

УДК 538.9

Погосов В.В.¹

¹ д-р фіз.-матем. наук, проф. НУ «Запорізька політехніка»

БАР'ЕР ШОТТКІ МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИЧНИХ САНДВІЧЕЙ

Дослідження електронних властивостей металевої поверхні з складним покриттям становлять інтерес для сучасних технологій з метою створення, наприклад, матеріалів, що володіють значним сенсорним відгуком і селективністю.

Найбільш дослідженим в цьому напрямку є висота бар'єру Шотткі – робота виходу електронів у діелектрик або напівпровідник (ізолятор)

$$\Phi_e = W_e(\varepsilon) - \chi_e, \quad (1)$$

де W_e і χ_e – робота виходу електронів з металу у вакуум, глибина залягання зони провідності електронів у ізоляторі з діелектричною константою ε [1].

Позначимо частку поверхні $\alpha_i = S_i/S$, яка вкрита i -им діелектриком. При 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 за допомогою заміни

$$\tilde{\varepsilon} \rightarrow \sum_i \varepsilon_i \alpha_i, \quad (2)$$

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

$$\tilde{\varepsilon} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) / 2.$$

Це і є метал-діелектричний сандвіч [2] (рис. 1).

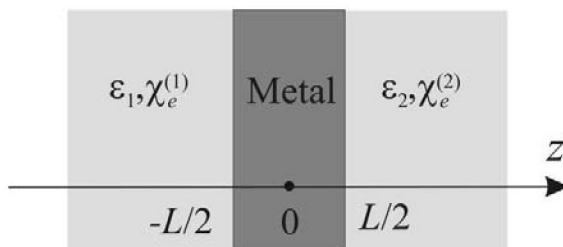


Рисунок 1 – Зображення асиметричного метал-діелектричного сандвіча.

Окремий випадок – це металева плівка на діелектричній підкладинці.

В рамках методу Рітца, квантово-статистичного функціоналу і моделі стабільного желе в роботі розглянута задача зі знаходження питомої поверхневої енергії, роботи виходу електронів, 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 [3]. Обговорюється можливість використання отриманих результатів в різних експериментальних ситуаціях.

Таким чином робота виходу електронів $W(\tilde{\epsilon})$ – енергія електрона відрахована від вакуумного рівня до рівня Фермі, є ізотропною, незалежно від форми поверхні металевого зразка і діелектричного покриття.

Такий висновок впливає з екіпотенціальності металевої поверхні.

Бар'єр Шотткі для композитного покриття

$$\Phi_e^{(i)} = W_e(\tilde{\epsilon}) - \chi_e^{(i)}, \quad (3)$$

навпаки, є анізотропною величиною і в 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.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. A. V. Babich, V. V. Pogosov, Surf. Sci 603, 2393-2397 (2009).
2. A. V. Babich, V. V. Pogosov, Phys. Solid State 55, 196-204 (2013).
3. В.В. Погосов, ФТТ, 64, 125-133 (2022).