

PACS numbers: 68.03.Cd, 71.60.+z, 73.22.Dj, 73.40.Ns, 73.40.Vz, 78.70.Bj

Робота виходу електронів і позитронів, бар'єр Шотткі метал-діелектричних сандвічей. Метод Рітца

В. В. Погосов, В. І. Рева

*Національний університет «Запорізька політехніка»,
вул. Жуковського, 64,
69063 Запоріжжя, Україна*

В рамках методу Рітца, квантово-статистичного функціоналу і моделі стабільного желе розглянуто задачу знаходження питомої поверхневої енергії, роботи виходу електронів та позитронів, бар'єру Шотткі для металу з діелектричним покриттям. Величини, розраховані методом Рітца, задовільно узгоджуються як з експериментальними даними, так і з розрахунками методом Кона–Шема. Розглянуто найпростіші неоднорідні покриття. Встановлено зв'язок теорії методу Рітца для неоднорідних покриттів з теорією метода Кона–Шема поверхневих характеристик метал-діелектричних наносандвічів. Запропоновано вплив неоднорідності покриття на характеристики металевої поверхні оцінювати масштабуванням випадку однорідного покриття. Ефект залежності енергетичних характеристик контактів зведено лише до середнього зваженого значення діелектричних проникностей діелектричних обкладинок асиметричних метал-діелектричних сандвічей. Обговорено можливість використання одержаних результатів у різних експериментальних ситуаціях.

Ключові слова: поверхневі явища, робота виходу електрона та позитрона, бар'єр Шотткі, метал-діелектричні сандвічі, модель стабільного желе.

Within the framework of the Ritz method, the quantum-statistical functional, and the stabilized jellium model, the problem of calculating the surface

Corresponding author: Valentin Val'terovych Pogosov
E-mail: vpogosov@zntu.edu.ua

*Zaporizhzhia Polytechnic National University,
64 Zhukovsky Str., UA-69063 Zaporizhzhya, Ukraine*

Citation: V. V. Pogosov and V. I. Reva, Electron and Positron Work Function, the Schottky Barrier Height of Metal–Dielectric Sandwiches. The Ritz Method, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 3: 297–310 (2022) (in Ukrainian).
DOI: [10.15407/mfint.44.03.0297](https://doi.org/10.15407/mfint.44.03.0297)

energy per unit area, the electron and positron work function, and the Schottky barrier height for a metal with a dielectric coating is considered. The calculated values are in satisfactory agreement with both experimental data and the results of the Kohn–Sham calculations. The simplest inhomogeneous dielectric coatings are considered. The connection between the Ritz theory for inhomogeneous coatings and the Kohn–Sham theory for the surface characteristics of metal–dielectric nanosandwiches is established. Invited to take into account the effect of inhomogeneous coating on the metal surface characteristics by scaling a uniform coverage case. The effect of dielectric confinement for the energy characteristics of the asymmetric metal–dielectric sandwiches is reduced to the weighted average value of the dielectric constants. The possibility of application the obtained results in various experimental situations is discussed.

Key words: surface phenomena, electron and positron work function, Schottky barrier, metal–insulator sandwiches, stable jellium models.

(Отримано 14 листопада 2021 р.)

1. ВСТУП

Дослідження електронних властивостей металевої поверхні зі складним покриттям становлять інтерес для сучасних технологій з метою створення, наприклад, матеріалів, що володіють значним сенсорним відгуком і селективністю. Про складність одержання об'єктів і методів вимірювання говорить порівняно незначна кількість експериментів, присвячених, зазвичай, квантово-розмірним ефектам. Однією з фундаментальних характеристик металевих наноструктур є робота виходу електронів.

Найбільш дослідженим у цьому напрямку є бар'єр Шотткі — робота виходу електронів у діелектрик або напівпровідник [1–3].

Висоту бар'єру Шотткі Φ_e контакту метал–ізолятор оцінюють на основі правила Шотткі–Мотта [1, 3] за характеристиками ізольованих один від одного металу й ізолятора:

$$\Phi_e \approx W_e - \chi_e, \quad (1)$$

де W_e і χ_e — робота виходу електронів з металу у вакуум і глибина залягання зони провідності електронів в ізоляторі до контакту відповідно. За малих зазорів металу й ізолятора «хвіст» просторового розподілу електронів металу знаходиться під впливом поляризації ізолятора.

У разі інжекції позитронів у метали, для яких робота виходу позитронів $W_p < 0$, позитрони зустрічають бар'єр висотою:

$$\Phi_p \approx -W_p \quad (2)$$

(аналогічне співвідношення можна записати і для антиводню [4]).

