

PACS numbers: 73.20.At, 73.21.Nb, 73.22.-f, 73.30.+y, 73.63.Fg, 78.67.Ch, 85.35.Kt

Осциляції енергії Фермі циліндричної металевої наноболонки

А. В. Коротун¹, Я. В. Карандась^{1,2}, А. В. Бабіч³, І. М. Тітов

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

²*Науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України,
вул. Аваліані, 19-А,
69068 Запоріжжя, Україна*

³*Інститут твердого тіла ім. Макса Планка,
Гайзенбергштр., 1,
70569 Штутгарт, Німеччина*

В моделю вільних електронів і циліндричної потенціальної ями скінченної глибини одержано рівняння для визначення енергетичного спектру електронів у циліндричній металевій наноболонці. З використанням знайденого спектру розраховано розмірні залежності енергії Фермі електронів провідності. Проведено порівняння одержаних результатів із граничним випадком суцільного металевого нанодроту. Розрахунки виконано для оболонок Au, Cu та Al у вакуумі та SiO₂.

In the model of free electrons and a cylindrical potential well of finite depth, an equation is obtained for determining the energy spectrum of electrons in a cylindrical metal nanoshell. Using the obtained spectrum, the size dependence of Fermi energy of the conduction electrons is calculated. A comparison of the obtained results with the limiting case of a continuous metal nanowire is made. The calculations are carried out for the Au, Cu and Al shells in a vacuum and SiO₂.

В модели свободных электронов и цилиндрической потенциальной ямы конечной глубины получено уравнение для определения энергетического спектра электронов в цилиндрической металлической наноболочке. С использованием найденного спектра рассчитаны размерные зависимости энергии Ферми электронов проводимости. Проведено сравнение полученных результатов с предельным случаем сплошной металлической нанопроволоки. Расчёты выполнены для оболочек Au, Cu и Al в вакууме и SiO₂.

Ключові слова: металева нанотрубка, енергія Фермі, розмірне квантування, рівняння Шредингера, самоузгоджений підхід.

Key words: metallic nanotube, Fermi energy, size quantization, Schrödinger equation, self-consistent approach.

Ключевые слова: металлическая нанотрубка, энергия Ферми, размерное квантование, уравнение Шредингера, самосогласованный подход.

(Отримано 4 серпня 2018 р.; після доопрацювання — 31 серпня 2018 р.)

1. ВСТУП

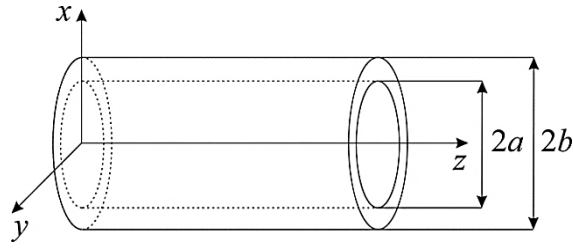
У сучасних нанотехнологіях широко використовують металеві наночастинки та нанодропи. Наступним кроком стало одержання і застосування композитних наноструктур, серед яких окреме місце посідають металеві нанотрубки [1–4]. Поширеним різновидом таких нанотрубок є вуглецеві нанотрубки з металевим покриттям [5–9], а також нанотрубки (нанооболонки) шляхетних металів, що використовуються як складові частини лазерів, біосенсорів та інших пристроїв [10].

Відомо, що металеві нанодропи мають оптичні властивості, які можна регулювати, змінюючи їхні розміри, на чому і ґрунтується переважна більшість технічних застосувань $1D$ -систем. Композитні металеві нанотрубки викликають особливе зацікавлення з точки зору практичного використання, що зумовлено можливістю більш гнучкого регулювання їхніх властивостей шляхом зміни внутрішнього та зовнішнього радіусів, незалежно один від одного.

Однією з основних характеристик електронних властивостей металевих наносистем є енергія Фермі, яка дає основний внесок в оптичне поглинання [11, 12]. Тому метою даної роботи є розрахунок розмірної залежності енергії Фермі для металевих нанотрубок кругового поперечного перерізу для подальшого визначення оптичних характеристик, зокрема компонентів тензора провідності та коефіцієнта поглинання вказаних систем.

