ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 13, № 2 (2012) С. 332-335

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 13, № 2 (2012) P. 332-335

PACS: 78.70.BJ, 71.60.+Z

ISSN 1729-4428

А.В. Бабіч, П.В. Вакула, Є.Л. Жавжаров, В.В. Погосов

Робота виходу позитронів з металевої поверхні: роль самоузгодження розрахунків

Запорізький національний технічний університет, вул. Жуковського, 64, Запоріжжя, 69063, Україна, e-mail: vpogosov@zntu.edu.ua

У рамках двох версій методу функціоналу густини (градієнтного розкладу і системи самоузгоджених рівнянь Кона-Шема) в моделі стабільного желе для граней кристалів Al, Cu і Zn з діелектричним покриттям розраховано роботу виходу позитронів. Розрахунки показують, що наявність діелектричного покриття на поверхні металу може спричинити зміну знаку роботи виходу. Результати суттєво залежать від ступеню самоузгодження розрахункової схеми задачі.

Ключові слова: робота виходу позитронів; контакт метал – діелектрик; модель желе.

Стаття поступила до редакції 13.02.2012; прийнята до друку 15.03.2012.

Вступ

Одним із вельми чутливих методів діагностики конденсованих середовищ є метод анігіляції позитронів [1 -8]. Позитрони емітуються в метал будь-яким радіоактивним ізотопом, а потім попарно з електронами металу анігілюються з випусканням гама-квантів. У зв'язку з перспективними розробками ефективних нанопокриттів проблема діагностики поверхні є актуальною.

Важливою характеристикою стану позитронів у металі є його робота виходу W_{p}. Для одних металів робота W_{p} додатна, а для ряду інших – від'ємна. Від'ємній за знаком величині W_{p} відповідає інтенсивна зворотна емісія інжектованих позитронів, яка спостерігається в експериментах. До переліку металів з від'ємними значеннями W_{p} відносять Al, Cu, Fe, Mo, Ni, Cr і Ti. Для них із аналізу енергетичного спектру зворотної емісії (по відношенню до вакуумного рівня) у [9, 10] були отримані значення $W_{\mathrm{p}} < 0$ (ці метали є потенціальним бар'єром для позитронів, які інжектуються, на відміну від електронів, для яких метал завжди є потенціальною ямою, $W_{\mathrm{e}} > 0$).

Раніше розраховувались роботи виходу: W_{e} і W_{p} в моделі стабільного желе і градієнтної версії функціоналу для граней кристала без діелектричного покриття [11]; W_{e} у моделі нестабільного желе і градієнтної версії для поверхні з діелектричним покриттям [12, 13], а також W_{e} методом Кона-Шема в моделі стабільного желе [14].

Метою дослідження є розрахунок роботи виходу позитронів для металів у залежності від e – сталої діелектричного покриття на поверхні.

I. Основні співвідношення

Роботи виходу електрона і позитрона визначаються своїми об'ємними складовими і поверхневим дипольним бар'єром D:

$$W_{\mathrm{e}} = W_{\mathrm{e}}^{\mathrm{bulk}} + D, \qquad (1)$$

$$W_{\mathrm{p}} = W_{\mathrm{p}}^{\mathrm{bulk}} - D, \qquad (2)$$

де $W_{\mathrm{p}}^{\mathrm{bulk}} = -E_{\mathrm{corr}}^{\mathrm{p-e}} - E_0$. Внески $E_{\mathrm{corr}}^{\mathrm{p-e}}$ і E_0 відносять до позитрон-електронних кореляцій в однорідному електронному газі і позитрон-йонної взаємодії в елементарній комірці. Для Al, Cu і Zn величини $W_{\mathrm{p}}^{\mathrm{bulk}} = 3.97, 2.82$ і 3.80 eV розраховано раніше [15].