Технологічний інтерес представляють плівки, вирощені на різних підкладках [5–7]. Наприклад, у роботі [7] експериментально досліджували плівки Pb (111) товщиною L від 1 до 16 моношарів, вирощені на підкладці Ge (111). Зокрема, проводили вимірювання роботи виходу електрона у вакуум методом фотоемісійної спектроскопії. Автори спостерігали пінінг рівня Фермі електронів у плівці Pb (111): усі середні значення $W_e \approx 4$ еВ (таке ж значення має χ_e для Ge), а розмірні флуктуації розподілялися в інтервалі $\Delta W(L) \in (0, 2; 0, 5)$ еВ. Для уточнення оціночних виразів (1) і (2) можна ввести залежність $W_{e,p}(\epsilon)$, де ϵ — діелектрична стала ізолятора.

У ході розрахунків метал-діелектричних інтерфейсів у наближенні суцільного середовища ізолятор характеризують лише величиною ϵ . У рамках наближення локальної густини (LDA) виконано численні розрахунки поляризації і поверхневого плазмонного резонансу в металевих нано-сферах, нитках і плівках у різних діелектричних матрицях (див., наприклад, огляд [8]), а також передбачено зміну знаку роботи виходу позитронів залежно від ϵ діелектричного покриття металу [9]. В рамках методу Кона–Шема ми провели розрахунки електронних характеристик метал-діелектричних наносандвічів [10, 11], а також характеристики позитронів у металах, що містять дефекти [12].

У роботі [10] мали місце особливості, що не отримали пояснення. Наприклад, залежності $W_e(L)$ для асиметричних сандвічів збігалися з роботою виходу електронів симетричних сандвічів з середньоарифметичним значенням діелектричної константи.

Проблему описання металу з неоднорідним покриттям безпосередньо пов'язують також з питанням про анізотропію роботи виходу або про локальну роботу виходу, яка за суттю відповідає локальному значенню ефективного одноелектронного потенціалу і залежить від координат [13–17]. Подібні дослідження прийнято виконувати або *ab initio* методами [14, 15], або методом Кона–Шема [16, 17], які зазвичай не дозволяють провести детальний аналіз одержаних результатів, який можливо виконати з використанням варіаційного методу Рітца.

Метою роботи є розрахунок методом Рітца характеристик метал-діелектричного сандвічу і плоскої металевої поверхні, ділянки якої покриті різними діелектриками.

2. МЕТОД РІТЦА

2.1. Постановка задачі

Розглянемо макроскопічну металеву суцільну сферу радіуса R , покриту шаром діелектриків зі сталими ϵ_i . Для спрощення обчислень,

керуючись досвідом нашої попередньої роботи [17], ми прийняли товщини діелектриків нескінченно великими. Досить швидко спадання електронного розподілу поза металом (приблизно на відстані $5\text{--}10 \text{ \AA}$) дозволяє знехтувати ефектом товщини цього покриття, мінімальна товщина якого повинна бути набагато більша моноатомного (або мономолекулярного) шару діелектрика. Довжина вільного пробігу електронів у діелектриках l_e — це десятки $\text{\AA}$ [18].

Для аналітичного вирішення задачі припустимо, що на металевій поверхні межують лише два діелектрики 1 і 2 ($i = 1, 2$). Область діелектрика з ε_1 визначається полярним кутом θ_m (рис. 1, *a*). У випадку, коли $\varepsilon_2 = 1$, рис. 1, *a* розв'язок задачі може бути застосований до металевої краплі, що лежить на діелектричній підкладці з ε_1 . Позначаючи частку поверхні сфери

$$\alpha = S_1/S, \quad (3)$$

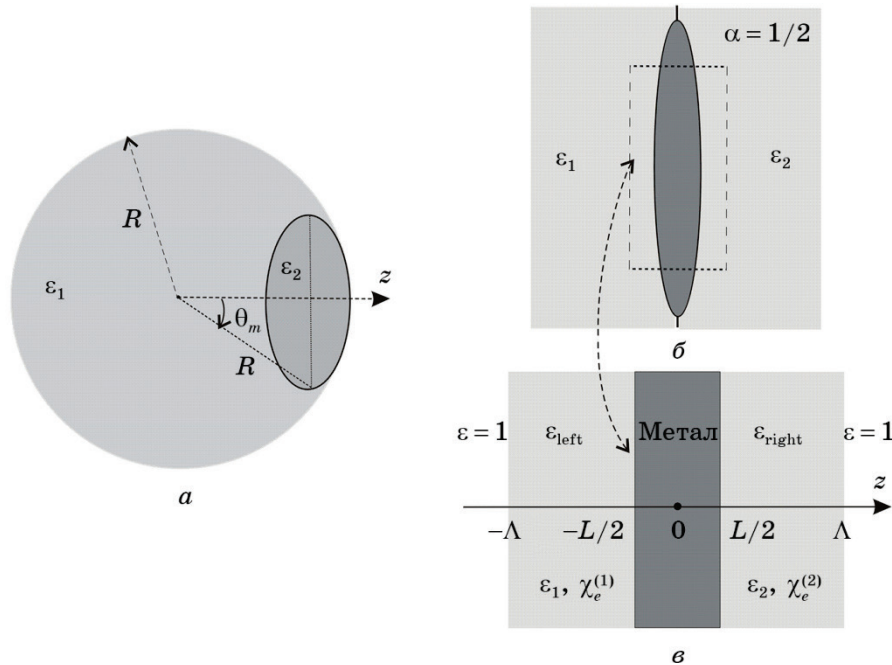


Рис. 1. Геометрична схема металевої сфери, покритої двома діелектриками (*a*), перехід від сфери до диска, симетрично розташованого між діелектриками (*б*), метал-діелектричний сандвіч (*в*).

