

УДК 537.5.8:535.5:519.6

## Частотний спектр плазмон-поляритонних хвиль: вплив кулонівських кореляції

Костробій М. В., д.ф.-м.н., проф. каф. ПМ

Маркович Б. М., д.ф.-м.н., проф. каф. ПМ

Польовий В. Є., асп. каф. ПМ

Національний університет «Львівська політехніка»  
(вул. С. Бандери, 12, м. Львів, 79013, Україна)

Запропоновано при моделюванні поширення плазмон-поляритонних хвиль у атомно тонких металевих плівках (АТМФ) врахувати вплив кулонівських кореляцій на хімічний потенціал  $\mu = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ ,  $k_F$  — хвильовий вектор Фермі [1], а, отже, і на кількість рівнів розмірного квантування  $n_{max}$ .

Для моделювання діелектричної функції АТМФ  $\varepsilon_2(0, z, z', \omega)$  використано модель “желе” запропоновану в [2].

Поверхневий потенціал змодельовано прямокутною потенціальною ямою з безмежно високими стінками

$$U(z) = \begin{cases} \infty & \text{if } z \leq 0, z \geq l_{well}, \\ 0 & \text{if } 0 < z < l_{well}; \end{cases} \quad (1)$$

такий потенціал допускає точний розв’язок стаціонарного рівняння Шредінгера [3], а  $z$ -компонента хвильової функції електрона  $\varphi_n(z)$  для потенціалу (1) має відому форму [2, 3]:

$$\varphi_n(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l_{well}}} \sin(\alpha z) & \text{if } 0 < z < l_{well}, \\ 0 & \text{if } z \leq 0, z \geq l_{well}. \end{cases} \quad (2)$$

Квантові числа  $\alpha_n$  та максимальна кількість зв’язаних станів  $n_{max}$  задаються такими співвідношеннями [2, 3]:

$$\alpha_n = \frac{\pi n}{l_{well}}, \quad n_{max} = \left[ \frac{l_{well} k_F}{\pi} \right], \quad (3)$$

де  $[\cdot]$  — оператор взяття цілої частини. Відомо, що ширина потенціальної ями для забезпечення умов електронейтральності у зв’язку з наявністю експоненціального “хвоста” електронної густини не співпадає із межами плівки та залежить від проникнення електронів в діелектрик [2]. Як показано в [2]

$$l_{well} = l + 2d, \quad d = \frac{3\pi}{8k_F} + \frac{\pi^2}{8k_F^2 l_{well}} \quad (4)$$

є функцією залежною від  $k_F$  та геометричної товщини плівки  $l$ . Остаточно [2]

$$l_{well}(k_F) = \frac{l}{2} + \frac{3\pi}{8k_F} + \frac{\sqrt{16k_F^2 l^2 + 24\pi k_F l + 25\pi^2}}{8k_F}. \quad (5)$$

Маючи вираз для хвильової функції електрона  $\varphi_n(z)$  в розглянутій моделі [2] для АТМФ та скориставшись результатами праці [4] змоделюємо  $\varepsilon_2(0, z, z', \omega)$  так

$$\varepsilon_2(0, z, z', \omega) = \varepsilon_2(z, \omega)\delta(z-z') = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\pi n_e \omega^2} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - \alpha_n^2) |\varphi_n(z)|^2\right) \delta(z-z'). \quad (6)$$

тут  $\omega_p = \sqrt{4\pi n_e e^2 / m_e}$  — плазмова частота [1],  $n_e$  — середня густина електронів у АТМФ [1].

Дисперсійне рівняння для розрахунку частотного спектру  $\omega(k_x)$  має такий вигляд [5]:

$$e^{-4k_1 \frac{l_{well}}{2}} = \frac{k_1/\varepsilon_1 + k_2/\varepsilon_2}{k_1/\varepsilon_1 + k_2/\varepsilon_2} \frac{k_3/\varepsilon_1 + k_3/\varepsilon_2}{k_3/\varepsilon_3 + k_2/\varepsilon_2}, \quad (7)$$

$$k_i^2 = k_x^2 - k_0^2 \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

де

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2(\omega, l_{well}) = 1 - \frac{\omega_p^2}{2\pi n_e \omega} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - \alpha_n^2) \overline{|\varphi_n(z)|^2}, \quad (8)$$

$$\overline{|\varphi_n(z)|^2} = \frac{1}{l_{well}} \int_0^{l_{well}} |\varphi_n(z)|^2 dz,$$

а  $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\omega)$ ,  $\varepsilon_3 = \varepsilon_3(\omega)$ .

Моделювання проводилося із параметрами, які відповідають структурам *Vacuum/Ag/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*, *Vacuum/Ag/Si*, *SiO<sub>2</sub>/Ag/Si*.

Отримані результати показують, що навіть доволі “грубе” врахування кулонівських кореляції, а саме, їхній вплив на хімічний потенціал  $\mu$  веде до значних змін у частотному спектрі SPPs у порівнянні і класичним підходом та коректним врахуванням електронейтральності в умовах невзаємодіючої електронної системи. Важливо зауважити, що врахування кулонівських кореляції також веде до значного покращення кореляції із експериментальними даними.

- [1] *Ashcroft N. W., Mermin N. D* Solid State Physics. — Cornell University. Harcourt. — 1976.
- [2] *Kostrobij P. P., Markovych B. M.* Effect of Coulomb interaction on chemical potential of metal film. — Philosophical Magazine. — 2018. — Vol. 98, No. 21. — P. 1991–2002.
- [3] *Vakarchuk I. O.* Квантова механіка. — Львів, ЛНУ ім. І. Франка. — 2007.
- [4] *Kurbatsky V. P.* Dielectric tensor of low-dimensional metal systems. — J. Exp. Theor. Phys. — 2017. — 125 (1). — P. 148–158.
- [5] *Kostrobij P. P., Markovych B. M., Polovyi V. Y.* Influence of the Thickness of a Metal Nanofilm on the Spectrum of Surface Plasmons.. — Math. Model. Comput. — 2019. — Vol. 6, No. 2. — P. 297–303.