле поверхні нанодроту стає періодичною функцією поздовжньої координати. Крім того, вибір періодичної форми рельєфу пояснюється аналогією з випадком наноплівки, для яких експериментально [16] підтверджено, що форма поверхні близька до періодичної.

Оптичні властивості систем зниженої розмірності в значній мірі визначаються збудженням їхньої електронної підсистеми. При цьому одним із найважливіших параметрів цієї підсистеми є енергія Фермі, розмірна залежність якої зумовлює осциляції таких оптичних характеристик наноструктур, як оптична провідність, діелектрична функція та коефіцієнт поглинання [17–19].

В роботах [6, 20, 21] розглянуто електронні властивості носіїв заряду у нанодротах з випадковим рельєфом. Так, у [6] розглянуто розсіювання на неоднорідностях поверхні металевих нанодротів, в [20] – розсіювання на неоднорідностях інтерфейсу та електронна рухливість у квантових дротах, а в [21] – розсіювання на неоднорідностях, індукованих переходом діелектрик–метал–діелектрик. Енергетичний спектр носіїв заряду в 1D-системах з періодично модульованою поверхнею одержано в роботі [22]. Проте, питання про вплив періодичної модуляції поверхні на поведінку енергії Фер-

мі металевих нанодротів є невивченим, а тому актуальним.

2. Постановка задачі та основні співвідношення

Бічна поверхня нанодроту кругового поперечного перерізу з періодичним за довжиною рельєфом поверхні у полярній системі координат задається рівнянням $\rho = \rho_0 + f(z)$, де $f(z) = a \cos \kappa z$ – періодична функція з просторовим періодом $\Lambda = 2\pi/\kappa$, $\rho_0 = \text{const}$ – середній радіус провідника, $a \ll \rho_0$ – глибина модуляції, а вісь z направлена вздовж осі дроту.

Перейдемо у нову систему координат $\rho' = \rho_0 \rho / [\rho_0 + f(z)]$, $\varphi' = \varphi$, $z' = z$, в якій поверхня провідника є циліндричною, а її рівняння має вигляд $\rho' = \rho_0$. При цьому оператор Лапласа у рівнянні Шредінгера перетворюється за формулою

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,k} \partial_i (\sqrt{g} g^{ik} \partial_k), \tag{1}$$

де $g = \det [(g^{ik})^{-1}]$; g^{ik} – контраваріантний метричний тензор, компоненти якого визначаються виразом [23]:

$$g^{ik}(\rho', \varphi', z') = \frac{\partial x_i}{\partial \rho} \frac{\partial x_k}{\partial \rho} + \frac{\partial x_i}{\partial \varphi} \frac{\partial x_k}{\partial \varphi} + \frac{\partial x_i}{\partial z} \frac{\partial x_k}{\partial z}, \tag{2}$$

$x_{i,k} = \rho', \varphi', z'$.

Розраховуючи всі компоненти контраваріантного метричного тензора за формулою (2) (див. дод. А), отримуємо:

$$g^{ik} = \begin{pmatrix} \frac{\rho'^2 f'^2_{z'} + \rho_0^2}{(\rho_0 + f(z'))^2} & 0 & -\frac{\rho' f'_{z'}}{\rho_0 + f(z')} \\ 0 & \frac{\rho_0^2}{\rho'^2 (\rho_0 + f(z'))^2} & 0 \\ -\frac{\rho' f'_{z'}}{\rho_0 + f(z')} & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\sqrt{g} = \frac{\rho' (\rho_0 + f(z'))^2}{\rho_0^2}. \tag{3}$$

Отже, оператор Лапласа у нових координатах набуває вигляду:

$$\Delta = \frac{\rho_0^2 + \rho'^2 f'^2_{z'}}{(\rho_0 + f(z'))^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{\rho_0^2 + \rho'^2 f'^2_{z'}}{(\rho_0 + f(z'))^2} \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{\rho' f'^2_{z'}}{(\rho_0 + f(z'))^2} \frac{\partial}{\partial \rho'} - \frac{2\rho' f'_{z'}}{\rho_0 + f(z')} \frac{\partial}{\partial \rho' \partial z'} -$$

$$- \frac{\rho' f''_{z'z'}}{\rho_0 + f(z')} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2}, \tag{4}$$

