УДК 533.9.011(031)

РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ПОТЕНЦИАЛА В ДВОЙНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ СЛОЕ

Г.Ю. Даутов, докт. техн. наук, **И.Г. Даутов,** канд. физ.-мат. наук, **И.И. Файрушин,** студент

КГТУ им. А. Н. Туполева, Казань

Явления вблизи поверхности электропроводного тела играют важную роль в ряде физических процессов и технике[1-6]. Многие из этих сложных явлений, в том числе распределения концентрации электронов и потенциала, до сих пор мало исследованы. Данная работа посвящена решению системы уравнений, описывающих указанные распределения и исследованию основных характеристик двойного электрического слоя.

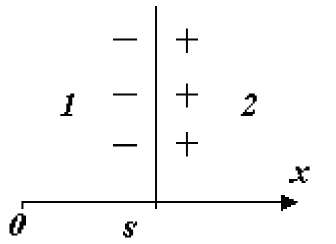


Рис.1.

Рассмотрим характеристики электронного газа в областях 1 и 2, показанных на рис.1. Пусть в первой области $0 \le x < s$ до начала эмиссии электронов из области металла 2 существует вакуум. Область 2 представляет собой полупространство $x > s$, занятое металлом. В сечении $x = s$ возникает большой градиент электронного газа, в результате чего часть электронов из области 2 поступает в область 1. В результате возникают электрическое поле, препятствующее дальнейшей эмиссии электронов, и двойной слой разноименных зарядов у поверхности металла[7]. В состоянии статистического равновесия устанавливаются некоторые распределения концентрации свободных электронов в области 1 и электронов в зоне проводимости металла $n(x)$ и электрического потенциала $\varphi(x)$. Некоторые электроны из области 1 переходят в область 2, а электроны области 2 переходят в область 1. Будем считать, что

$$\varphi(0)=0, \quad \varphi'(0)=0, \; n(\infty)=n_i, \; n'(\infty)=0, \tag{1}$$

где n_i - концентрация ионов металла.

Свойства электронного газа в областях 1 и 2 описываются распределением Ферми – Дирака

$$\bar{n}_k = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}\right)+1}, \tag{2}$$

где $\bar{n}_k$ – среднее число электронов в k-м квантовом состоянии с энергией ε'_k, μ–энергия Ферми, θ – статистическая температура, равная θ = *k T, k* – постоянная Больцмана, *T* – абсолютная температура.

Из (2) в квазиклассическом случае получается известная формула для распределения электронов по энергиям

$$dn(\varepsilon) = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon}{h^3\left[\exp\left(\dfrac{\varepsilon-\mu}{\theta}\right)+1\right]} \tag{3}$$

и давления

$$p = \frac{16\cdot 2^{\frac{1}{2}}m^{\frac{3}{2}}\theta^{\frac{5}{2}}}{3h^3}\int_0^\infty \frac{z^{\frac{3}{2}}dz}{\exp\left(z-\dfrac{\mu}{\theta}\right)+1} .$$

Здесь *h* – постоянная Планка. Энергия Ферми μ определяется условием нормировки функции (3)

$$n = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon-\mu}{\theta}\right)+1} . \tag{4}$$

Так как в областях 1 и 2 возникает потенциальное электрическое поле, в состоянии статистического равновесия должно выполняться условие [8]

$$\mu - q\varphi = const\,, \tag{5}$$

где q – абсолютное значение заряда электрона.

Область 1: $0 \le x < s$. В этой области концентрация электронов мала и поэтому электронный газ является невырожденным. Энергия Ферми такого газа описывается формулой

$$\mu = \theta \ln\left[\frac{n}{2}\left(\frac{h^2}{2m\pi\theta}\right)^{\frac{3}{2}}\right]. \tag{6}$$

Из теоремы Гаусса для электростатического поля с учетом (5) и (6) получается дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2 \ln n}{dx^2} = \frac{q^2 n}{\varepsilon\varepsilon_0\theta}.$$

При начальных условиях $n\,(0) = n_0$, $n'\,(0) = 0$, его решением будет:

$$n = n_0\left[1 + \mathrm{tg}^2\left(\sqrt{\frac{n_0}{2\varepsilon\varepsilon_0\theta}}qx\right)\right]. \tag{7}$$

С учетом распределения Больцмана из (7) находим распределение потенциала

$$\varphi = \frac{\theta}{q}\ln\left[1 + tg^2\left(\sqrt{\frac{n_0}{2\varepsilon\varepsilon_0\theta}}\cdot qx\right)\right]. \tag{8}$$