Fig. 1. Geometric scheme for a metal sphere covered by two dielectrics (*a*), transition from a sphere to a disk symmetrically located between dielectrics (*b*), metal-dielectric sandwich (*c*).

яка зайнята діелектриком 1 ($S_1 = 2\pi Rh$, h — висота сферичного сегмента), одержуємо значення граничного кута

$$\cos \theta_m = 1 - h/R = 1 - 2\alpha. \quad (4)$$

У моделі желе металу розподіл позитивного (йонного) заряду є однорідним й ізотропним. Він може бути заданий одиничною ступінчастою функцією

$$\rho(r) = \bar{\rho} \Theta(r - R), \quad \bar{\rho} = \bar{n} = 3/(4\pi r_s^3), \quad (5)$$

(розподіл $\rho(r)$ однаковий для областей 1 і 2), $\bar{n}$ — електронна густина в об'ємі металу, r_s — середня відстань між електронами.

В ізотропному випадку, на прикладі желе-сфери у вакуумі [19], відомо, що радіус електронної хмари R' відрізняється від R . Ця відмінність $\propto R^{-1}$ і визначається умовою електронейтральності

$$\int v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0, \quad v(\mathbf{r}) \equiv n(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Діючи в іншій манері, для желе-сфери у вакуумі (те ж саме можна стверджувати і для кулі з однорідним діелектричним покриттям), радіус електронної хмари R' прирівнюємо до радіуса йонного желе R , а електронний профіль відповідно методу Рітца виберемо у вигляді [6, 19]

$$n(r) = \bar{n} \{1 - Ae^{(r-R)/\lambda}, r \leq R, Be^{(R-r)/\lambda}, r \geq R\}, \quad A = \frac{1}{2}f, \quad B = 1 - A, \quad (7)$$

де f враховує відмінність R' від R .

Згідно рисунку 1, а кожної області відповідають свої профілі. Для кулі з неоднорідним покриттям використаємо загальну форму профілю (7), але з відповідними індексами для $n(r)$, A , B і f :

$$n_i(r) = \{n_1(r), \theta \in (0, \theta_m), n_2(r), \theta \in (\theta_m, \pi)\}. \quad (8)$$

Відомо, що для металу з однорідним покриттям робота виходу електронів $W(\varepsilon)$ зменшується зі збільшенням ε [10, 17]. Нанесення на поверхню металу різних діелектриків ($\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$) призведе до перетікання електронної рідини поблизу поверхні металу з області 1 в область 2 (або навпаки) внаслідок виникнення контактної різниці потенціалів.

Розподіли $n_1(r)$ і $n_2(r)$ до цього ж здебільшого змістяться у протилежні сторони по нормалі до поверхні вглиб або металу, або діелектрика. Такий ефект можна відобразити введенням варіаційного параметрів δ_i у відповідні коефіцієнти:

$$A_i = \frac{1}{2} f_i + \delta_i, B_i = 1 - A_i.$$

Параметри A_1, A_2, B_1, B_2 і λ_1, λ_2 характеризують розміри локальних дипольних бар'єрів областей 1 і 2 відповідно.

Інтегрування у виразі (6) з урахуванням (7)–(9) приводить до співвідношення

$$\delta_1 = -\left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right) \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \delta_2 + O\left(\frac{1}{\beta_1^2}, \frac{1}{\beta_2^2}\right). \quad (9)$$

Протилежний знак δ_1 і δ_2 означає втрату локальної електронейтральності в областях 1 і 2 внаслідок перетікання електронів, але у випадку збереження повної електронейтральності сфери.

Розглянемо спочатку випадок $\alpha = 0,1$ (рис. 1, *a*) і $R \rightarrow \infty$ — плоску поверхню металу, покриту однорідним діелектриком.

2.2. Плоский інтерфейс метал–діелектрик

У моделі стабільного желе і методі Рітца використовуємо однопараметричний профіль електронів $n(z)$ і $\rho(r) = \bar{n}\Theta(-z)$.

Квантово-статистичний функціонал з об'ємною густиною енергії електронів $g(n)$ в LDA складається з:

квазіоднорідної кінетичної енергії невзаємодійного електронного газу;

членів розкладання Вейцзеккера–Кіржніца–Ходжа кінетичної енергії, що містить градієнти $n(z)$ з парними ступенями; обмінної енергії та кореляційної енергії Пайнса–Нозьєра (детальний вигляд функціоналу наведено в [6]).