де введено позначення

$$f'_{z'} \equiv \frac{df(z')}{dz'}; \quad f''_{z'z'} \equiv \frac{d^2 f(z')}{dz'^2}. \tag{5}$$

Оскільки у використовуваному наближенні $\max f'_{z'} = a\kappa \ll 1$, $\max (af''_{z'z'}) = a^2\kappa^2 \ll 1$, $\rho' f'_{z'} \ll \rho_0$, то у першому порядку теорії збурень за a/ρ_0 для оператора Лапласа отримуємо вираз:

$$\Delta \cong \frac{\rho_0^2}{(\rho_0 + f(z'))^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z'^2}.$$

Оскільки амплітуда модуляцій вважається малою в порівнянні з середнім радіусом нанодроту ($a/\rho_0 \ll 1$), то згідно з теорією збурень гамільтоніан має вигляд

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V},$$

або

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \times \left[\frac{\rho_0^2}{(\rho_0 + f(z'))^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right].$$

Гамільтоніан незбуреної задачі

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right],$$

а його власні значення

$$E_{mn}^{(0)} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^{(0)2}}{2m_e}.$$

Оператор збурення має вигляд (див. дод. Б):

$$\hat{V} = \frac{\hbar^2 a}{m_e \rho_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} \right) \cos \kappa z'. \tag{6}$$

Поправка до спектра в першому порядку теорії збурень визначається виразом

$$E_{mn}^{(1)} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^{(0)} k_{mn}^{(1)}}{m_e}, \tag{7}$$

або

$$E_{mn}^{(1)} = \int_{V'} \psi_{mnp}^{(0)*}(\rho', \varphi', z') \hat{V} \psi_{mnp}^{(0)}(\rho', \varphi', z') dV'. \tag{8}$$

Вибираючи як хвильові функції нульового наближення функції кругового дроту [18]:

$$\psi_{mnp}^{(0)}(\rho', \varphi', z') = R_{mn}(\rho') \Phi_m(\varphi') Z_p(z'),$$

де

$$Z_p(z') = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i k_{z'p} z'}$$

– частина хвильової функції, що відповідає поздовжньому руху електрона уздовж осі дроту довжиною L ; індекс p нумерує значення z -компоненти хвильового вектора;

$$\Phi_m(\varphi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i m \varphi'}$$

– кутова частина хвильової функції; $m = 0, 1, \dots$;

$$R_{mn}(\rho') = C_{mn} I_m(k_{mn} \rho')$$

– радіальна частина хвильової функції;

$$C_{mn} = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 \left| I'_m(k_{mn}^{(0)} \rho_0) \right|}.$$

Розраховуючи інтеграл у (8) з використанням (7), матимемо для поправки до хвильового числа

$$k_{mn}^{(1)} = 2k_{mn}^{(0)} \frac{a}{\rho_0} \frac{\sin \varkappa L}{\varkappa L}. \quad (9)$$

Спектр у нульовому порядку теорії збурень визначається з трансцендентного рівняння [24]:

$$k_{mn}^{(0)} \frac{I'_m(k_{mn}^{(0)} \rho_0)}{I_m(k_{mn}^{(0)} \rho_0)} = \varkappa_{mn}^{(0)} \frac{K'_m(\varkappa_{mn}^{(0)} \rho_0)}{K_m(\varkappa_{mn}^{(0)} \rho_0)}, \quad (10)$$

де $I_m(x)$, $K_m(x)$, $I'_m(x)$, $K'_m(x)$ – функції Бесселя і Макдональда m -го порядку та їх перші похідні; $\varkappa_{mn}^{(0)2} = k_0^2 - k_{mn}^{(0)2}$, $\hbar k_0 = \sqrt{2m_e U_0}$, U_0 – глибина потенціальної ями.