2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Розглянемо циліндричну металеву нанотрубку, а саме, вуглецеву нанотрубку з металевою оболонкою. Обмежимося розглядом ультратонкого металевого покриття, оскільки вуглецева нанотрубка не дає істотного внеску в електронні властивості цієї композитної наносистеми [6]. Також вважатимемо, що електрони рухаються в циліндричній потенціальній ямі скінченної глибини U_0 , розмір якої $b - a$, де a і b — внутрішній і зовнішній радіуси металевої оболонки відповідно (рис. 1). Потенціальна енергія у цьому випадку матиме вигляд:


 Рис. 1. Геометрія циліндричної нанотрубки.¹

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & a \leq \rho \leq b; \\ U_0, & \rho < a, \rho > b. \end{cases} \quad (1)$$

Гамільтоніан електронів у циліндричній системі координат —

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\rho). \quad (2)$$

Згідно з методом відокремлення змінних

$$\Psi_{mnp}(\rho, \varphi, z) = R_{mn}(\rho) \Phi_m(\varphi) Z_p(z), \quad (3)$$

де

$$Z_p(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_{zp}z}, \quad (4)$$

k_{zp} — поздовжнє хвильове число. Кутова частина хвильової функції

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (5)$$

має задовольняти умові періодичності $\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi)$, де азимутальне квантове число $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Внаслідок обмеженості радіальної частини хвильової функції при $\rho \rightarrow 0$ і $\rho \rightarrow \infty$:

$$R_{mn}(\rho) = \begin{cases} A_{mn} J_m(i_{mn}\rho), & \rho < a; \\ B_{1mn} J_m(k_{mn}\rho) + B_{2mn} K_m(k_{mn}\rho), & a \leq \rho \leq b; \\ C_{mn} K_m(i_{mn}\rho), & \rho > b; \end{cases} \quad (6)$$

тут $i_{mn} = \sqrt{k_0^2 - k_{mn}^2}$, $\hbar k_0 = \sqrt{2m_e |U_0|}$, $J_m(\xi)$ та $K_m(\xi)$ — Інфельдова та Макдональдова функції, m_e — маса вільного електрона; число $n = 1, 2, 3, \dots$ нумерує корені характеристичного рівняння для за-

даного значення m .

Крайові умови (умови неперервності радіальної хвильової функції та її першої похідної) мають вигляд:

$$\begin{aligned} R_{mn}(\rho)|_{\rho=a+0} &= R_{mn}(\rho)|_{\rho=a-0}; & R_{mn}(\rho)|_{\rho=b+0} &= R_{mn}(\rho)|_{\rho=b-0}; \\ \frac{dR_{mn}(\rho)}{d\rho}|_{\rho=a+0} &= \frac{dR_{mn}(\rho)}{d\rho}|_{\rho=a-0}; & \frac{dR_{mn}(\rho)}{d\rho}|_{\rho=b+0} &= \frac{dR_{mn}(\rho)}{d\rho}|_{\rho=b-0}. \end{aligned} \quad (7)$$

Нескладні перетворення (див. Додаток А) уможливають одержати наступне рівняння:

$$\begin{aligned} & i_{mn}^2 J_{m+1}(i_{mn} a) K_{m+1}(i_{mn} b) (J_m(k_{mn} a) K_m(k_{mn} b) - K_m(k_{mn} a) J_m(k_{mn} b)) + \\ & + k_{mn}^2 J_m(i_{mn} a) K_m(i_{mn} b) (J_{m+1}(k_{mn} a) K_{m+1}(k_{mn} b) - K_{m+1}(k_{mn} a) J_{m+1}(k_{mn} b)) + \\ & + i_{mn} K_{mn} [J_{m+1}(i_{mn} a) K_m(i_{mn} b) (J_{m+1}(k_{mn} b) K_m(k_{mn} a) - K_{m+1}(k_{mn} b) J_m(k_{mn} a)) - \\ & - J_m(i_{mn} a) K_{m+1}(i_{mn} b) (J_{m+1}(k_{mn} a) K_m(k_{mn} b) - K_{m+1}(k_{mn} a) J_m(k_{mn} b))] = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

яке визначає спектр електронів у циліндричній металевій нанотрубці.

Розглянемо деякі граничні випадки.

1) Для випадку тонкої циліндричної оболонки ($(b-a) \rightarrow 0$) розвизанням функцій $J_m(\xi)$ та $K_m(\xi)$ в Тейлорів ряд за степенями $(b-a)$ одержуємо рівняння для визначення спектру у першому порядку наближення:

$$\begin{aligned} & i_{mn} k_{mn} (J_{m+1}(i_{mn} a) K_m(i_{mn} a) - J_m(i_{mn} a) K_{m+1}(i_{mn} a)) = \\ & = (b-a) k_{mn} (i_{mn}^2 - k_{mn}^2) J_m(i_{mn} a) K_m(i_{mn} a). \end{aligned} \quad (9)$$

2) Граничний перехід від нанооболонки до суцільного нанодроту ($a \rightarrow 0$, $b \rightarrow \rho_0$) дає таке дисперсійне рівняння (див. Додаток Б):

$$i_{mn} \frac{K'_m(i_{mn} \rho_0)}{K_m(i_{mn} \rho_0)} = k_{mn} \frac{I'_m(i_{mn} \rho_0)}{I_m(i_{mn} \rho_0)}. \quad (10)$$

За аналогією з випадком суцільного нанодроту [11] розмірна залежність енергії Фермі ($\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m_e)$) визначається розв'язком трансцендентного рівняння:

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 (b^2 - a^2)} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2}, \quad (11)$$

де \bar{n} — концентрація електронів провідності у 3D-металі, а числа k_{mn} визначаються зі співвідношення (8). Тут підсумовування проводиться за всіма значеннями m і n , для яких $k_{mn} < k_F$.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки було проведено для циліндричних нанооболонок Al ($z = 3$), Cu ($z = 2$) та Au ($z = 1$) з концентрацією електронів $n = 3/(4\pi r_s^3)$ і відповідними значеннями $r_s = 2,07a_0, 2,11a_0, 3,01a_0$ (z — валентність металу, a_0 — Борів радіус, r_s — середня віддаль між електронами), що знаходяться у SiO_2 ($\chi = 1,1$ eV, $\epsilon = 4$, де χ — електрона спорідненість, ϵ — діелектрична проникність) [13].

Врахування зонної структури діелектрика потребує перевизначення роботи виходу електронів із нанооболонки, а отже, і значення глибини потенціальної ями [14]. Так, на відміну від випадку нанооболонки у вакуумі, де

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

наявність діелектричного середовища всередині та поза нанооболонки приводить до зменшення роботи виходу, а отже, і глибини ями U_d :

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

де W_d — величина бар'єра Шоттки на межі метал-діелектрик.

Як і в роботі [14], використаємо два підходи для визначення W_d : I) — робота виходу в діелектрик визначається як $W_d = W_0 - \chi$, де W_0 — робота виходу системи «напівнескінченний метал-вакуум»; II) — значення W_d береться з результатів самоузгоджених розрахунків (табл.).

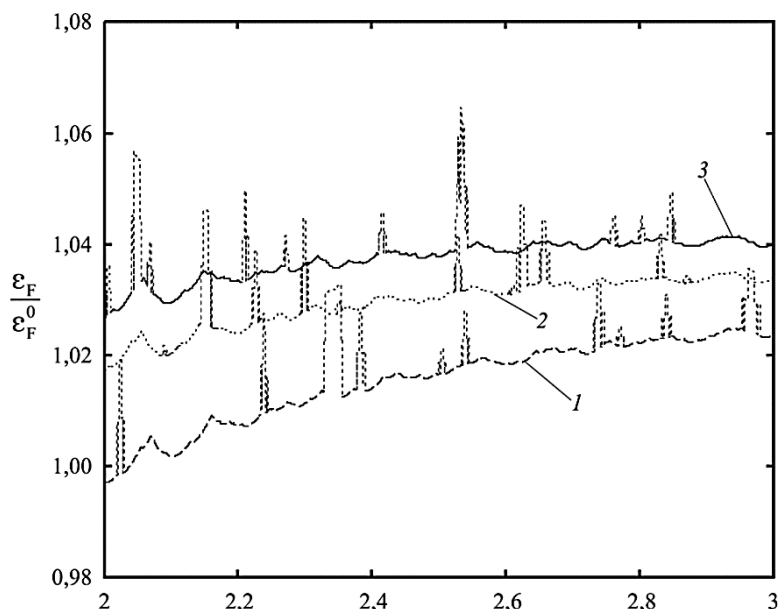
На рисунку 2 продемонстровано розмірні залежності енергії Фермі в одиницях ε_F^0 , розраховані для випадку нанооболонки Au зі значенням внутрішнього радіуса $a = 0,6$ нм із використанням обох підходів. Якісно усі криві є подібними, проте кількісно вони відрізняються своїм розташуванням, положенням піків та їхньою кількістю. Це пояснюється різницею у значеннях глибини потенціальної ями для підходів, що використовуються.

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 Шредингера і Пуассона, тобто враховується перерозподіл заряду. У зв'язку з цим, у подальшому використовуватимемо підхід II.

На рисунку 3 наведено розмірні залежності $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0$ для Au за різних значень внутрішнього радіуса нанооболонки. Криві для всіх шістьох випадків мають осцилювальний характер, і $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0 \rightarrow 1$ зі збільшенням зовнішнього радіуса нанооболонки b . Проте, у випадках $a = 0,4$ і $0,6$ нм $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0 > 1$, і ця величина зменшується

ТАБЛИЦЯ. Результати самоузгоджених розрахунків для напівнескінченних систем метал/SiO₂ [15].²

Система	Au/SiO ₂	Al/SiO ₂	Cu/SiO ₂
W_d , eВ	1,79	1,84	1,89

**Рис. 2.** Розмірні залежності енергії Фермі наноболонок Au із внутрішнім діаметром $a = 0,6$ нм: 1 — у вакуумі; 2 — у SiO₂ (підхід I); 3 — у SiO₂ (підхід II).³

зі збільшенням b , тобто як і у випадку суцільного металевого нанодроту (крива 1). За інших значень внутрішнього радіуса наноболонки, навпаки, $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0 < 1$, і ця величина збільшується зі збільшенням b . Це пояснюється конкуренцією двох чинників: зменшення ширини потенціальної ями та зменшення кількості електронів, а відповідно, й числа заповнених станів і енергії Фермі.