Електростатичний потенціал φ визначають з рівняння Пуассона (тут і далі використано одиниці Хартрі)

$$\nabla^2 \varphi(z) = -\frac{4\pi}{F(z)} v(z), \quad \varphi(z \rightarrow \infty) \rightarrow 0. \quad (10)$$

Функція $F(z)$ дорівнює 1 усередині металу, де електрони і йони знаходяться у вакуумі, і дорівнює ε зовні металу. Розв'язок рівняння (10) має вигляд

$$\varphi(z) = \bar{\varphi} - 4\pi \int_{-\infty}^z \frac{v(z')}{\varepsilon(z')} dz', \quad \bar{\varphi} = -4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{v(z)}{\varepsilon(z)} z dz < 0, \quad (11)$$

де $\bar{\varphi}$ — значення у глибині металу.

Роботу виходу електронів у моделі стабільного желе визначають наступним чином

$$W = -\bar{\varphi} - \frac{dg(\bar{n})}{d\bar{n}} - \langle \delta v \rangle_{WS}, \quad (12)$$

де стабілізаційний потенціал

$$\langle \delta v \rangle_{WS} = 2(0,0026 + k_F / 8\pi - k_F^2 / 10).$$

Для позитронів

$$W_p = \bar{\varphi} + W_p^{\text{bulk}}(r_s), \quad (13)$$

де $W_p^{\text{bulk}}(r_s)$ містить внески від позитрон-електронних кореляцій в однорідному електронному газі [20] і позитрон-йонної взаємодії в елементарній комірці металу [21] ($W_p^{\text{bulk}} = 3,97$ еВ для Al).

Підставивши в (11) однопараметричну функцію, одержуємо

$$n(z) = \bar{n}\{1 - 0,5e^{z/\lambda}, z \leq 0, 0,5e^{-z/\lambda}, z \geq 0\}, \quad (14)$$

яка збігається з (7). Якщо $R \rightarrow \infty$, одержуємо

$$\varphi(z) = -2\pi\bar{n}\lambda^2 \left\{ \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) - e^{z/\lambda}, z \leq 0, \frac{1}{\varepsilon}e^{-z/\lambda}, z \geq 0 \right\}. \quad (15)$$

Вираз (15) збігається з відповідним результатом роботи [22]. У (15) коли $z = 0$ простежується зв'язок із значенням електростатичного потенціалу на границі провідної кулі в діелектрику [23]. Для цього потрібно розглянути внесок сферичного йонного желе і сферичної електронної хмари окремо.

Питому поверхневу енергію σ визначають відповідно з виразів для густини енергії $g(n)$ [6]. У результаті інтегрування функції (14) одержуємо

$$\begin{aligned} \sigma = & \bar{n}^2\lambda^3 C_q \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) + \lambda(\bar{n}^{5/3}C_t + \bar{n}^{4/3}C_{\text{ex}} + \bar{n}C_{\text{cor}}) + \\ & + \frac{\bar{n}}{\lambda}C_{g1} + \frac{\bar{n}^{1/3}}{\lambda^3}(C_{g2} + C_{g3} + C_{g4}) + \bar{n}\lambda C_{WS}\langle\delta v\rangle_{WS}, \end{aligned} \quad (16)$$

де $C_q = 0,785$, $C_t = -1,842$, $C_{\text{ex}} = 0,2502$, $C_{\text{cor}} = 6,589 \cdot 10^{-3}$, $C_{g1} = 9,627 \cdot 10^{-3}$, $C_{g2} = 5,115 \cdot 10^{-4}$, $C_{g3} = -4,832 \cdot 10^{-4}$, $C_{g4} = 1,611 \cdot 10^{-4}$, $C_{WS} = -0,5$.

Далі розглянемо випадок $\alpha = 1/2$ на рисунку 1, а, коли центр металеві кулі розташовано на плоскій границі двох діелектриків ($\theta_m = \pi/2$).

2.3. Сандвіч

Деформуючи кулю в диск, можна перейти до макроскопічної «пластини» товщиною L у діелектричному оточенні (рис. 1, б) — метал-діелектричний сандвіч з плоским інтерфейсом.

Для сандвіча виберемо профіль електронного розподілу у вигляді

$$n(z) = \bar{n} \begin{cases} B_1 e^{(z+Z_1)/\lambda_1}, & z < Z_1, \\ 1 - A_1 e^{-(z+Z_1)/\lambda_1}, & Z_1 \leq z < 0, \\ 1 - A_2 e^{(z-Z_2)/\lambda_2}, & 0 \leq z \leq Z_2, \\ B_2 e^{-(z-Z_2)/\lambda_2}, & z > Z_2, \end{cases} \quad (17)$$

де $Z_{1,2} = L/2 + \delta_{1,2}$.