Припускаючи, що електростатичний потенціал вдалині за поверхнею дорівнює нулю (поверхня металу перпендикулярна $z-$напряму), величина електростатичного бар'єру $D = -e\bar{f}$, де e - елементарний позитивний заряд, а $\bar{f} < 0$ - значення електростатичного потенціалу в об'ємі металу ($z \to -\infty$). Внаслідок того, що $D > 0$, конкуренція

доданків у (2) приводить до величин W_p різного знаку. Величина дипольного бар'єру на поверхні металу залежить від кристалографічних індексів грані і вельми чутлива до способу розрахунку.

У методі функціонала густини повна енергія металу є функціоналом неоднорідної електронної концентрації $n(z)$ ($n(z) \to \bar{n}$ в об'ємі металу). У моделі стабільного желе повна енергія $E[n(z)]$ записується у вигляді суми кінетичної енергії невзаємодіючих електронів, обмінно-кореляційної складової, електростатичної енергії (Хартрі), псевдопотенціальної поправки та енергії Маделунга:

$$E[n(z)] = T_S + E_{XC} + E_H + E_{PS} + E_M . \qquad (3)$$

У роботі [14] запропоновано метод, що дозволяє розраховувати характеристики металевої поверхні, вкритої ізолятором. Розрахунки проведено методом Кона-Шема для функціоналу (3). Внаслідок того, що залежність $D(e)$ виявилась суттєвою (e - діелектрична стала ізолятора на поверхні), можна стверджувати, що для одного і того самого металу (або індексів грані) знак роботи виходу позитрона може змінюватись із зміною e .

У книзі [13] наведено аналітичний розв'язок у наближенні Томаса-Фермі, тобто коли в функціоналі є тільки електростатична і кінетична енергії. В результаті знайдено вираз для потенціалу

$$f(z) = -4p\bar{n}L^2 f(z),$$

$$f(z) = \begin{cases} 1 - \dfrac{\sqrt{e}}{1+\sqrt{e}} e^{z/L}, & z < 0, \\ \dfrac{1}{1+\sqrt{e}} e^{-z/(L\sqrt{e})}, & z > 0, \end{cases} \qquad 4)$$

а потім, інтегруючи рівняння Пуассона, вираз для концентрації електронів

$$n(z) = \bar{n} f(z). \qquad (5)$$

Далі мінімізувався функціонал нестабільного желе (останні дві складові у виразі (3) відсутні), в якому є градієнтна поправка (наближення Томаса-Фермі-Вейцзеккера-Кіржніца). Оптимальність однопараметричної пробної функції встановлюється умовою $dg / dL \to 0$ для поверхневої енергії при заданих значеннях $\bar{n}$ і e . Ми також розрахували роботу виходу позитронів, використовуючи цей підхід.

II. Результати обчислень

У таблиці наведено значення дипольного бар'єра, розраховані в двох схемах моделі стабільного желе: методом Кона-Шема (схема I) і прямим варіаційним методом з пробною функцією (4) і (5) (схема II).

Результати обчислень суттєво відрізняються не тільки за величиною, але й залежністю від сталої e покриття на поверхні металу. Наприклад, для Al у діапазоні зміни величини $e \in (1,80)$:

а) питома поверхнева енергія g в схемі I

Таблиця

Розрахункові кон-шемівські значення дипольного бар'єру D (в eV) при наявності діелектрика за поверхнею метала. Для порівняння наведено результати розрахунків прямим варіаційним методом з пробними функціями (4) і (5) (нижні значення для полікристалів)