За малих значень внутрішнього радіуса («товста» оболонка) основну роль відіграє зменшення ширини потенціальної ями, що приводить до «виштовхування» енергетичних рівнів і збільшення відносної енергії Фермі (рис. 3, а). Зі збільшенням внутрішнього радіуса («тонка» оболонка) другий чинник стає домінуючим, що зумовлює відповідну поведінку енергії Фермі при $a \rightarrow b$ (рис. 3, б).

На рисунку 4 зображено аналогічні криві для наноболонок Au, Cu і Al з фіксованим внутрішнім радіусом $a = 0,6$ нм. Як і випадку суцільних нанодротів, кількісні результати для наноболонок

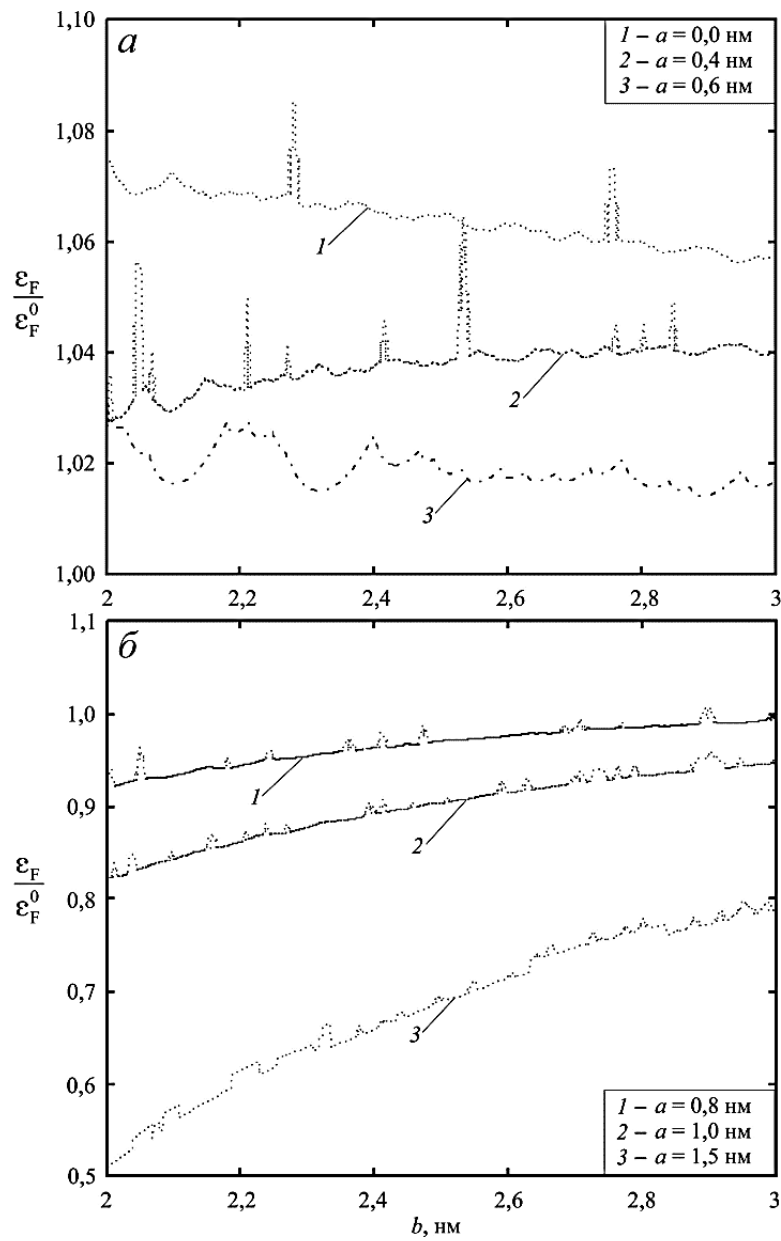


Рис. 3. Розмірні залежності енергії Фермі «товстих» (а) і «тонких» (б) наноболонки Au у SiO_2 за різних значень внутрішнього діаметра.⁴

Cu і Al є близькими, а для наноболонки Au істотно відрізняються, що пояснюється близькістю значень r_s для Cu і Al та істотною відмінністю від них r_s для Au.