Спектр з урахуванням поправки першого порядку теорії збурень

$$k_{mn} \cong k_{mn}^{(0)} + k_{mn}^{(1)} = k_{mn}^{(0)} \left(1 + 2 \frac{a}{\rho_0} \frac{\sin \varkappa L}{\varkappa L} \right). \quad (11)$$

Власні значення гамільтоніана з урахуванням поправки першого порядку теорії збурень

$$E_{mn} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^{(0)2}}{2m_e} \left(1 + 2 \frac{a}{\rho_0} \frac{\sin \varkappa L}{\varkappa L} \right)^2 \cong$$

$$\cong \frac{\hbar^2 k_{mn}^{(0)2}}{2m_e} \left(1 + 4 \frac{a}{\rho_0} \frac{\sin \varkappa L}{\varkappa L} \right).$$

Внаслідок того, що модуляція поверхні є крупномасштабною ($2\pi/\varkappa \gg 1$), $\varkappa L \ll 1$. У цьому випадку $\sin \varkappa L/\varkappa L \cong 1$ з достатньою точністю і можна записати

$$E_{mn} \cong \frac{\hbar^2 k_{mn}^{(0)2}}{2m_e} \left(1 + 4 \frac{a}{\rho_0} \right), \quad (12)$$

де другий доданок у дужках визначає поправку до спектра, зумовлену періодичною модуляцією поверхні дроту.

Розмірна залежність енергії Фермі визначається зі співвідношення [18]:

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 \rho_0^2} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2}, \quad (13)$$

де \bar{n} – концентрація електронів провідності у 3D-металі; числа k_{mn} визначаються рівнянням (11). У формулі (13) підсумовування проводиться за всіма значеннями m і n , для яких $k_{mn} < k_F$.

3. Результати розрахунків та їх обговорення

Розрахунки було проведено для нанопровідників Al ($Z = 3$), Cu ($Z = 2$) та Au ($Z = 1$) з концентрацією електронів $\bar{n} = 3/4\pi r_s^3$ з відповідними значеннями $r_s = 2,07a_0$, $2,11a_0$ та $3,01a_0$ (Z – валентність металу, r_s – середня відстань між електронами, a_0 – борівський радіус) та амплітудою модуляції $a/\rho_0 = 0; 0,05; 0,1$, що знаходяться у SiO₂ ($\chi = 1,1$ eV, $\epsilon = 4$, де χ – глибина залягання дна зони провідності діелектрика по відношенню до вакуумного рівня (електронна спорідненість); ϵ – діелектрична проникність) та Al₂O₃ ($\chi = 1,35$ eV, $\epsilon = 9$) [25].

Для врахування зонної структури діелектрика [26] потрібно перевизначити роботу виходу електронів із нанодроту, а, отже, і значення глибини ями. На відміну від випадку дроту у вакуумі, де

$$U_0 = \varepsilon_F^0 + W_0,$$

наявність діелектрика призводить до зменшення роботи виходу та глибини ями U_d з боку діелектрика:

$$U_d = \varepsilon_F^0 + W_d,$$

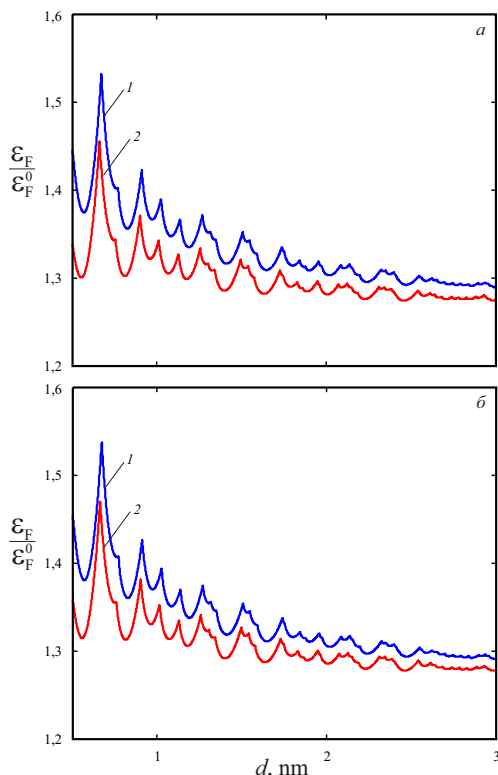


Рис. 1. Розмірні залежності енергії Фермі для нанодоту Au в середовищі Al₂O₃ (а) і SiO₂ (б) ($d = 2\rho_0$)