З'ясувалося, що умова зшивання монотонного профілю (17) в $z = 0$ і його похідної для довільного L й умова електронейтральності виконуються тільки тоді, коли

$$\lambda_1 = \lambda_2 \quad \text{і} \quad \delta_1 = -\delta_2 = 0. \quad (18)$$

Підставляючи (17) у вираз для електростатичного потенціалу сандвіча

$$\varphi(z) = -4\pi \int_z^\infty dz' \int_{z'}^\infty \frac{v(z'')}{\varepsilon(z'')} dz'', \quad \varphi(\mp\infty) = 0$$

і зберігаючи тільки експонентну координатну залежність для випадку $L \gg \lambda$, одержуємо

$$\varphi(z) = -2\pi \bar{n} \lambda^2 \begin{cases} \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} e^{(z+L/2)/\lambda}, & z < -L/2, \\ 1 + \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} - e^{-(z+L/2)/\lambda}, & -L/2 \leq z \leq 0, \\ 1 + \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} - e^{(z-L/2)/\lambda}, & 0 \leq z \leq L/2, \\ \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} e^{-(z-L/2)/\lambda}, & z > L/2, \end{cases} \quad (19)$$

де

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2}. \quad (20)$$

Профіль (19) відображає еквіпотенційність поверхні пластини безпосередньо на границі позитивно зарядженого фону.

Таким чином, для сандвіча можна застосовувати той самий вираз (17), але з $\varepsilon \rightarrow \langle \varepsilon \rangle$. Для роботи виходу (12) значення $\bar{\varphi}$ тепер замінюємо на значення потенціалу в центрі сандвіча

$$\varphi(0) = -2\pi\bar{\lambda}^2(1 + \langle \varepsilon \rangle^{-1}).$$

Вираз (19) має аналогії. По-перше, спостерігається прямий зв'язок зі значенням електростатичного потенціалу на границі провідної кулі, симетрично розташованої між двома діелектриками з ε_1 і ε_2 [23]. По-друге, виявляється прямий зв'язок з результатами методу Кона–Шема для метал-діелектричних наносандвічів, наприклад, плівки Al товщиною L , ліворуч і праворуч від якої знаходяться діелектрики: $\{\varepsilon_{\text{left}} | \text{Al}_L | \varepsilon_{\text{right}}\}$ (рис. 1, б).

У результатах роботи [10] мали місце особливості, що не мають пояснення. Залежності $W(L)$ для сандвічів $\{1 | \text{Al}_L | 5\}$ і $\{3 | \text{Al}_L | 3\}$ збігалися. Розрахунок для $\{1 | \text{Al}_L | 9\}$ і $\{5 | \text{Al}_L | 5\}$ показав теж саме, тобто робота виходу для асиметричних сандвічів $\{\varepsilon_{\text{left}} | \text{Al}_L | \varepsilon_{\text{right}}\}$ збігалася з роботою виходу симетричних сандвічів $\{\langle \varepsilon \rangle | \text{Al}_L | \langle \varepsilon \rangle\}$ з середньоарифметичним значенням $\langle \varepsilon \rangle = (\varepsilon_{\text{left}} + \varepsilon_{\text{right}})/2$ (рис. 5 в [10]). Так само був виявлений горб потенціалу, наприклад, для $\{1 | \text{Al}_L | 5\}$ з боку вакууму ($\varepsilon_{\text{left}} = 1$). Тепер на підставі методу Рітца дамо пояснення цим особливостям.

У випадку $\alpha \neq 1/2$ і $R \rightarrow \infty$ електростатичний потенціал в аналітичних функціях не визначається, але можна вчинити так.

У випадку розрахунку ємності плоского конденсатора, частково заповненого різними діелектриками, величини ε_i входять в комбінації $\varepsilon_i S_i$, де S_i — площі контактів. Пропонується узагальнити вирази (15) і (16) за допомогою заміни

$$\tilde{\varepsilon} \rightarrow \sum_i \varepsilon_i \alpha_i \quad (21)$$

для довільного числа контактів металевої поверхні з діелектриками. У розглянутому нами випадку двох діелектриків

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon_1 \alpha + \varepsilon_2 (1 - \alpha) \quad (22)$$

і для $\alpha = 1/2$ маємо $\tilde{\varepsilon} = \langle \varepsilon \rangle$.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки виконували для Al ($r_s = 2,07a_0$, a_0 — борівський радіус). Оптимальні значення варіаційного параметра $\lambda(\varepsilon)$ знаходились з умови $\sigma(\bar{n}, \varepsilon, \lambda) \rightarrow \min$. Зі збільшенням сталої ε покриття значення

λ зростають від $0,709a_0$ ($\varepsilon = 1$) до $0,805a_0$ ($\varepsilon = 5$), виходячи на плато.

На рисунку 2 наведено залежності поверхневої енергії $\sigma(\varepsilon)$ і роботи виходу електронів $W(\varepsilon)$. Зі збільшенням сталої ε покриття величини σ і W зменшуються і також виходять на плато. Результати розрахунків методом Рітца для квантово-статистичного задовільно узгоджуються з експериментальними значеннями для $\varepsilon = 1$ ($\sigma = 926$ ерг/см², $W = 4,25$ еВ) і розрахунками методом Кона–Шема.