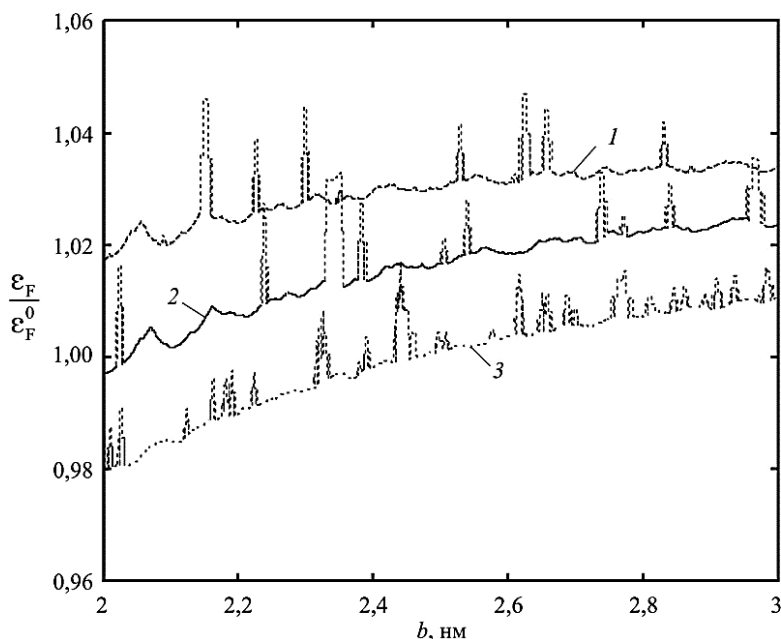


Рис. 4. Розмірні залежності енергії Фермі наноболонки різних металів із фіксованим значенням внутрішнього діаметра: 1 — Au; 2 — Cu; 3 — Al.⁵

4. ВИСНОВКИ

В роботі розраховано розмірні осциляції енергії Фермі металевих наноболонки з різним внутрішнім радіусом із використанням двох підходів.

Встановлено, що для наноболонки Au в SiO₂ у випадку внутрішнього радіуса $a = 0,6$ нм обидва підходи дають якісно подібні результати, які кількісно відрізняються кількістю піків та їхнім зсувом внаслідок різної глибини потенціальної ями.

На прикладі наноболонки Au продемонстровано якісну зміну характеру розмірної залежності енергії Фермі зі збільшенням внутрішнього радіуса наноболонки, що пояснюється зменшенням кількості заповнених станів зі зменшенням ширини потенціальної ями.

Для «товстої» наноболонки (з малим внутрішнім радіусом) характер розмірної залежності енергії Фермі є таким самим, як і у випадку суцільного металевого нанодоту. Але відносні значення енергії Фермі є більшими, що пов'язане з підвищенням енергетичних рівнів зі зменшенням ширини потенціальної ями.

У випадку «тонкої» наноболонки ($a \rightarrow b$) характер розмірної залежності змінюється на протилежний — величина $\varepsilon_F / \varepsilon_F^0 < 1$ і

асимптотично прямує до одиниці при $b \rightarrow \infty$. Це зумовлено зменшенням кількості електронів, а отже, і числа заповнених станів при $(b - a) \rightarrow 0$.

Встановлені закономірності вказують на принципові зміни енергетичного спектру і, відповідно, густини станів при переході від суцільного дроту до металевої оболонки, які мають бути врахованими, зокрема при розрахунку матричних елементів оптичних переходів.

За фіксованого внутрішнього радіуса наноболонки кількісні результати розрахунків розмірних залежностей для Cu і Al є близькими, а для Au істотно відрізняються внаслідок того, що середні віддалі між електронами у Cu і Al є близькими, на відміну від Au, для якого значення r_s є істотно більшим.

ДОДАТОК А. ОДЕРЖАННЯ РІВНЯННЯ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ СПЕКТРУ

Підставляючи у крайові умови (7) вирази для хвильових функцій (6) та їхніх похідних, одержимо однорідну систему чотирьох рівнянь із чотирма невідомими (A_{mn} , B_{1mn} , B_{2mn} , C_{mn}):

$$\begin{cases} A_{mn} J_m(i_{mn} a) = B_{1mn} J_m(k_{mn} a) + B_{2mn} K_m(k_{mn} a), \\ C_{mn} K_m(i_{mn} b) = B_{1mn} J_m(k_{mn} b) + B_{2mn} K_m(k_{mn} b), \\ i_{mn} A_{mn} J'_m(i_{mn} a) = [B_{1mn} J'_m(k_{mn} a) + B_{2mn} K'_m(k_{mn} a)], \\ i_{mn} C_{mn} K'_m(i_{mn} b) = [B_{1mn} J'_m(k_{mn} b) + B_{2mn} K'_m(k_{mn} b)]. \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Поділивши третє рівняння системи (A.1) на перше, а четверте — на друге, одержимо співвідношення:

$$\begin{cases} i_{mn} \frac{J'_m(i_{mn} a)}{J_m(i_{mn} a)} = k_{mn} \frac{B_{1m} J'_m(k_{mn} a) + B_{2m} K'_m(k_{mn} a)}{B_{1m} J_m(k_{mn} a) + B_{2m} K_m(k_{mn} a)}, \\ i_{mn} \frac{J'_m(i_{mn} b)}{J_m(i_{mn} b)} = k_{mn} \frac{B_{1m} J'_m(k_{mn} b) + B_{2m} K'_m(k_{mn} b)}{B_{1m} J_m(k_{mn} b) + B_{2m} K_m(k_{mn} b)} \end{cases}$$

