УДК 539.21

Чічерін Д. К.[1], Погосов В.В.[2]
[1] студ. гр. РТ-319 НУ «Запорізька політехніка»
[2] д-р фіз.-мат. наук, проф. НУ «Запорізька політехніка»

ПРО ЗАСТОСУВАННЯ ТЕОРЕМИ ГАУССА ДО МЕТАЛЕВОЇ ПОВЕРХНІ З ДІЕЛЕКТРИЧНИМ ПОКРИТТЯМ

За теоремою Гауса, поле $\mathbf{E}$ в однорідному діелектричному середовищі з константою ε визначається потоком вектора електричного зміщення $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ через замкнуту поверхню $\mathbf{S}$ і вільним електричним зарядом Q в об'ємі Ω, замкненим під цією поверхнею:

$$\Phi_{\mathbf{D}} = \oint\!\!\oint_S \mathbf{D}d\mathbf{S} = 4\pi Q \,, \qquad (1)$$

Застосуємо (1) для вирішення електростатичної частини завдання щодо знаходження роботи виходу електрона з металевого зразка, поверхня якого контактує з i діелектриками, в тому числі, і з вакуумом (i = 1, 2, …).

Уявимо, що S розбита на i плоских ділянок площиною $S_i = \alpha_i S$ так, що

$$\sum_i \alpha_i = 1 \,.$$

Для нейтрального зразка сумарний заряд підсистеми електронів провідності та кристалічної ґратки $Q = Q_{\mathrm{el}} + Q_{\mathrm{ion}} = 0$,

$$Q_{\mathrm{el}} = -e\int_{\Omega} n(\mathbf{r})d\mathbf{r}\,,\ Q_{\mathrm{ion}} = +e\int_{\Omega} \rho(\mathbf{r})d\mathbf{r}\,.$$

Потік поля через поверхню є кількістю силових ліній, що пронизують цю поверхню. Тому, поле далеко від нейтрального зразка – відсутнє. Поле відмінне від нуля тільки поблизу поверхні, де розподіл електронів $n(\mathbf{r})$ змінюється від об'ємного значення $\overline{n} = \overline{\rho}$ до нуля за межею ґратки в тонкому приповерхневому шарі.

Роботу виходу електрона можна визначити методом Кона-Шема чи Ритца [1,2]:

$$W = -\overline{v}_{\mathrm{eff}} - \varepsilon_{\mathrm{F}} = -\partial\overline{g}/\partial\overline{n} - e\overline{\phi}\,,\ \overline{v}_{\mathrm{eff}} = e\overline{\phi} + \overline{v}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{xc}}\,,\ \varepsilon_{\mathrm{F}} = \left(\hbar^2/2m\right)\left(3\pi^2\overline{n}\right)^{2/3}, \qquad (2)$$

де $\overline{v}_{\mathrm{eff}}$ – дно зони провідності в металі; $\overline{g}$ – об'ємна щільність енергії електронів в об'ємі зразка; ε_{F} енергія Фермі; $W, \overline{\phi}, \overline{v}_{\mathrm{eff}}$ – залежать від площини контактів межі ґратки з ізоляторами.

Вибираючи $\mathbf{S}$ в якості еквіпотенційної поверхні, враховуючи, що поле $\mathbf{E} = \nabla\phi$, маємо рівняння Пуассона

$$\nabla^2\phi = -e\frac{\nu(\mathbf{r})}{\epsilon(\mathbf{r})},\quad \nu(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}), \qquad (3)$$

в якому тривимірна функція

$$\epsilon\left(\alpha_i\varepsilon_i;\mathbf{r}\right) = \alpha_i\varepsilon_i,\ \mathbf{r}\in\mathbf{S}_i \qquad (4)$$

фіксує площі контактів з діелектриком та вакуумом. В області простору, *зайнятою ґраткою*, $\epsilon = 1$ (іони та електрони знаходяться у вакуумі).

Вибираючи відлік потенціалу від його значення $(\phi = 0)$ на великій відстані від зразка при заданому розподілі позитивних зарядів іонів ґратки $\rho(\mathbf{r})$, розв'язок рівняння (3) дає розподіл електронів і потенціалу поблизу поверхні, які формують максвеллівський тензор натягу. Таким чином, для всього складного діелектричного середовища поза ґраткою, можна ввести зважену константу

$$\tilde{\varepsilon} = \sum\nolimits_i \alpha_i\varepsilon_i\,.$$

Тепер проблема обчислення $\overline{\phi}$ у (2) значно спрощується. Це добре демонструють рішення в [1,2] одновимірної задачі для металевої плівки в різних діелектричних обкладках (рис. 1).

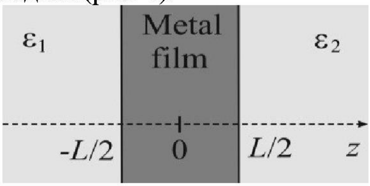

Рисунок 1 – Зображення асиметричного метал-діелектричного сандвіча

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. A.V. Babich, V.V. Pogosov, Phys. Solid State 55, 196–204 (2013).
2. В.В. Погосов, Фізика твердого тіла, 64, 125–133 (2022).