

05;11

Межфазная энергия и работа выхода на границах раздела „тонкие пленки сплавов щелочных металлов–диэлектрик“

© В.А. Созаев, Р.А. Чернышова

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

Поступило в Редакцию 8 августа 2002 г.

Методом функционала электронной плотности проведены расчеты межфазной энергии σ и работы выхода электрона ϕ тонких пленок щелочных металлов и бинарных сплавов на границе с диэлектрической средой. Показано, что σ и ϕ понижаются с увеличением диэлектрической проницаемости ϵ . Зависимости $\sigma(\epsilon)$ и $\phi(\epsilon)$ можно аппроксимировать полиномами второй степени. Установлено, что независимо от диэлектрической проницаемости среды между σ и ϕ металлов и сплавов существует прямо пропорциональная зависимость.

В литературе пока недостаточно данных о влиянии диэлектрической среды на поверхностные свойства тонких пленок металлических сплавов, хотя проводились теоретические исследования по полубесконечным металлам [1–6] и сплавам [7–9]. Вместе с тем подобные данные необходимы при разработке наносистем с матричной изоляцией нанобъектов, элементной базы микро- и нанoeлектроники, капиллярных аккумуляторов энергии и т.д.

В работе [10] показано, что диэлектрическая среда, граничащая с нанобъектом, в отсутствие межфазного заряда на границе раздела приводит к снижению межфазной энергии и работы выхода электрона (РВЭ) ϕ пленок металлических сплавов. Однако полученные в [10] соотношения не позволяют в явном виде установить зависимости межфазной энергии σ и РВЭ ϕ от диэлектрической проницаемости ϵ среды.

В настоящей работе, в приближении однородного фона проводятся оценки межфазной энергии и РВЭ тонких пленок сплавов щелочных металлов в зависимости от диэлектрической проницаемости среды ϵ , граничащей с пленкой.

Модель пленки сплава замещения A_xB_{1-x} рассматривалась в „желе“ приближении [11]. Вследствие эффекта поверхностной сегрегации в пленке сплава толщиной L образуется сегрегационный слой толщиной D , плотность положительного заряда n_s в котором отличается от плотности n_0 положительного заряда в центре пленки. Пленка сплава граничит с бесконечной диэлектрической средой, которая рассматривается в приближении модели сплошной среды с диэлектрической проницаемостью ϵ .

Межфазная энергия оценивалась в приближении однородного фона по формуле

$$\sigma_j = 2 \int_0^{\infty} \{\omega[n_-(z)] - \omega[n_+(z)]\} dz + \int_0^{\infty} \varphi(z) [n_-(z) - n_+(z)] dz, \quad (1)$$

$\omega[n(z)]$ — плотность энергии неоднородного электронного газа, включающей в себя плотность кинетической энергии невзаимодействующего электронного газа с поправками на неоднородность поля, и плотность энергии обменно-корреляционного взаимодействия с поправками на нелокальность.

Распределение электронной плотности $n_-(z)$ на межфазной границе пленка–диэлектрическое покрытие задавалось в виде пробной функции

$$n_-(z) = n_0 \begin{cases} 1 - \exp(-\beta Z_G) \operatorname{ch}(\beta z), & z < Z_G, \\ \operatorname{sh}(\beta Z_G) \exp(-\beta z), & z > Z_G, \end{cases} \quad (2)$$

где Z_G — гиббсова координата раздела, находится из условия сохранения заряда. β — вариационный параметр, минимизирующий межфазную энергию σ_j , z — координата, отсчитываемая вдоль оси, направленной перпендикулярно пленке; начало координат выбирается в центре пленки. Распределение электростатического потенциала $\varphi(z)$ на межфазной границе находилось из уравнения Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi [n_-(z) - n_+(z)] \quad (3)$$

с учетом граничных условий и условий непрерывности $\varphi(z)$ и $\varphi'(z)$. Соотношения для $\varphi(z)$ приводятся в работе [11].