Область 2: $s \le x$. Будем считать, что температура значительно ниже температуры вырождения

$$T_{\text{в}} = \frac{h^2}{2mk}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}}.$$

Для металлов $T_{\text{в}}$ составляет несколько тысяч градусов. При $T \ll T_{\text{в}}$ газ можно считать полностью вырожденным и использовать известную формулу

$$\mu = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}}, \tag{9}$$

На рисунке 2 показаны графики зависимости μ от n при температурах 500, 1000 и 2000 К. График $F(\mu)$ представляет собой зависимость концентрации электронов от энергии Ферми, рассчитанная по формуле (9)

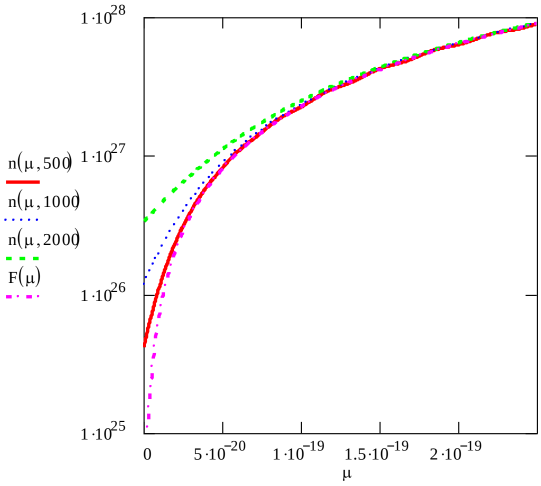


Рис.2.

Сравнение графиков этого рисунка показывает, что при $n > 5 \cdot 10^{27}$ м$^{-3}$ температура практически не влияет на численное значение энергии Ферми.

Из теоремы Гаусса и уравнений (5) и (9) для этой области получаем дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2 n^{\frac{2}{3}}}{dx^2} = a(n - n_i), \quad n(s) = n_2, \quad n'(s) = c_1,$$

где $a = \frac{2e_1^2 m}{\varepsilon\varepsilon_0 h^2}\left(\frac{8\pi}{3}\right)^{\frac{2}{3}}$, n_2 и c_1 – значения n и n' при $x = s$. Решением этого уравнения будет:

$$x = s + \int_{y_1}^{y} \frac{dy}{\sqrt{\Psi_0^2 - 2an_i(y - y_1) + \frac{4}{5}a\left(y^{\frac{5}{2}} - y_1^{\frac{5}{2}}\right)}} \ . \tag{10}$$

Здесь $y = n^{2/3}$, $y_1 = n_2^{2/3}$, $\Psi_0 = y'(s) = \frac{2c_1}{3n_2^{1/3}}$, $c_1 = 2n_0 tg(\alpha \cdot s)\frac{\alpha}{\cos^2(\alpha \cdot s)}$, $\alpha = \sqrt{\frac{n_0}{2\varepsilon\varepsilon_0\theta}}q$. Как видно, во все эти выражения входит n_0. Из (10) с учетом условия $n(\infty) = n_i$ необходимо определить n_0 и подставить его значение во все предыдущие формулы. Тем самым получается решение, удовлетворяющее всем условиям задачи.

Из (10) следует

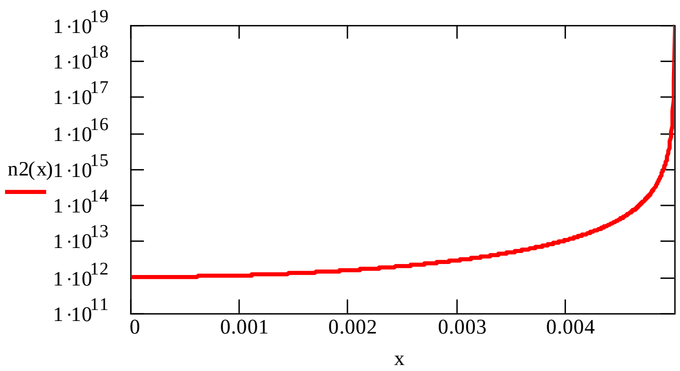
$$\frac{dy}{dx}=\sqrt{\Psi_0^2-2an_i(y-y_1)+\frac{4}{5}a\left(y^{\frac{5}{2}}-y_1^{\frac{5}{2}}\right)}$$

