

05;11

## Влияние электрического поля на поверхностную энергию и работу выхода электрона тонких пленок сплавов щелочных металлов

© В.З. Канчуков, А.З. Кашежев, А.Х. Мамбетов, В.А. Созаев

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик  
E-mail: sozaevv@kbsu.ru

Поступило в Редакцию 9 января 2002 г.

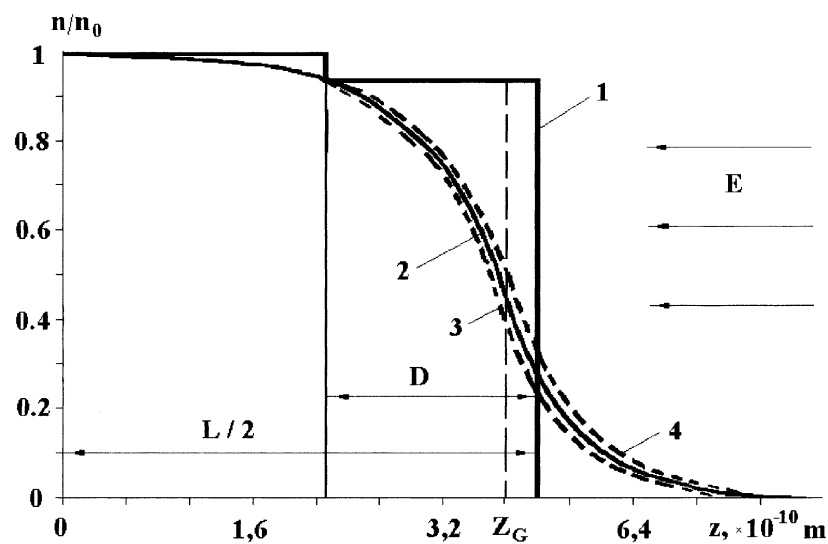
Рассчитаны поверхностная энергия и работа выхода электронов пленок сплавов щелочных металлов в модели электронного газа с использованием функции распределения электронов на межфазной границе.

Исследования поверхностных свойств тонких пленок металлических сплавов [1–6] показывают наличие размерных эффектов поверхностного состава, поверхностной энергии и работы выхода электрона пленок.

Представляет интерес оценить влияние внешнего электрического поля на размерные эффекты поверхностных свойств пленок металлических сплавов. Насколько нам известно, подобные данные в литературе отсутствуют.

Пленки бинарного сплава замещения  $A_xB_{1-x}$  толщиной  $L$  рассматривается в модели виртуального кристалла [7]. Вследствие эффекта поверхностной сегрегации на границе пленка–вакуум формируется сегрегационный слой толщиной  $D$  с плотностью положительного заряда  $n_s = [x_s\Omega_A + (1 - x_s)\Omega_B]^{-1}$  (рис. 1), где  $x_s$  — поверхностная концентрация компонента А,  $\Omega_A$ ,  $\Omega_B$  — объемы ячеек Вигнера–Зейца компонент А и В. Плотность положительного заряда внутри пленки  $n_0$ . Распределение электронной плотности на межфазной границе зададим пробной функцией:

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



**Рис. 1.** Распределение ионного (1) и электронного (2–4) зарядов на границе раздела пленка сплава  $\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}$  — вакуум в электрическом поле. Толщина пленки  $L = 7.935 \cdot 10^{-10}$  м (2 —  $E = 0$ ; 3 —  $E = 2.6 \cdot 10^7$ ; 4 —  $E = -2.6 \cdot 10^7$  В/см).

где  $\beta$  — вариационный параметр, который находится из условия минимума поверхностной энергии  $\sigma = \min_{\beta, n_s} \sigma(\beta, n_s)$ ;  $z$  — координата вдоль оси, направленной перпендикулярно пленке, отсчитываемая от середины пленки;  $Z_G$  — координата гиббсовой границы раздела, которая находится из условия электронейтральности системы:

$$\int_0^{\infty} [n_-(z) + n_+(z)] dz = E/4\pi n_0 \quad (2)$$

и равна

$$Z_G = L/2 - (1 - n_s/n_0)D \pm E/4\pi n_0. \quad (3)$$

Распределение электростатического потенциала  $\varphi(z)$  находится из уравнения Пуассона, которое при  $Z_G < L/2$  можно записать в виде:

$$d^2\varphi/dz^2 = \begin{cases} -4\pi[n(z) - n_0], & 0 < z < L/2 - D, \\ -4\pi[n(z) - n_s], & L/2 - D < z < Z_G, \\ -4\pi[n(z) - n_s], & Z_G < z < L/2, \\ -4\pi n(z), & z > L/2, \end{cases} \quad (4)$$

а при  $Z_G > L/2$

$$d^2\varphi/dz^2 = \begin{cases} -4\pi[n(z) - n_0], & 0 < z < L/2 - D, \\ -4\pi[n(z) - n_s], & L/2 - D < z < L/2, \\ -4\pi n(z), & L/2 < z < Z_G, \\ -4\pi n(z), & z > Z_G. \end{cases} \quad (5)$$

Уравнения Пуассона (3), (4) решаются с учетом граничных условий  $\varphi$  и  $\varphi'$  на границе пленка-вакуум.