Результати самоузгоджених розрахунків для напівнеобмежених систем

Метал	Al		Cu		Au	
Діелектрик	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Al ₂ O ₃	SiO ₂
W_d , eV	1,29	1,84	1,49	1,89	1,41	1,79

де W_d – висота потенціального бар’єра на межі метал – діелектрик (бар’єр Шотткі).

За аналогією з роботою [26] скористаємось двома підходами до визначення W_d : I – робота виходу в діелектрик визначається як $W_d = W_0 - \chi$, де W_0 – робота виходу напівнескінченний метал – вакуум; II – значення W_d береться з результатів самоузгоджених розрахунків (див. таблицю).

Результати розрахунків розмірних залежностей енергії Фермі (у відносних одиницях ϵ_F/ϵ_F^0 , де $\epsilon_F^0 = \hbar^2(3\pi^2\bar{n})^{2/3}/2m_e$ – енергія Фермі однорідного електронного газу), що ілюструють вищевказані

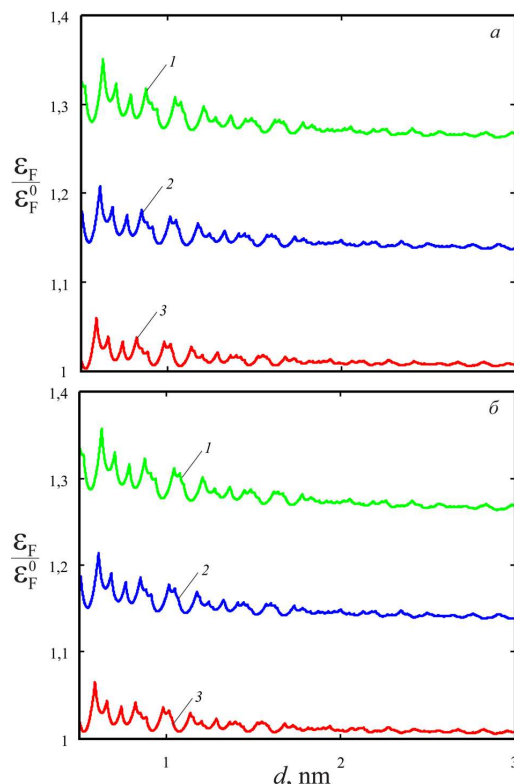


Рис. 2. Розмірні залежності енергії Фермі для нанодоту Cu в середовищі Al₂O₃ (а) і SiO₂ (б) за різних значень амплітуди модуляції ($a/\rho_0 = 0$ – крива 1; 0,05 – крива 2; 0,1 – крива 3) ($d = 2\rho_0$)

підходи для нанодоту Au в середовищі Al₂O₃ і SiO₂ для амплітуди модуляції $a/\rho_0 = 0, 1$ наведено на рис. 1, а і б, відповідно (крива 1 – підхід I, крива 2 – підхід II). Для обох підходів результати якісно подібні (це стосується як характеру залежностей для обох діелектриків, так і суттєвого зменшення амплітуди осциляцій зі збільшенням ефективного діаметра нанодоту). Проте, кількісно вони відрізняються як амплітудою $\sim 5-7\%$, так і положенням піків – $\max(\epsilon_F/\epsilon_F^0)_I < \max(\epsilon_F/\epsilon_F^0)_{II}$ і для підходу I максимуми зсунуті лівіше, ніж для підходу II внаслідок різниці у значеннях глибини потенціальної ями.