У таблиці 1 наведено результати обчислень для конкретних ізоляторів на поверхні Al, які демонструють зміну знаку роботи виходу позитрона $W_p(\varepsilon)$.

Можна відмітити задовільне узгодження розрахунків методами Рітца і Кона–Шема, що означає і задовільне узгодження розрахованих величин дипольних бар'єрів у цих версіях методу функціонала густини.

Результати розрахунків методом Рітца для метал-діелектричного сандвіча ($\alpha = 1/2$) наведені в табл. 2. Зіставлення значень σ і W у табл. 2 для $\varepsilon_1 = 3$ і $\varepsilon_2 = 1$ збігаються зі значеннями σ і W для $\varepsilon \rightarrow \langle \varepsilon \rangle = 2$ на рис. 2 для однорідного покриття. Аналогічна рівність спостерігається також для $\varepsilon_1 = 5$ і $\varepsilon_2 = 1$, $\varepsilon \rightarrow \langle \varepsilon \rangle = 3$ на рис. 2, що і є наслідком еквіпотенціальності металевої поверхні.

Поява горба потенціалу для асиметричного сандвіча в [10], на-

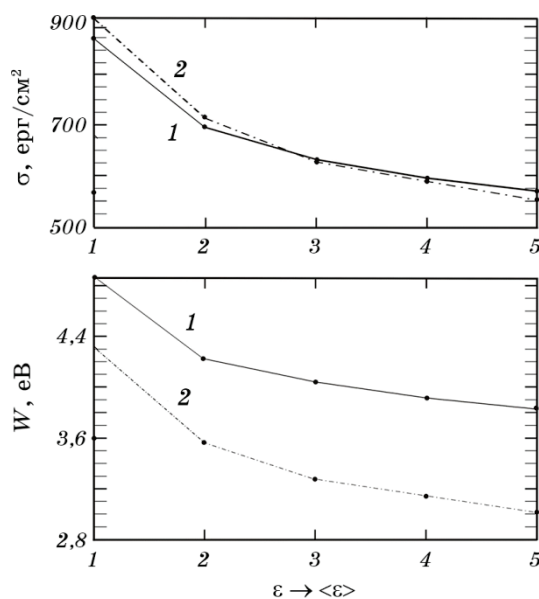


Рис. 2. Розраховані залежності $\sigma(\varepsilon)$ і $W(\varepsilon)$ методом Рітца (1) і Кона–Шема (2).

Fig. 2. The calculated dependences $\sigma(\varepsilon)$ and $W(\varepsilon)$ by the Ritz method (1) and the Kohn–Sham one (2).

ТАБЛИЦЯ 1. Результати розрахунків W_p методом Рітца і методом Кона–Шема (*) ідеальних контактів Al/ізолятор.**TABLE 1.** The results of calculations W_p by the Ritz method and the Kohn–Sham one (*) for perfect Al/insulator contacts.

Ізолятор	–	Ne	Ar	Kr	Xe	SiO ₂	Al ₂ O ₃
ε	1	1,2	1,5	1,65	1,9	2,43	9
W_p , eВ	–0,65	–0,45	–0,24	–0,16	–0,06	0,32	0,52
W_p^* , eВ	–0,67	–0,41	–0,15	–0,06	0,06	0,56	0,85

приклад, $\{1|Al_L|5\}$, пов'язана з перезарядкою поверхні. Електрони перетекли з правого боку пластини на ліву відповідно до умови рівноваги для хемічного потенціалу електронів $\mu(z) = \text{const}$. Обчислення з найпростішими пробними функціями за умови (18) не здатні відобразити цей ефект.

В таблиці 2 наведено результати відповідних обчислень для $\alpha \neq 1/2$. Значення λ , σ і W для $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$ відповідають інтерфейсу метал–вакуум і «першим» точкам на рис. 2.

«Неоднорідність» покриття формально визначається складовими

$$\bar{\varphi} = -2\pi\bar{n}\lambda^2 \left(1 + \frac{1}{\varepsilon_1\alpha + \varepsilon_2(1-\alpha)} \right) \quad \text{і} \quad \bar{n}^2\lambda^3 C_q \left(1 + \frac{1}{\varepsilon_1\alpha + \varepsilon_2(1-\alpha)} \right)$$

ТАБЛИЦЯ 2. Результати обчислень методом Рітца характеристик сандвіча.**TABLE 2.** The results of calculations by the Ritz method for sandwich characteristics.

α	ε_1	ε_2	λ, a_0	$\sigma, \text{eрг/см}^2$	$W, \text{eВ}$
1/2	1	1	0,709	872	4,88
1/2	2	1	0,741	760	4,47
1/2	3	1	0,760	698	4,25
1/2	4	1	0,774	658	4,12
1/2	5	1	0,784	630	4,03
1/2	4	3	0,791	609	3,96
1/3	2	1	0,732	790	4,58
1/3	3	1	0,748	736	4,39
1/3	4	1	0,760	698	4,25
1/3	5	1	0,770	669	4,16
1/3	4	3	0,789	615	3,98
1/4	2	1	0,727	807	4,64
1/4	3	1	0,741	760	4,47
1/4	4	1	0,752	725	4,35
1/4	4	3	0,787	619	3,99

для W і σ в (15) і (16) відповідно.