Поверхностная энергия (ПЭ) пленки в приближении однородного фона оценивается по формуле:

$$\sigma_j = 2 \int_0^\infty \{w[n_-(z)] - w[n_+(z)]\} dz + \int_0^\infty \varphi(z)[n_-(z) - n_+(z)] dz, \quad (6)$$

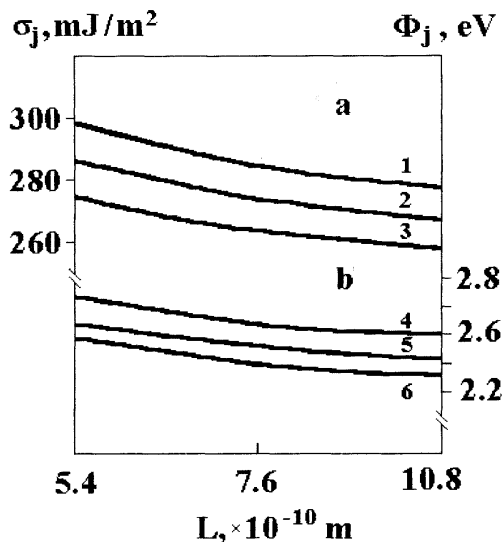
где  $w[n(z)]$  — плотность кинетической энергии невзаимодействующего электронного газа с поправкой на неоднородность поля, энергии обменно-корреляционного взаимодействия с поправками на нелокальность.

Работа выхода электрона (РВЭ) рассчитывается по формуле, полученной с использованием правила сумм:

$$\Phi_j = -\varphi(L/2 - D) - (n_s/n_0)[\varphi(L/2) - \varphi(L/2 - D)] + E/(8\pi n_0) - \epsilon(n_0), \quad (7)$$

где  $\epsilon(n_0)$  — плотность кинетической, обменной и корреляционной энергий;  $\varphi(L/2 - D)$ ,  $\varphi(L/2)$  — значения электростатического потенциала  $\varphi(z)$  на плоскостях  $z = L/2 - D$  и  $z = L/2$ .

Результаты вычислений по формулам (6) и (7) представлены на рис. 2. Из рис. 2, а видно, что ПЭ пленок снижается с увеличением



**Рис. 2.** Зависимость поверхностной энергии  $\sigma_j$  (а), вычисленной по формуле (6) (1 —  $E = -2.6 \cdot 10^7$ ; 2 — в отсутствие поля; 3 —  $E = 2.6 \cdot 10^7$  V/cm), и работы выхода электрона  $\Phi_j$  (б), вычисленной по формуле (7) (4 —  $E = 2.6 \cdot 10^7$ ; 5 — в отсутствие поля; 6 —  $E = -2.6 \cdot 10^7$  V/cm), от толщины пленки  $L$ .

толщины пленок как в отсутствие, так и при наличии внешнего электрического поля. Поля, направленные к пленке ( $E > 0$ ), снижают ПЭ, так как доля электронного распределения вне пленки увеличивается, и наоборот, при  $E < 0$  ПЭ пленки увеличивается.

Значения РВЭ пленки сплава  $\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}$  приводятся на рис. 2, б. Из рис. 2, б видно, что размерная зависимость РВЭ при наличии поля такая же, что и в отсутствие поля. РВЭ при  $E > 0$  увеличивается, а при  $E < 0$  уменьшается, что объясняется действием двух факторов. С одной стороны, при  $E > 0$  поле способствует понижению РВЭ, но с другой стороны, под действием поля уменьшается поверхностная сегрегация калия, компоненты с более низким значением РВЭ. Именно вследствие этого РВЭ в целом при  $E > 0$  повышается. При  $E < 0$  картина противоположная [7].

## Список литературы

- [1] *Moran-Lopez J.L., Kerker G., Benneman K.H.* // Surf. Sci. 1977. V. 66. N 2. P. 641–646.
- [2] *Llois A.M., Mirasso C.R.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 12. P. 8112–8117.
- [3] *Bogdanov H., Wojciechowski K.F.* // J. Phys. D.: Appl. Phys. 1996. V. 29. P. 1310–1315.
- [4] *Созаев В.А., Чернов В.В., Чернышова Р.А., Яганов Д.В.* // Вестник КБГУ. Сер. Физические науки. Вып. 4. Нальчик: КБГУ, 2000. С. 20–24.
- [5] *Swaminarayan S., Srolowitz D.* // Acta Metall. Mater. 1996. V. 44. P. 2067–2072.
- [6] *Дигилов Р.М., Созаев В.А.* // Поверхность. 1990. В. 10. С. 138–140.
- [7] *Канчукоев В.З., Кашежеев А.З., Мамбетов А.Х., Созаев В.А.* // Письма в ЖТФ. Т. 27. В. 20. С. 89–91.