Метал	Поверхня	$e = 1$	2	3	5	10	80
Al	полікристал	4,08 3,34	3,34 2,94	3,06 2,82	2,81 2,76	2,60 2,78	2,40 3,12
	(111)	4,65	3,90	3,61	3,35	3,13	2,92
	(110)	8,83	8,14	7,89	7,69	7,53	7,36
	(100)	6,20	5,45	5,16	4,91	4,71	4,52
Cu	полікристал	3,91 3,20	3,20 2,81	2,92 2,69	2,67 2,63	2,47 2,65	2,28 2,96
	(111)	4,33	3,60	3,32	3,07	2,86	2,66
	(110)	7,34	6,64	6,38	6,16	5,99	5,84
	(100)	5,46	4,72	4,44	4,19	3,98	3,77
Zn	полікристал	3,19 2,60	2,57 2,24	2,34 2,14	2,13 2,08	1,95 2,09	1,79 2,34
	(0001)	6,39	5,77	5,54	5,34	5,18	5,03

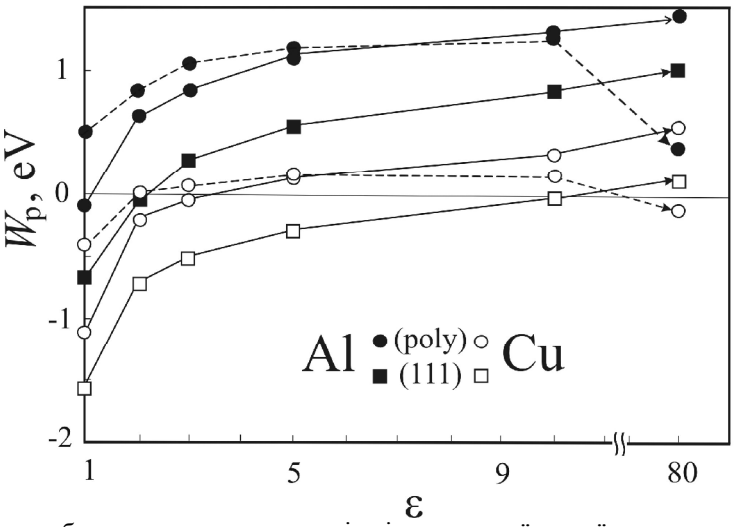

Рис. Залежність роботи виходу позитрона від діелектричної сталої покриття металу для Al і Cu: суцільна лінія – розрахунок методом Кона-Шема, пунктир – прямим варіаційним методом для полікристалів.

монотонно підвищується від 567 до 1574 J/cm^2, в той самий час у схемі II монотонно знижується від 927 до 431 J/cm^2;

б) дипольний бар'єр D у схемі I монотонно знижується від 4.08 до 2,4 eV, у той самий час у схемі II відповідні значення 3,34 і 3,12 eV, а в залежності $D(e)$ є мінімум в діапазоні $e \in (5{,}10)$;

в) робота виходу електронів W_e у схемі I монотонно зменшується від 4,30 до 2,61 eV, у той самий час у схемі II відповідні значення 3,60 і 3,37 eV, а в залежності $W_e(e)$ також є мінімум, якому складно дати фізичну інтерпретацію.

Результати обчислень в схемах I і II для Al і Cu, які демонструють ефект зміни знаку роботи виходу позитронів, а також чутливість до чисельних методів рішення задачі, наведено на рисунку. Необхідна обережність у використанні прямого варіаційного методу на основі пробних однопараметричних функцій. На думку авторів схема I є більш правдоподібною, однак необхідні експериментальні підтвердження отриманих результатів.

У схемі I для полікристалічного Zn / грані Zn (0001) залежність $D(e)$ не призводить до принципових змін: $W_p = +0{,}61/-2{,}59$ і $+2.01/-1.23$ eV, відповідно, при $e = 1$ і 80. Аналогічні висновки можна зробити для граней Al (110) / (100) [$W_p = -4.86/-2.23; -3.39/-0.55$ eV] і Cu (110) / (100) [$W_p = -4.52/-2.64; -3.02/-0.95$ eV], відповідно, при $e = 1;\ 80$.