Результати самоузгоджених розрахунків є більш коректними, оскільки на відміну від підходу I, де робота виходу у діелектрик задається, ця величина розраховується шляхом сумісного розв’язання рівнянь Шредінгера і Пуассона (тобто враховується перерозподіл заряду). У зв’язку з цим, у

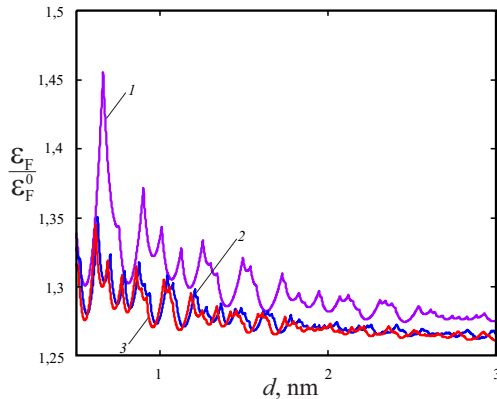


Рис. 3. Розмірні залежності енергії Фермі для нанодротів різних металів у середовищі SiO₂ (б) при $a/\rho_0 = 0,1$: 1 – Au, 2 – Cu, 3 – Al ($d = 2\rho_0$)

подальшому використовуватимемо підхід II. Так, на рис. 2, а і б наведено розмірні залежності $\varepsilon_F/\varepsilon_F^0$ для Cu у різних діелектричних середовищах за різних значень амплітуди модуляції. При цьому зі збільшенням a/ρ_0 значення $\varepsilon_F/\varepsilon_F^0$ зменшуються, і відбувається незначний зсув піків розмірних залежностей праворуч, що пов'язане з варіацією ефективної ширини потенціальної ями.

На рис. 3 зображено аналогічні залежності при фіксованій амплітуді модуляції ($a/\rho_0 = 0,1$) для різних металів. Суттєва відмінність кількісних результатів для Au і близькість результатів для Cu та Al вичерпно пояснюються значеннями r_s для вказаних металів.

4. Висновки

В роботі розглянуто питання про вплив періодичної модуляції поверхні металевих нанодротів на розмірну залежність енергії Фермі, осциляції якої визначають поведінку оптичних характеристик 1D-систем.

За допомогою двох підходів розраховано розмірні осциляції енергії Фермі для вказаних металів за різних значень амплітуди модуляції та у різних діелектричних середовищах.

Встановлено, що для нанодроту Au в середовищах Al₂O₃ і SiO₂ для амплітуди модуляції $a/\rho_0 = 0,1$ обидва підходи дають якісно подібні результати, які кількісно відрізняються амплітудою осциляцій та зсувом піків ліворуч внаслідок різної глибини потенціальної ями.

На прикладі нанодроту Cu продемонстровано, що зі збільшенням амплітуди модуляції значення

відносної енергії Фермі зменшуються. Це пояснюється тим, що збільшення амплітуди модуляції призводить до деформації потенціальної ями та зміни її ефективної ширини, а, отже, і зниження рівня Фермі.

За фіксованої амплітуди модуляції кількісні результати розрахунків для Cu та Al близькі, а для Au істотно відрізняються, внаслідок близькості значень r_s для перших двох металів та їхньої суттєвої відмінності у випадку Au.

Автори висловлюють подяку рецензенту за інтерес до статті та цінні зауваження.

ДОДАТОК А.

Розрахунок компонентів контраваріантного метричного тензора

Обчислимо компоненти контраваріантного метричного тензора, використовуючи формулу (2).

$$\begin{aligned} g^{11} &= \left(\frac{\partial \rho'}{\partial \rho}\right)^2 + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho'}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial \rho'}{\partial z}\right)^2 = \\ &= \frac{\rho_0^2}{(\rho_0 + f(z'))^2} + \frac{\rho_0^2 \rho'^2 f'^2}{(\rho_0 + f(z'))^4} = \\ &= \frac{\rho'^2 f'^2 + \rho_0^2}{(\rho_0 + f(z'))^2}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g^{22} &= \left(\frac{\partial \varphi'}{\partial \rho}\right)^2 + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \varphi'}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi'}{\partial z}\right)^2 = \\ &= \frac{1}{\rho^2} = \frac{\rho_0^2}{\rho'^2 (\rho_0 + f(z'))^2}; \end{aligned}$$