або

$$\begin{cases} i_{mn} J'_m(i_{mn} a) [B_{1mn} J_m(k_{mn} a) + B_{2mn} K_m(k_{mn} a)] = \\ = k_{mn} J_m(i_{mn} a) [B_{1mn} J'_m(k_{mn} a) + B_{2mn} K'_m(k_{mn} a)], \\ i_{mn} K'_m(i_{mn} b) [B_{1mn} J_m(k_{mn} b) + B_{2mn} K_m(k_{mn} b)] = \\ = k_{mn} K_m(i_{mn} b) [B_{1mn} J'_m(k_{mn} b) + B_{2mn} K'_m(k_{mn} b)]. \end{cases}$$

Після нескладних перетворень матимемо однорідну систему двох рівнянь із двома невідомими B_{1mn} і B_{2mn} :

$$\begin{cases} [i_{mn} J'_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} a) - k_{mn} J_m(i_{mn} a) J'_m(k_{mn} a)] B_{1mn} + \\ + [i_{mn} J'_m(i_{mn} a) K_m(k_{mn} a) - k_{mn} J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a)] B_{2mn} = 0, \\ [i_{mn} K'_m(i_{mn} b) J_m(k_{mn} b) - k_{mn} K_m(i_{mn} b) J'_m(k_{mn} b)] B_{1mn} + \\ + [i_{mn} K'_m(i_{mn} b) K_m(k_{mn} b) - k_{mn} K_m(i_{mn} b) K'_m(k_{mn} b)] B_{2mn} = 0, \end{cases}$$

умовою існування нетривіального розв'язку якої є рівність нулю її визначника:

$$\begin{aligned} & [i_{mn} J'_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} a) - k_{mn} J_m(i_{mn} a) J'_m(k_{mn} a)] \times \\ & \times [i_{mn} K'_m(i_{mn} b) K_m(k_{mn} b) - k_{mn} K_m(i_{mn} b) K'_m(k_{mn} b)] - \\ & - [i_{mn} J'_m(i_{mn} a) K_m(k_{mn} a) - k_{mn} J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a)] \times \\ & \times [i_{mn} K'_m(i_{mn} b) J_m(k_{mn} b) - k_{mn} K_m(i_{mn} b) J'_m(k_{mn} b)] = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Розкриваючи дужки у виразі (A.2), одержимо:

$$\begin{aligned} & i_{mn}^2 J'_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} a) K'_m(i_{mn} b) K_m(k_{mn} b) + \\ & + k_{mn}^2 J'_m(k_{mn} a) J_m(i_{mn} a) K'_m(i_{mn} b) K_m(k_{mn} b) - \\ & - k_{mn} i_{mn} \{ J'_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} a) K_m(i_{mn} b) K'_m(k_{mn} b) + \\ & + J_m(i_{mn} a) J'_m(k_{mn} a) K'_m(i_{mn} b) K_m(k_{mn} b) \} - \\ & - i_{mn}^2 J'_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} b) K'_m(i_{mn} b) K_m(k_{mn} a) - \\ & - k_{mn}^2 J'_m(k_{mn} b) J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a) K_m(i_{mn} b) + \\ & + k_{mn} i_{mn} \{ J_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} b) K'_m(k_{mn} a) K'_m(i_{mn} b) + \\ & + J'_m(i_{mn} a) J'_m(k_{mn} b) K_m(k_{mn} a) K_m(k_{mn} b) \} = 0 \end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned} & i_{mn}^2 J'_m(i_{mn} a) K'_m(i_{mn} b) [J_m(k_{mn} a) K_m(k_{mn} b) - J_m(k_{mn} b) K_m(k_{mn} a)] + \\ & k_{mn}^2 J_m(i_{mn} a) K_m(i_{mn} b) [J'_m(k_{mn} a) K'_m(k_{mn} b) - J'_m(k_{mn} b) K'_m(k_{mn} a)] - \\ & - k_{mn} i_{mn} \{ J'_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} a) K_m(i_{mn} b) K'_m(k_{mn} b) + \\ & + J_m(i_{mn} a) J'_m(k_{mn} a) K'_m(i_{mn} b) K_m(k_{mn} b) - \\ & - J_m(i_{mn} a) J_m(k_{mn} b) K'_m(k_{mn} a) K'_m(i_{mn} b) - \\ & - J'_m(i_{mn} a) J'_m(k_{mn} b) K_m(k_{mn} a) K_m(k_{mn} b) \} = 0. \end{aligned}$$

Використовуючи рекурентні співвідношення для похідних Інфельдової та Макдональдової функцій, одержуємо рівняння (8).