Висновок

У двох наближеннях методу функціоналу густини і моделі стабільного желе для граней кристалів Al, Cu і Zn з діелектричним покриттям розрахована робота виходу позитронів. Результати суттєво залежать від ступеню самоузгодження розрахункової схеми. Показано, що прямий варіаційний метод із найпростішою пробною функцією може приводити до принципово інших результатів, яким складно дати фізичну інтерпретацію.

Розрахунки методом Кона-Шема показують, що наявність діелектричного покриття на поверхні металу може спричинити зміну знаку робіт виходу позитронів для полікристалів Al і Cu та їх площин (111). Отримані результати можуть бути використані для діагностики поверхні виробів, наноматеріалів і, можливо, в нанотехнологіях.

Зазначимо також, що в антиречовині (антиметалі) антиелектрони провідності (позитрони провідності) згідно принципу Паулі мали б ті самі багаточастинкові ефекти, що й електрони провідності звичайного металу. Як наслідок, робота виходу позитронів, наприклад, із антизолота, дорівнювала б роботі виходу електронів із золота.

[1] P.J. Schultz, K.G. Lynn. Rev. Mod. Phys. 60, 3 (1988).
[2] M.J. Puska, R.M. Nieminen. Rev. Mod. Phys. 66, 841 (1994).
[3] R. Wurschum, E. Shapiro, R. Dittmar, H.−E. Schaefer. Phys. Rev. B. 62, 12021 (2000).
[4] C.G. Fischer, M.H. Weber, C.L. Wang, S.P. McNeil, K.G.Lynn. Phys. Rev. B. 71, 180102 (2005).
[5] J. Kuriplach, O. Melikhova, M. Hou, S. Van Petegem, E. Zhurkin, M. Sob. Appl. Surf. Sci. 255, 128 (2008).
[6] M. Eldrup, Li Meimei, L.L. Snead, S.J. Zinkle. Nucl. Instrum. and Meth. B. 266, 3602 (2008).
[7] I. Makkonen, M.J. Puska. Phys. Rev. B. 76, 054119 (2007).

[8] V.I. Grafutin, O.V. Iljuhina, G.G. Mjasishheva, E.P. Prokop'ev, S.P. Timoshenkov, Ju.V. Funtikov, Ju.A.Chaplygin. Nanostruktury. Matematicheskaja fizika i modelirovanie 2, 15 (2010).
[9] M. Jibaly, A. Weiss, A.R. Koymen, D. Mehl, L. Stiborek, C. Lei. Phys. Rev. B. 44, 12166 (1991).
[10] M. Jibaly, A.R. Kaymen, L. Chun, D. Mehl, A. Weiss. Positron Annihilation. 105−110, 1399 (1992).
[11] V.V. Pogosov, I.T. Jakubov. FTT, 36(8), 2343 (1994).
[12] K. Hirabayashi. Phys. Rev. B3(12), 4023 (1971).
[13] V.F. Uhov, R.M. Kobeleva, G.V. Dedkov, A.I. Temrokov. Jelektronno-statisticheskaja teorija metallov i ionnyh kristal lov (Nauka, Moskva, 1982).
[14] A.V. Babich, V.V. Pogosov, G.G. Kravcova, V.P. Kurbac'kij, G.V. Snizhnoj. FHTT, 11, 567 (2010).
[15] R.M. Nieminen, J. Oliva. Phys. Rev. B. 22, 2226 (1980).

A.V. Babich, P.V. Vakula, E.L. Zhavzharov, V.V. Pogosov

Positron Work Function for Metal Surface: a Role of Self-Consistency

Department of Micro- and Nanoelectronics, Zaporozhye National Technical University, Zaporozhye 69064, Ukraine

In the framework of two versions of the density-functional theory (the gradient expansion, the self-consistent Kohn-Sham equations) and stabilized-jellium model the positron work function for Al, Cu and Zn crystal faces with dielectric coating has been calculated. The obtained results are very susceptible to a self-consistency of the procedure. We show that the dielectric coating of the metal surface leads to the change in the sign of the positron work function.