$$g^{33} = \left(\frac{\partial z'}{\partial \rho}\right)^2 + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial z'}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z'}{\partial z}\right)^2 = 1;$$

$$g^{12} = g^{21} = \rho \frac{\partial \rho'}{\partial \rho} \frac{\partial \varphi'}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho'}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi'}{\partial \varphi} + \rho \frac{\partial \rho'}{\partial z} \frac{\partial \varphi'}{\partial z} = 0;$$

$$g^{23} = g^{32} = \rho \frac{\partial \varphi'}{\partial \rho} \frac{\partial z'}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \varphi'}{\partial \varphi} \frac{\partial z'}{\partial \varphi} + \rho \frac{\partial \varphi'}{\partial z} \frac{\partial z'}{\partial z} = 0;$$

$$\begin{aligned} g^{13} &= g^{31} = \rho \frac{\partial \rho'}{\partial \rho} \frac{\partial z'}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho'}{\partial \varphi} \frac{\partial z'}{\partial \varphi} + \rho \frac{\partial \rho'}{\partial z} \frac{\partial z'}{\partial z} = \\ &= -\frac{\rho_0 f'(z) \rho}{(\rho_0 + f(z))^2} = -\frac{\rho' f' z'}{\rho_0 + f(z')}. \end{aligned}$$

З вищенаведеного випливає співвідношення (3).

ДОДАТОК Б.

Оператор збурення

Визначимо оператор збурення

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \times \\ &\times \left(\frac{\rho_0^2}{(\rho_0 + f(z'))^2} - 1 \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\rho_0^2 - (\rho_0 + f(z'))^2}{(\rho_0 + f(z'))^2} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} \right) = \\ & = - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\rho_0^2 - \rho_0^2 - 2\rho_0 f(z') - f^2(z')}{\rho_0^2 + 2\rho_0 f(z') + f^2(z')} \times \\ & \times \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} \right) = \\ & = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{2 \frac{a}{\rho_0} \cos \kappa z' + \frac{a^2}{\rho_0^2} \cos^2 \kappa z'}{1 + 2 \frac{a}{\rho_0} \cos \kappa z' + \frac{a^2}{\rho_0^2} \cos^2 \kappa z'} \times \\ & \times \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} \right) \cong \\ & \cong \frac{\hbar^2}{m_e \rho_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2} \right) \cos \kappa z'. \end{aligned}$$

Звідси маємо формулу (9).

1. П.М. Томчук. Осциляції оптичної провідності і світимості квантових металічних дрітків. *УФЖ* **47** (9), 833 (2002).
2. Al. Moroz. Electron mean-free path in metal-coated nanowires. *J. Opt. Soc. Am. B* **28** (5), 1130 (2011).
3. H.L. Chen, L. Gao. Anomalous electromagnetic scattering from radially anisotropic nanowires. *Phys. Rev. A* **86**(3), 033825 (2012).
4. St.H. Simpson, P. Zemanek, O.M. Marago, Ph.H. Jones, S. Hanna. Optical binding of nanowires. *Nano Lett* **17** (6), 3485 (2017).
5. L. Zhang, Yi Zhou, X. Dai, Zh. Zhao, H. Li. Electronic transport properties of lead nanowires. *Chin. Phys. B* **26** (7), 073102 (2017).
6. Kr. Moors, B. Soree, W. Magnus. Modeling surface roughness scattering in metallic nanowires. *J. Appl. Phys* **118** (12), 124307 (2015).
7. M. Michailov, D. Kashchiev. Monatomic metal nanowires: Rupture kinetics and mean lifetime. *Phys. E* **70**, 21 (2015).
8. P. Cui, J-H. Choi, H. Lan, J-H. Cho, Q. Niu, J. Yang, Zh. Zhang. Quantum stability and magic lengths of metal atom wires. *Phys. Rev. B* **93** (22), 224102 (2016).
9. Zh. He, Zh. Zhou Theoretically analyzed optical property of silver nanowire on a SiO₂ layer. *IEEE Photon. J.* **10** (4), 2856856 (2018).
10. A. Pucci, F. Neubrech, D. Weber, S. Hong, T. Toury, M. Lamy de la Chapelle. Surface enhanced infrared spectroscopy using gold nanoantennas. *Phys. Stat. Sol. B* **247** (8), 2071 (2010).
11. D.A. Zuev, S.V. Makarov, I.S. Mukhin, S.V. Starikov, I.A. Morozov, I.I. Shishkin, A.E. Krasnok, P.A. Belov. Fabrication of Hybrid Nanostructures via Nanoscale Laser-Induced Reshaping for Advanced Light Manipulation. (eprint arXiv:1601.02013).
12. M. Fan, G.F. Andrade, A.G. Brolo. A review on the fabrication of substrates for surface enhanced Raman spectroscopy and their applications in analytical chemistry. *Anal. Chim. Acta* **693**, 7 (2011).
13. J. Dorfmueller, R. Vogelgesang, W. Khunsin, C. Rockstuhl, C. Etrich, K. Kern. Plasmonic nanowire antennas: experiment, simulation, and theory. *Nano Lett.* **10**, 3596 (2010).