Отсюда с учетом условия $n'(\infty)=0$ находим

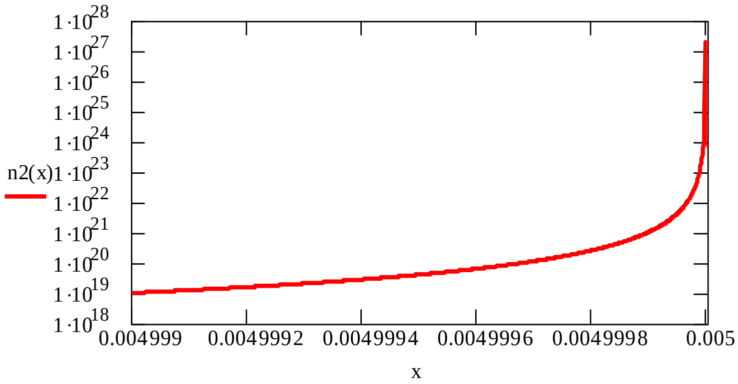
$$\frac{\Psi_0^2}{2a}-n_i(n_i^{\frac{2}{3}}-n_2^{\frac{2}{3}})+\frac{2}{5}\left(n_i^{\frac{5}{3}}-n_2^{\frac{5}{3}}\right)=0 \qquad (11)$$

Величина n_0 находится из уравнения (11).

По полученным формулам были рассчитаны основные характеристики двойного электрического слоя, возникающего у поверхности меди. Концентрация электронов в зоне проводимости меди, определенная экспериментально с использованием эффекта Холла, равна 10^{28} м$^{-3}$ [7]. Следовательно, $n(\infty)=n_i=10^{28}$ м$^{-3}$. На рисунках 3а и 3б графики изменения n вдоль x при $s=0.005$м, $\varepsilon=1$, $T=1000$К.



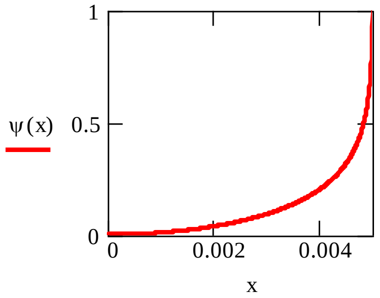
а



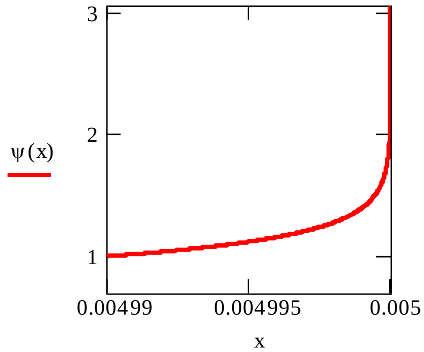
б

Рис.3. Распределение концентрации электронов в области 1.

Как видно из них, с увеличением *x* концентрация электронов сначала растет очень медленно (рис. 3а), а при приближении к поверхности меди растет очень быстро (рис. 3б). Аналогично изменяется потенциал электрического поля, что видно из рисунков 4а и 4б.



а



б

Рис.4. Распределение потенциала электрического поля в области 1.

На рисунках 5 и 6 показаны графики изменения потенциала и концентрации электронов соответственно в области 2.

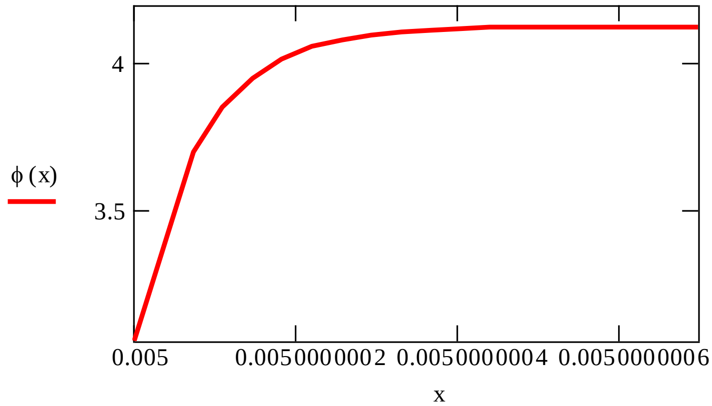


Рис.5. Распределение потенциала электрического поля в области 2.