Тому, якщо для різних значень α , ε_1 і ε_2 комбінація $\varepsilon_1\alpha + \varepsilon_2(1 - \alpha)$ є цілочисельною, то точки на рис. 2 для однорідних покриттів відповідають саме цим числам.

Таким чином, рисунок 2 є ключовим, а, використовуючи співвідношення (21) як масштабне перетворення, можна оцінити значення σ і W для неоднорідного покриття.

Коментуючи роль параметрів δ_1 і δ_2 , слід вказати, що вибираючи монотонні пробні функції виду (14) або (17), умова електронейтральності у плоскому випадку дає можливість використовувати тільки один варіаційний параметр λ .

Точне рішення задачі для сандвіча знаходять із системи одновимірних рівнянь Кона–Шема і Пуассона [10]. У тривимірному випадку ці рішення повинні задовольняти умові $\mu(x, y, z = \text{const})$. Обчислювальна процедура у такій постановці досі не реалізована.

Таким чином, робота виходу електронів $W(\varepsilon)$ — енергія електрона відрахована від вакуумного рівня до рівня Фермі є ізотропною незалежно від форми поверхні металевго зразка і діелектричного покриття. Такий висновок впливає з еквіпотенціальності металевгої поверхні [13–17].

Бар'єр Шоттки для композитного покриття

$$\Phi_e^{(i)} = W_e(\varepsilon) - \chi_e^{(i)} \quad (23)$$

навпаки, є анізотропною величиною і у процесах перенесення визначається найбільшою величиною $\chi_e^{(i)}$ (найменшим $\Phi_e^{(i)}$). $\chi_e = 0,1, 0,2, 0,45, 0,68, 1,1, 1,35, 4,05$ і 4 еВ для Ne, Ar, Kr, Xe, Al_2O_3 , Si і Ge відповідно.

Обговоримо можливість спостереження залежностей $W_e(\varepsilon)$ і $W_p(\varepsilon)$ для різних контактів.

Якщо роботу виходу електронів у вакуум $W_e(\varepsilon)$ вимірюють у результаті зовнішнього фотоефекту, то таку можливість відносять тільки до металу з діелектричним покриттям товщиною $\Lambda < l_e$ (відсутність енергообміну електрона з ізолятором). У протилежному випадку ($\Lambda > l_e$) величину $W_e(\varepsilon)$ може бути встановлено за формулою (23) і виміру Φ_e внаслідок внутрішнього фотоефекту.

Роботу виходу позитронів у вакуум $W_p(1)$ одержують, виходячи з нижньої границі кінетичної енергії позитронів зворотної емісії [24], тобто тільки для тих металів, для яких $W_p(1) < 0$. Тому у випадку контактів з ізоляторами вимір залежності $W_p(\varepsilon)$ можливий тільки у разі виконання умови $\Lambda < l_p$, де l_p — довжина дифузії позитрона в ізоляторі. У випадку $\Lambda > l_p$ позитрон втратить надлишкову енергію в ізоляторі, опуститься нижче вакуумного рівня енергії і там анігілює. У наведених експериментальних ситуаціях в результаті вирішення оберненої задачі із вимірювання $W_e(\varepsilon, \lambda)$ і $W_p(\varepsilon, \lambda)$ можна

оцінити l_e і l_p в ізоляторі.

У нашому дослідженні ми припускали відсутність хемічних змін в контакті, що досить правдоподібно для ізоляторів з малим χ_e . Для напівпровідників Si, Ge наявність поверхневих станів призводить до пінінгу енергії Фермі. У цьому випадку задачу вирішують кластерним методом [25].

У методі Рітца для металевої поверхні з діелектричним покриттям питома поверхнева енергія виконує допоміжну роль: у результаті оптимізації визначали «справжнє» значення параметра $\lambda(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$, яке необхідне для розрахунку роботи виходу $W_{e,p}(\varepsilon)$. Можна запропонувати наступне практичне використання одержаних результатів для $\sigma(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$.

Експериментально поверхневий натяг визначається кутом змочування за законом Юнга [26]. Водночас одержана у даній роботі залежність $\sigma(\alpha, \varepsilon_1, \varepsilon_2) \big|_{\varepsilon_2=1}$ у певному сенсі моделює металеву краплю, що торкається площею αS власної поверхні діелектричної підкладки з константою ε_1 (рис. 1, а). Запропонований у даній роботі підхід, а також результати, наведені у табл. 2, дозволять збільшити точність вимірювання σ .

4. ВИСНОВКИ

У даній роботі в рамках методу Рітца досліджено енергетичні характеристики металевої плоскої поверхні з простішим неоднорідним діелектричним покриттям. Для однорідного покриття поверхнева енергія, робота виходу електронів і позитронів, розраховані методом Рітца, задовільно узгоджуються як з експериментальними даними, так і з розрахунками методом Кона–Шема.