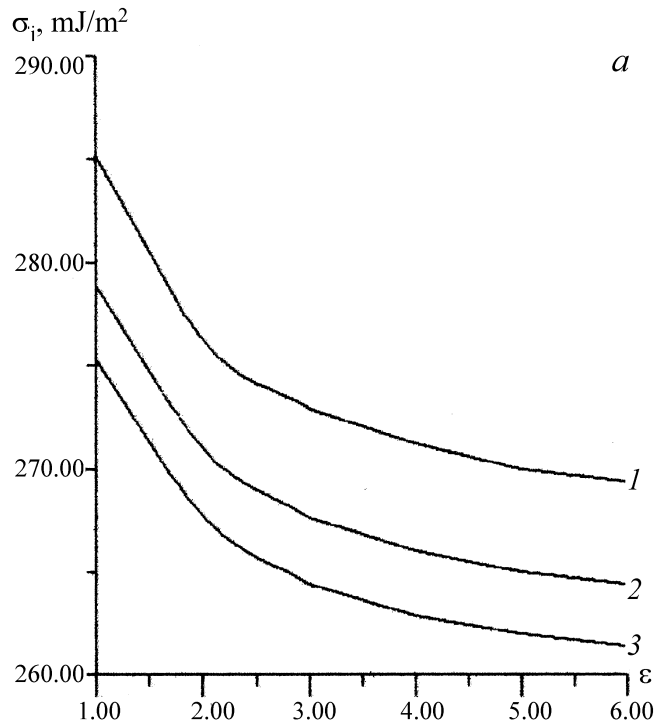


Рис. 1. Зависимость межфазной энергии σ_j (а) и РВЭ ϕ_j (б) пленки сплава $\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}$ от диэлектрической проницаемости ϵ среды: 1 — толщина пленки $L = 10 a_0$, 2 — $L = 15 a_0$, 3 — $L = 20 a_0$ (a_0 — борковский радиус).

Оценка РВЭ из пленки в диэлектрическую среду (энергетический барьер) проводилась по формуле, полученной с использованием правила сумм [4]

$$\Phi_j = \varphi(L/2 - D) - n_s/(n_0)[\varphi(L/2) - \varphi(L/2 - D)] + (\epsilon - 1)(4\pi q_s)^2 / (8\pi\epsilon n_0) - E(n_0), \quad (4)$$

где q_s — плотность электрического заряда на межфазной границе. В настоящей работе прималось: $q_s = 0$, D — толщина сегрегационного

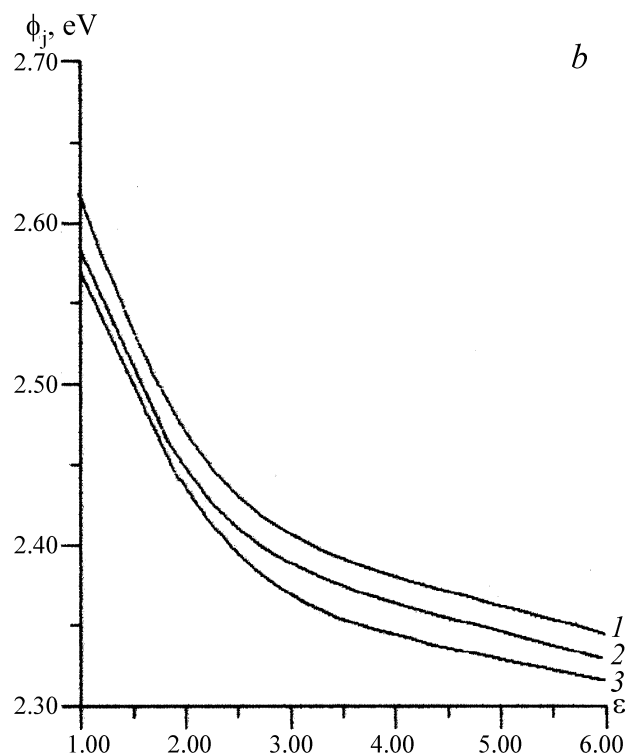


Рис. 1 (продолжение).

слоя в пленке, n_0 — плотность положительного заряда в центре пленки, n_g — плотность положительного заряда в поверхностном слое пленки, $E(n_0)$ в формуле (4) — плотность кинетической, обменной и корреляционной энергии, $\varphi(L/2)$ и $\varphi(L/2 - D)$ — значения электростатического потенциала $\varphi(z)$ на межфазной границе пленки сплава-диэлектрической среды при $z = L/2$ и $z = L/2 - D$

$$\varphi(L/2 - D) = 4\pi n_0 / (\beta^2) \exp(-\beta Z_G) \operatorname{ch}(\beta(L/2 - D)) + C_1,$$

$$\varphi(L/2) = 4\pi n_0/(\beta^2) \exp(-\beta Z_G) \operatorname{ch}(\beta L/2) - \pi(n_0 - n_s)L^2/2$$