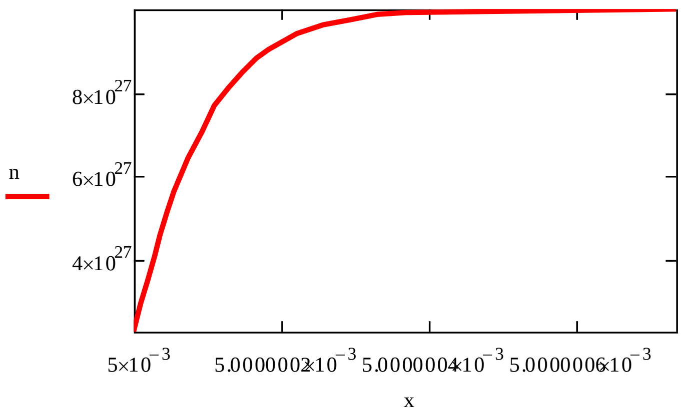
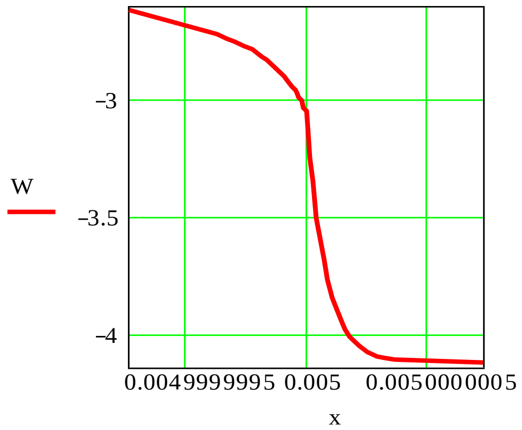


Рис.6. Распределение концентрации электронов в области 2.

Как видно из этих рисунков, потенциал и концентрация электронов сначала у стенки металла резко возрастают и на глубине около $4 \cdot 10^{-10}$ м их изменение уже прекращается. Таким образом, толщина двойного слоя со стороны b_1 составляет всего $4 \cdot 10^{-10}$ м. В этом слое как видно из рисунков, концентрация электронов возрастает на один порядок, а потенциал – приблизительно на 1 В. Напряженность электрического поля непосредственно у поверхности $1.7 \cdot 10^{10}$ В/м.

Из рисунков 3 и 4 видно, что в области 1 нет четкой границы двойного слоя. Если условно за границу двойного слоя примем сечение, где $n = 10^{19}$ м$^{-3}$, то получим $x = 0.004999$ м и $b_2 = s - x = 0.000001$ м. Как видно, $b_2 >> b_1$.

На рис.7 показано изменение потенциальной энергии электрона вдоль оси *x*. Как видно, в металле электрон находится в потенциальной яме, что является общеизвестным фактом. Но здесь важно то, что вышеприведенные расчеты позволяют определить работу выхода электрона из этой потенциальной ямы.



Из формулы (5) следует

$$\mu(\infty) - q\varphi(\infty) = \mu(s) - q\varphi(s)$$

Отсюда находим

$$A = q\varphi(\infty) = \mu(\infty) - \mu(s) + q\varphi(s)$$

или

$$A = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\left(n_i^{\frac{2}{3}} - n_2^{\frac{2}{3}}\right) + \varphi(s). \qquad (12)$$

Расчет по этой формуле при $T = 1100$ дает $A = 4.422$. По экспериментальным данным при этой же температуре $A = 4.41 \pm 0.02$ эВ [6]. Расчет работы выхода для меди в рамках метода функционала плотности дает 4.93 эВ [9]

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Фортов В. Е., Храпак А. Г., Якубов И. Т.* Физика неидеальной плазмы. Учеб. пособие. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 528 с.
2. *Цытович В.Н.* Плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака // УФН. 1997. Т. 167. № 1. С. 57.
3. *Цытович В.Н., Винтер Д.* Пыль в установках управляемого термоядерного синтеза // УФН. 1998. Т. 168. С. 899.
4. *Донской А.В., Клубникин В.С.* Электроплазменные процессы и установки в машиностроении. Л.: Машиностроение, 1979. 221 с.
5. *Потапов Г.П.* Двигательная электризация летательных аппаратов. Казань: Казан. гос. техн. ун-т, 1995. 168 с.
6. *Фоменко В.С.* Эмиссионные свойства материалов. Справочник. Киев: Наукова думка, 1981. 340 с.
7. *Сивухин Д.В.* Общей курс физики. Учебное пособие: Для вузов. В 5 т. Т. III. Электричество. М.: ФИЗМАТЛИТ; Изд-во МФТИ, 2002. 656 с.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 616 с.
9. *Мамонов М.В., Прудников В.В.* Расчет работы выхода металла в рамках метода функционала плотности // Вестник Омского университета. 1998. Вып.1. С. 22–25.