Аналіз в рамках методу Рітца дозволив дати інтерпретацію деяких особливостей розрахункових попередніх результатів для асиметричних метал-діелектричних наносандвічів. Застосування пробних функцій аналітичного методу Рітца, який є менш точним порівняно з цілком самоузгодженим розрахунковим методом Кона–Шема, уможливив розкрити механізм зміни величин питомої поверхневої енергії, роботи виходу з металу, бар'єру Шотткі за рахунок підбору його неоднорідного діелектричного оточення.

Запропоновано оцінювати вплив неоднорідності покриття на характеристики металевої поверхні масштабуванням випадку однорідного покриття.

Показано, що робота виходу електронів є скалярною величиною незалежно від форми поверхні металевого зразка і діелектричного покриття. Бар'єр Шотткі для неоднорідного покриття, навпаки, є величиною анізотропною.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. S. Prada, U. Martinez and G. Pacchioni, *Phys. Rev. B*, **78**: 235423 (2008).
2. A. J. Chiquito, C. A. Amorim, O. M. Berengue, L. S. Araujo, E. P. Bernardo, and E. R. Leite, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **24**: 225303 (2012).
3. R. T. Tung, *Appl. Phys. Rev.*, **1**: 011304 (2014).
4. D. Comparat, *Phys. Rev. A*, **102**: 062812 (2020).
5. E. G. Barbagiovanni, D. J. Lockwood, P. J. Simpson, and L. V. Goncharova, *J. Appl. Phys.*, **111**: 034307 (2012).
6. M. Liu, Y. Han, L. Tang, J.-F. Jia, Q.-K. Xue, and F. Liu, *Phys. Rev. B*, **86**: 125427 (2012).
7. R. Y. Liu, A. Huang, C. C. Huang, C.-Y. Lee, C.-H. Lin, C.-M. Cheng, K.-D. Tsuei, H.-T. Jeng, I. Matsuda, and S.-J. Tang, *Phys. Rev. B*, **92**: 115415 (2015).
8. P. M. Dinh, P.-G. Reinhard, and E. Suraud, *Phys. Rep.*, **485**: 43 (2010).
9. P. V. Vakula, A. V. Babich, V. V. Pogosov, and Yu. A. Kunisky, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**: 1433 (2011).
10. A. V. Babich and V. V. Pogosov, *Phys. Solid State*, **55**: 196 (2013).
11. V. V. Pogosov, A. V. Babich, and P. V. Vakula, *Phys. Solid State*, **55**: 2120 (2013).
12. A. V. Babich, V. V. Pogosov, and V. I. Reva, *Phys. Solid State*, **57**: 2135 (2015).
13. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (New York: Holt, Rinehart and Winston: 1976).
14. C. J. Fall, N. Binggeli, and A. Baldereschi, *Phys. Rev. Lett.*, **88**: 156802 (2002).
15. L. Gao, J. Souto-Casares, J. R. Chelikowsky, and A. A. Demkov, *J. Chem. Phys.*, **147**: 214301 (2017).
16. V. V. Pogosov and V. P. Kurbatsky, *ZhETF*, **92**: 304 (2001).
17. A. V. Babich and V. V. Pogosov, *Surf. Sci.*, **603**: 2393 (2009).
18. V. O. Tin'kov, *Usp. Fiz. Met.*, **7**, No. 2: 117 (2006) (in Russian).
19. I. T. Iakubov, A. G. Khrapak, L. I. Podlubny, and V. V. Pogosov, *Solid State Commun.*, **53**: 427 (1985).
20. N. D. Drummond, P. Lopez Rios, R. J. Needs, and C. J. Pickard, *Phys. Rev. Lett.*, **107**: 207402 (2011).
21. R. M. Nieminen and J. Oliva, *Phys. Rev. B*, **22**: 2226 (1980).
22. K. Hirabayashi, *Phys. Rev. B*, **3**: 4023 (1971).
23. V. V. Batygin and I. N. Toptygin, *Sbornik Zadach po Elektrodinamike i Spetsial'noy Teorii Otnositel'nosti* [Problems in Electrodynamics and Special Theory of Relativity] (Lan': Saint-Petersburg–Moscow–Krasnodar: 2010) (in Russian).
24. P. J. Schultz and K. G. Lynn, *Rev. Mod. Phys.*, **60**: 701 (1988).
25. V. G. Zavodinsky and I. A. Kuyanov, *J. Appl. Phys.*, **81**: 2715 (1997).
26. E. E. Shpil'rayn, K. A. Yakimovich, E. E. Totskiy, D. L. Timrot, and V. A. Fomin, *Teplofizicheskie Svoystva Shchelochnykh Metallov* [Thermophysical Properties of Alkali Metals] (Moscow: Izdatel'stvo Standartov: 1970) (in Russian).