14. T.H. Taminiau, F.D. Stefani, F.B. Segerink, N.F. van Hulst. Optical antennas direct single-molecule emission. *Nat. Photon.* **2**, 234 (2008).
15. Е.А. Величко, А.П. Николаенко. Нанопроводники из благородных металлов как рассеиватели плоской электромагнитной волны. *Радиоф. и электрон.* **20** (4), 62 (2015).
16. Y. Namba, J. Yu, J.M. Bennett, K. Yamashita. Modeling and Measurements of Atomic Surface Roughness. *Appl. Opt.* **39** (16), 2705 (2000).
17. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Погосов. Оптична провідність і поглинання тонких металевих плівок в інфрачервоній області спектру. *УФЖ* **53** (5), 569 (2008).
18. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, А.В. Бабич, В.В. Погосов. Энергия Ферми и оптическая проводимость квантовых металлических нитей. *ФТТ* **51** (12), 2371 (2009).
19. А.В. Коротун, В.П. Курбацкий, В.В. Погосов. Диэлектрическая функция металлических 1D-систем. *Ж. нано- та електрон. фіз.* **8** (4(2)), 04070 (2016).
20. J. Motohisa, H. Sakaki. Interface roughness scattering and electron mobility in quantum wires. *Appl. Phys. Lett.* **60** (11), 1315 (1992).
21. H. Fu, M. Sammon, B.I. Shklovskii. Roughness scattering induced insulator-metal-insulator transition in a quantum wire. *Phys. Rev. B* **97** (3), 035304 (2018).
22. В.И. Конченков, С.В. Крючков. Электронные состояния в квантовой проволоке кругового сечения с периодически модулированной поверхностью. *Изв. Волг. ГТУ* **2** (4), 31 (2008).
23. Г. Корн, Т. Корн *Справочник по математике для научных работников и инженеров* (Наука, 1974).
24. А.В. Коротун, А.А. Коваль. О влиянии диэлектрика на осцилляцию энергии Ферми металлической эллиптической нанопроволоки. *ФТТ* **57**, 1813 (2015).
25. Э.Х. Родерик. *Контакты металл-полупроводник* (Радио и связь, 1982).
26. А.В. Коротун, Я.В. Карандась. Енергетичні характеристики металевої наноплівки в діелектричному оточенні. *Ж. нано- та електрон. фіз.* **7** (2), 02018 (2015).

Одержано 00.00.18

A. V. Korotun, Ya. V. Karandas

ENERGY CHARACTERISTICS OF METAL NANOWIRES WITH PERIODICALLY MODULATED SURFACE

S u m m a r y

The energy spectrum of electrons in a metal nanowire with a periodically modulated surface has been found in the framework of perturbation theory. To solve the problem, a transition is made into a coordinate system that "smoothes down" the surface oscillations. The influence of the surface modulation amplitude on size-induced oscillations of the Fermi energy in such systems is analyzed. It is shown that an increase of the modulation amplitude leads to a decrease of the Fermi energy in the wire. Specific calculations were made for Au, Cu, and Al wires.