$$+ 2\pi(n_0 - n_s)(L/2 - D)L + C_2,$$

$$C_1 = C_2 - 2\pi(n_0 - n_s)(L/2 - D)^2,$$

$$C_2 = -4\pi n_0/(\beta^2) \exp(-\beta Z_G) \operatorname{ch}(\beta L/2)(1 - 1/\varepsilon) - 2\pi(n_s - n_0)(L/2)^2$$

$$- 2\pi(n_s - n_0)(L/2 - D)L - \pi n_0 L^2/\varepsilon + 2\pi n_0 Z_G L/\varepsilon + C_3,$$

$$C_3 = -4\pi n_0/(\varepsilon\beta^2) - 2\pi n_0 Z_G^2/\varepsilon.$$

Результаты вычислений проведены на рис. 1 (а, b).

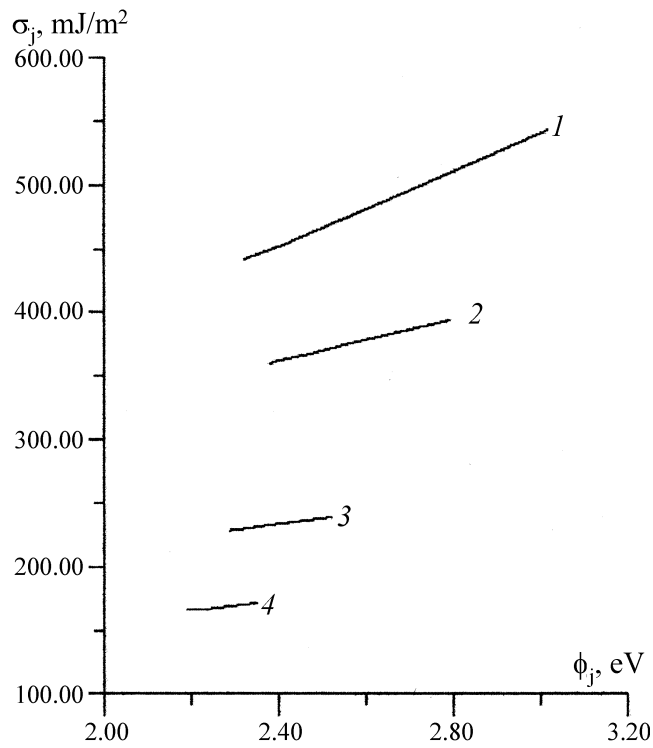


Рис. 2. Зависимость межфазной энергии σ_j от РВЭ ϕ_j тонких пленок (толщина пленки $L = 15 a_0$) щелочных металлов: 1 — Li, 2 — Na, 3 — K, 4 — Cs.

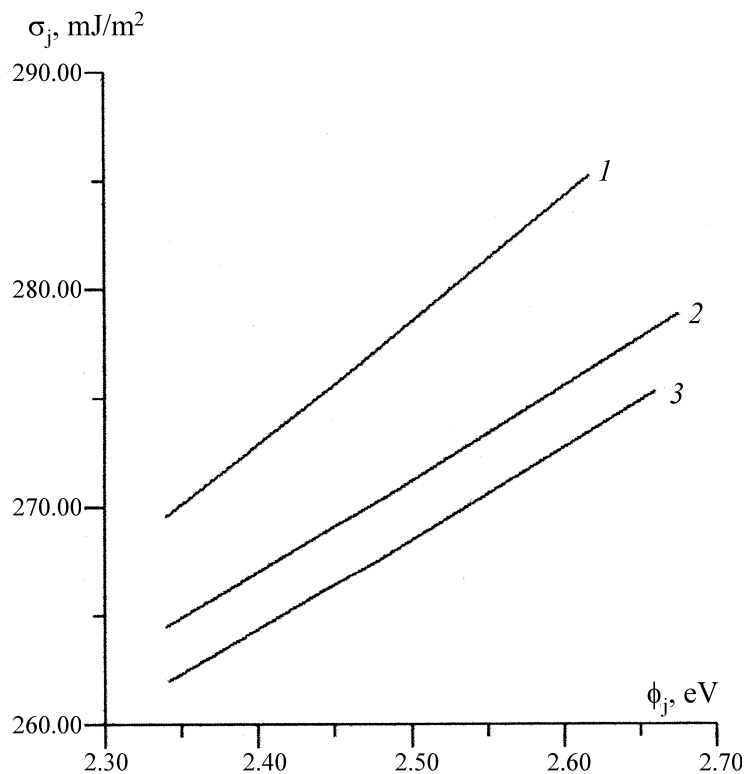


Рис. 3. Зависимость межфазной энергии σ_j от РВЭ ϕ_j тонких пленок сплава $\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}$ толщиной: 1 — $L = 10 a_0$, 2 — $L = 15 a_0$, 3 — $L = 20 a_0$.