ДОДАТОК Б. ГРАНИЧНИЙ ПЕРЕХІД ДО СУЦІЛЬНОГО НАНОДРОТУ

Розглянемо граничний перехід від оболонки до суцільного дроту, що має місце за умови $a \rightarrow 0$, $b \rightarrow \rho_0$:

$$\begin{aligned}
& \lim_{a \rightarrow 0} \left\{ i_{mn}^2 J'_m(i_{mn} a) K'_m(i_{mn} \rho_0) [J_m(k_{mn} a) K_m(k_{mn} \rho_0) - J_m(k_{mn} \rho_0) K_m(k_{mn} a)] + \right. \\
& \quad + k_{mn}^2 J_m(i_{mn} a) K_m(i_{mn} \rho_0) [J'_m(k_{mn} a) K'_m(k_{mn} \rho_0) - J'_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(k_{mn} a)] - \\
& \quad - k_{mn} i_{mn} [J'_m(i_{mn} a) K_m(i_{mn} \rho_0) (J_m(k_{mn} a) K'_m(k_{mn} \rho_0) - J'_m(k_{mn} \rho_0) K_m(k_{mn} a)) + \\
& \quad \left. + J_m(i_{mn} a) K'_m(i_{mn} \rho_0) (J'_m(k_{mn} a) K_m(k_{mn} \rho_0) - J_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(k_{mn} a))] \right\} = \\
& = \lim_{a \rightarrow 0} \left\{ -i_{mn}^2 J'_m(i_{mn} a) K'_m(i_{mn} \rho_0) J_m(k_{mn} \rho_0) K_m(k_{mn} a) - \right. \\
& \quad - k_{mn}^2 J_m(i_{mn} a) K_m(i_{mn} \rho_0) J'_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(k_{mn} a) + \\
& \quad + k_{mn} i_{mn} (J'_m(i_{mn} a) K_m(i_{mn} \rho_0) J'_m(k_{mn} \rho_0) K_m(k_{mn} a) + \\
& \quad \left. + J_m(i_{mn} a) K'_m(i_{mn} \rho_0) J_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(k_{mn} a)) \right\} = \\
& = -i_{mn}^2 J_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(i_{mn} \rho_0) \lim_{a \rightarrow 0} J'_m(i_{mn} a) K_m(k_{mn} a) - \\
& \quad - k_{mn}^2 J'_m(k_{mn} \rho_0) K_m(i_{mn} \rho_0) \lim_{a \rightarrow 0} J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a) + \\
& \quad + k_{mn} i_{mn} J'_m(k_{mn} \rho_0) K_m(i_{mn} \rho_0) \lim_{a \rightarrow 0} J'_m(i_{mn} a) K_m(k_{mn} a) + \\
& \quad + k_{mn} i_{mn} J_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(i_{mn} \rho_0) \lim_{a \rightarrow 0} J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a) = \\
& = k_{mn} (i_{mn} J_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(i_{mn} \rho_0) - k_{mn} J'_m(k_{mn} \rho_0) K_m(i_{mn} \rho_0)) \times \\
& \quad \times \lim_{a \rightarrow 0} J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a) - \\
& \quad - i_{mn} (i_{mn} J_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(i_{mn} \rho_0) - k_{mn} J'_m(k_{mn} \rho_0) K_m(i_{mn} \rho_0)) \times \\
& \quad \times \lim_{a \rightarrow 0} J'_m(i_{mn} a) K_m(k_{mn} a) = \\
& = (i_{mn} J_m(k_{mn} \rho_0) K'_m(i_{mn} \rho_0) - k_{mn} J'_m(k_{mn} \rho_0) K_m(i_{mn} \rho_0)) \times \\
& \quad \times \left(k_{mn} \lim_{a \rightarrow 0} J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a) - i_{mn} \lim_{a \rightarrow 0} J'_m(i_{mn} a) K_m(k_{mn} a) \right) = 0.
\end{aligned}$$

Таким чином, перехід від циліндричної оболонки до дроту приводить до виразу (10) (що збігається з результатом з роботи [16]), оскільки

$$\begin{aligned}
& k_{mn} \lim_{a \rightarrow 0} J_m(i_{mn} a) K'_m(k_{mn} a) - i_{mn} \lim_{a \rightarrow 0} J'_m(i_{mn} a) K_m(k_{mn} a) = \\
& = k_{mn} f_1(k_{mn}, i_{mn}, 0) - i_{mn} f_2(k_{mn}, i_{mn}, 0) = \text{const} \neq 0.
\end{aligned}$$

