

СЕКЦІЯ «МІКРО-ТА НАНОЕЛЕКТРОНІКА»

УДК 539.21

Куянцев Д.С.¹, Погосов В.В.²

¹ студ. РТ-317 НУ «Запорізька політехніка»

² д-р физ.-мат. наук, проф. НУ «Запорізька політехніка»

ВАРІАЦІЙНІ РОЗРАХУНКИ ПОВЕРХНЕВОЇ ЕНЕРГІЇ. ФУНКЦІЯ СМІТА

Сучасний стан нанотехніки вимагає активне втручання нанотехнологій. Роль поверхневих ефектів у процесах конденсації, випаровування та емісії заряджених частинок металу зростає зі зменшення розмірів кластерів атомів. При цьому характеристики цих ефектів, такі, як коефіцієнт поверхневого натягу, робота виходу електронів та йонів, теплота випаровування самі починають залежати від розміру кластерів. Вимірювання поверхневої енергії завжди було складним. Тому особливим для наноелектроніки є розрахунок поверхневої енергії при моделюванні контактних явищ, а також острівцевих плівок на спеціальних підкладках.

Однорідний твердий метал є складною фізичною системою корельованих електронів та йонів із сильною взаємодією між ними. Під час опису поверхні металу і властивостей металевих кластерів виникають значні проблеми, оскільки необхідно розглядати дуже неоднорідні системи. У найпростішому випадку йонна підсистема модулюється позитивним компенсувальним фоном (желе). У цьому разі розподіл іонів не залежить від просторового розподілу електронів і жорстко заданий. З наближенням низьких температур електронну підсистему метала або кластера можна також розглядати як неоднорідну вироджену електронну рідину на фоні східчастого желе.

Успішному розвитку теорії поверхневих властивостей металів сприяє самоузгоджена теорія рівноважного стану неоднорідного електронного газу – метод функціонала густини (див., наприклад, [1]). Метод функціонала густини ґрунтується на локальному наближенні для потенціалу обмінно-кореляційної взаємодії, і тому він дійсний для повільно змінної густини. В такому формулюванні – це найпростіша самоузгоджена модель, яка взагалі має зміст: вона нехтує йонною структурою за винятком дальнодійного притягання. Н. Ленг і В. Кон використовували модель желе як перший крок на шляху створення теорії металевої поверхні.

Поверхня металу, характеризується насамперед роботою виходу електронів, питомою поверхневою енергією та поверхневим стресом (або поверхневим натягом). Щоб їх визначити, треба знати розподіл електронної густини і самоузгодженого потенціалу поблизу поверхні. Питома поверхнева

енергія γ – це незворотна робота при нульовій температурі з поділу металу (наприклад, на дві частини) вздовж деякої площини. Ця енергія припадає на одиницю площі утворених поверхонь. Поверхневий натяг (або стрес) – це зворотна робота зі змінення поверхні (на одиницю).

Стандартна модель желе, запропонована ще Дж. Бардіним для однорідної електронної рідини, має істотні недоліки. Вона в цілому призводить до негативних значень як γ (для $r_s < 2a_0$), так і модуля стискання B (для $r_s > 6a_0$). У цьому сенсі її ще називають моделлю нестабільного желе. Дж.П. Педью і його співавтори запропонували модель стабільного желе, таку ж просту, як і попередня, але доповнили її введенням псевдопотенціальної поправки.

В даній роботі однопараметричну функцію вибирали у вигляді

$$n(x) = \bar{n} \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{2}e^{bx}\right), & x \leq 0 \\ \frac{1}{2}e^{-bx}, & x > 0 \end{cases},$$

де параметр L характеризує ширину подвійного зарядженого (поверхневого) шару, $\bar{n}$ – концентрація електронів в глибині металу. Оптимальне значення параметру L знаходилось з вимоги мінімуму $\gamma(L)$.

Використаний варіант методу функціонала густини допускає незначну неоднорідність системи.

Розрахунки зроблено у двох моделях, а результати порівняно з експериментами.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Погосов, В.В. Введение в физику зарядовых и размерных эффектов. Поверхность, кластеры, низкоразмерные системы [Текст] / В. В. Погосов. – М.: Физматлит, 2006. – 328 с.