На рис. 1 приводятся зависимости σ и ϕ от ϵ для пленок сплава эквивалентного состава $\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}$. Значения диэлектрической проницаемости ϵ менялись от 1 до 6. Из рис. 1 видно, что с увеличением диэлектрической проницаемости σ и ϕ плавно снижаются. Обработка зависимостей $\sigma(\epsilon)$ и $\phi(\epsilon)$ методом наименьших квадратов приводит к зависимостям

$$\sigma(\epsilon) = A + B\epsilon + C\epsilon^2, \quad (5)$$

$$\phi(\epsilon) = A^* + B^*\epsilon + C^*\epsilon^2. \quad (6)$$

Данные по σ_j и ϕ_j использовались для построения зависимостей σ_j от ϕ_j (рис. 2) как чистых щелочных металлов, так и их сплавов (рис. 3).

Коэффициенты A и B в зависимости $\sigma_j = A + B\phi_j$

№	Металл, сплав	Толщина пленки a_0	A	B	k
1	Li	15	98.67	147.98	0.9980
2	Na	15	161.16	83.77	0.9996
3	K	15	125.56	45.03	0.9984
4	Cs	15	90.73	34.34	0.9983
5	Na _{0.5} K _{0.5}	10	134.88	57.47	0.9930
6	Na _{0.5} K _{0.5}	15	133.22	56.37	0.9989
7	Na _{0.5} K _{0.5}	20	134.00	54.94	0.9988

Из рис. 2 и 3 видно, что между σ_j и ϕ_j пленок щелочных металлов и их сплавов наблюдается линейная зависимость. Подобные зависимости для чистых массивных металлов установлены в ряде работ [12], для тонких же пленок, насколько нам известно, зависимости σ_j от ϕ_j приводятся впервые.

Из рис. 2 и таблицы видно, что при переходе от лития к цезию (т.е. с возрастанием атомного радиуса) наклон зависимостей $\sigma_j(\phi_j)$ уменьшается, что согласуется с ранее установленными зависимостями для чистых металлов [12].

Таким образом, оценки σ_j и ϕ_j , показывают, что при переходе к нанометровым размерам толщин металлических пленок линейные зависимости между σ_j и ϕ_j сохраняются независимо от граничащей с пленкой диэлектрической среды.

Список литературы

- [1] Задумкин С.Н., Карашаев А.А. // Физико-химическая механика материалов. 1965. № 2. С. 139–141.
- [2] Ухов В.Ф., Кобелева Р.М., Дедков Г.В., Темроков А.И. Электронно-статистическая теория металлов и ионных кристаллов. М.: Наука, 1982. 160 с.
- [3] Партенский М.Б., Куземе В.Е. // ФГТ. 1979. Т. 21. № 9. С. 2842–2844.
- [4] Партенский М.Б. // Поверхность. 1982. № 10. С. 25–32.
- [5] Дигилов Р.М., Созаев В.А., Хоконов Х.Б. // Поверхность. 1987. № 12. С. 138–139.
- [6] Вакилов А.Н., Прудников В.В. // ФММ. 1991. № 8. С. 11–20.

- [7] Дигилов Р.М., Созаев В.А. // Поверхность. 1992. № 4. С. 22–25.
- [8] Машаров С.И., Машарова В.А., Рыбалко А.Ф., Сафаров Д.А. // Поверхность. 1992. В. 5. С. 21–23.
- [9] Алчагиров А.Б., Созаев В.А., Хоконов Х.Б. // ЖТФ. 1997. Т. 67. В. 1. С. 133–135.
- [10] Кашежеев А.З., Мамбетов А.Х., Созаев В.А., Яганов Д.В. // Поверхность. 2001. № 12. С. 53–59.
- [11] Созаев В.А., Чернов В.В., Чернышова Р.А., Яганов Д.В. // Вестник КБГУ. Физические науки. Нальчик: КБГУ, 2000. В. 4. С. 20–23.
- [12] Фоменко В.С. Эмиссионные свойства материалов: Справочник. Киев: Наук. думка, 1981. 339 с.