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. Y. Zhang and H. Dai, *Appl. Phys. Lett.*, **77**, No. 19: 3015 (2000); <https://doi.org/10.1063/1.1324731>
2. R. T. Senger, S. Dağ, and S. Çiraci, *Turk. J. Phys.*, **29**, No. 5: 269 (2005).
3. S. Arai, Y. Suzuki, J. Nakagawa, T. Yamamoto, and M. Endo, *Surf. & Coat. Technol.*, **212**: 207 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2012.09.051>
4. Sh. Zhao and J. Zhu, *Appl. Phys. A*, **123**, No. 12: 785 (2017); <https://doi.org/10.1007/s00339-017-1413-4>
5. Y. Zhang, N. W. Franklin, R. J. Chen, and H. Dai, *Chem. Phys. Lett.*, **331**, No. 1: 35 (2000); [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(00\)01162-3](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(00)01162-3)
6. P. M. Tomchuk and V. V. Kulish, *Ukr. J. Phys.*, **49**, No. 6: 598 (2004).
7. S. Dağ, E. Durgun, and S. Çiraci, *Turk. J. Phys.*, **29**, No. 5: 295 (2005).
8. J. Zhu, *Materials Science and Engineering A*, **454–455**: 685 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.12.076>
9. X. Zhou, H. Li, Zh. Liu, Zh. He, H. Xu, and X. Peng, *J. Mod. Opt.*, **59**, No. 6: 565 (2012); <https://doi.org/10.1080/09500340.2011.644339>
10. E. A. Velichko and A. P. Nickolaenko, *Radiofiz. Electron.*, **6(20)**, No. 4: 62 (2015) (in Russian); E. A. Величко, А. П. Николаенко, *Радиофиз. и электрон.*, **6(20)**, № 4: 62 (2015); <https://doi.org/10.15407/rej2015.04.062>
11. V. P. Kurbatsky, A. V. Korotun, A. V. Babich, and V. V. Pogosov, *Physics of the Solid State*, **51**, No. 12: 2371 (2009) (in Russian); В. П. Курбацкий, А. В. Коротун, А. В. Бабич, В. В. Погосов, *Физика твердого тела*, **51**, № 12: 2371 (2009).
12. A. V. Korotun, V. P. Kurbatsky, and V. V. Pogosov, *J. Nano- Electron. Phys.*, **8**, No. 4(2): 04070 (5pp) (2016) (in Russian); А. В. Коротун, В. П. Курбацкий, В. В. Погосов, *Ж. нано- та електрон. физ.*, **8**, № 4(2): 04070 (5cc) (2016); [https://doi.org/10.21272/jnep.8\(4\(2\)\).04070](https://doi.org/10.21272/jnep.8(4(2)).04070)
13. E. H. Rhoderick, *Kontakty Metall–Poluprovodnik* [Metal–Semiconductor Contacts] (Moscow: Radio i Svyaz': 1982) (Russian translation).
14. A. V. Korotun and Ya. V. Karandas, *J. Nano- Electron. Phys.*, **7**, No. 2: 02018 (2015) (in Russian); А. В. Коротун, Я. В. Карандась, *Ж. нано- та електрон. физ.*, **7**, № 2: 02018 (2015).
15. V. V. Pogosov and A. V. Babich, *Tech. Phys.*, **53**, No. 8: 1074 (2008) (in Russian); В. В. Погосов, А. В. Бабич, *ЖТФ*, **78**, № 7: 116 (2008).
16. A. V. Korotun and A. A. Koval', *Physics of the Solid State*, **57**, No. 9: 1813 (2015) (in Russian); А. В. Коротун, А. А. Коваль, *Физика твердого тела*, **57**, № 9: 1813 (2015).

¹Zaporizhia National Technical University,
Zhukovsky Str. 64,
69063 Zaporizhia, Ukraine

²Zaporizhia Scientific Research Forensic Centre of the Ministry of Internal Affairs of Ukraine,
Avalani Str., 19-A,
69068 Zaporizhia, Ukraine

³Max Planck Institute for Solid State Research,
Heisenbergstr., 1,
70569 Stuttgart, Germany

¹ Fig. 1. Geometry of a cylindrical nanotube.

² Table. Results of self-consistent calculations for semi-infinite metal/SiO₂ systems [15].

³ Fig. 2. Size dependences of Fermi energy of the Au nanoshells with the inner diameter

$a = 0.6$ nm: 1—in vacuum; 2—in SiO₂ (approach I); 3—in SiO₂ (approach II).

⁴ Fig. 3. Size dependences of Fermi energy of the ‘thick’ (a) and ‘thin’ (b) Au nanoshells in SiO₂ at different values of the inner diameter.

⁵ Fig. 4. Size dependences of Fermi energy of the various metal nanoshells with fixed value of the inner diameter: 1—Au; 2—Cu; 3—Al.