

ОБ ОСЦИЛЛЯЦИЯХ ТОКА ТЕРМОЭМИССИИ В СОСТАВНЫХ СИСТЕМАХ

*А. Н. Старостин**, *М. А. Чесноков*

*Государственный научный центр «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»
142190, Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 10 ноября 2002 г.

Исследуется вопрос о токе термоэмиссии, испускаемом в вакуум составной системой, состоящей из металлического слоя конечной ширины L и полубесконечного металла. Найдено явное выражение для тока термоэмиссии, непосредственно учитывающее квантовые эффекты надбарьерного отражения и сильное вырождение электронного газа в металле при достаточно низких температурах. Тем самым фактически было получено обобщение классического результата Ричардсона–Дэшмана на случай низких температур. Особенный акцент сделан на роли примесей, содержащихся как в металле, так и слое, на суммарный ток термоэмиссии. Как было показано, нарушение примесными ионами строго периодического поля идеального кристалла приводит к разрушению однозначной связи между импульсом и полной энергией электронов проводимости. Получено, что соответствующее выражение для «обобщенной» функции распределения, зависящей от независимых переменных — энергии и импульса, — естественным образом входит в уравнение для тока термоэмиссии. Проведенный численный анализ позволил установить, что изменение функции распределения электронов под действием поля примеси приводит к изменению полного тока термоэмиссии из рассматриваемой системы. В частности, была установлена осциллирующая зависимость тока термоэмиссии от толщины и концентрации примеси в слое. Все вычисления проводились в рамках неравновесных функций Грина.

PACS: 03.65.-w, 71.10.Ay, 51.10.+y

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование структуры нормальных металлов (т. е. металлов, не находящихся в сверхпроводящем состоянии) является одним из наиболее важных и перспективных направлений современной физики твердого тела благодаря многочисленным применениям полученных знаний в индустрии. Эта проблема возникла еще в начале 20 века, когда были предложены различные модели, описывающие поведение электронов в периодическом поле кристалла. В частности, подробно решалась задача о движении электрона в периодическом потенциале. Как было показано, в ряде случаев движение электронов в металле можно рассматривать как движение свободных частиц с эффективной массой, зависящей от структуры решетки и вида энергетического спектра электронов в металле. Эта модель получила название модели свободных электронов.

Одним из наиболее важных результатов модели свободных электронов является выражение для электрического тока термоэмиссии из полубесконечного металла, известное как формула Ричардсона–Дэшмана [1]:

$$J_{therm} = -\bar{D} \frac{M^* T^2}{2\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{W_a}{T}\right), \quad (1)$$

где \bar{D} — усредненный коэффициент прохождения, T — температура металла, W_a — работа выхода из металла и M^* — эффективная масса электрона. Здесь можно сделать два важных замечания. Во-первых, как показывают опыты по циклотронному резонансу, отличие эффективной массы от реальной физической массы электрона может быть весьма незначительным. Для таких металлов эффективную массу M^* в (1) с большой степенью точности можно заменить на реальную массу электрона M . Во-вторых, выражение для тока термоэмиссии (1) по сути является классическим и было получено в

*E-mail: a.starostin@relcom.ru

предположении, что функция распределения электронов проводимости в металле является фермиевской; при этом подразумевается, что все электроны, обладающие энергией выше пороговой, могут покинуть металл и поэтому дать вклад в ток термоэмиссии. Квантовые эффекты надбарьерного отражения (т. е. отражения той части электронов, которые, согласно классической теории, должны беспрепятственно вылететь из металла) учитываются лишь дополнительным нормировочным множителем \bar{D} , что, вообще говоря, обосновано лишь при достаточно высоких температурах. Следовательно, можно ожидать, что точность формулы (1), дающей хорошее согласие с экспериментом при высоких температурах, будет уменьшаться с понижением температуры.

Целью настоящей работы является вычисление тока термоэмиссии с учетом различных квантовых эффектов, таких как надбарьерное отражение, возможное существование связанных состояний и сильное вырождение электронного газа в металле. Кроме того, особенное внимание уделено роли примесей, так или иначе неизбежно содержащихся в металлах. Добавляя примеси в идеальную решетку, мы тем самым вносим внешний потенциал, в котором движутся электроны в металле. Это приводит к нарушению пространственной однородности и, как следствие, к неопределенности в величине импульса электрона. Другими словами, «обобщенная» функция распределения электронов по энергиям и импульсам в металле обладает конечной шириной, зависящей от характера взаимодействия электронов и примесных ионов. Последующий анализ проводится в рамках «обобщенной» функции распределения $F(E, \mathbf{p})$, где импульс электрона и полная энергия являются независимыми переменными [2]. Ниже приведен явный вид $F(E, \mathbf{p})$ и показано, что в отсутствие примесей (т. е. в случае идеальной кристаллической решетки) обобщенная функция распределения F принимает следующий вид:

$$F(E, \mathbf{p}) = n(E)\delta\left(E - \frac{p^2}{2M^*}\right), \quad (2)$$

т. е. в этом случае мы приходим к однозначной связи между импульсом и энергией электрона. Показано, что изменение функции распределения электронов в металле под действием поля примеси может оказать довольно существенное влияние на ток термоэмиссии. В частности, найдена осциллирующая зависимость тока от концентрации примеси. Кроме того, подробно исследован случай, когда на поверхность металла нанесен слой другого металла, также

содержащего примеси. Показано, что при этом зависимость полного тока термоэмиссии от ширины слоя и концентрации примесных ионов в слое также имеет осциллирующий характер.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 описана постановка задачи и получено выражение для тока термоэмиссии, записанное в терминах кинетических функций Грина. В разд. 3 решается уравнение Дайсона для запаздывающих и кинетических функций Грина, получены явные выражения для вкладов в полный ток термоэмиссии от каждого из металлов. В разд. 4 приводятся и обсуждаются результаты численного анализа для полного тока термоэмиссии.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ТОК ТЕРМОЭМИССИИ В ТЕРМИНАХ КИНЕТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Нас будет интересовать следующая составная система (см. рис. 1), состоящая из металла 1, заполняющего плоскопараллельный слой конечной ширины L (область $0 < z < L$), и полубесконечного металла 2, заполняющего область $z > L$.

Металлы предполагаются различающимися по составу, т. е. с различными работами выхода W_1, W_2 и концентрациями свободных электронов Ne_1, Ne_2 (при проведении численных расчетов в качестве металла 1 было взято серебро, в качестве металла 2 — натрий). Кроме того, подразумевается, что указанная составная система находится в состоянии термодинамического равновесия при конечной температуре T .

Как уже говорилось во Введении, целью настоящей работы является вычисление тока термоэмиссии, испускаемого данной системой в вакуум, заполняющий область $z < 0$. Под вакуумом подразумевается область с пренебрежимо малой концентрацией

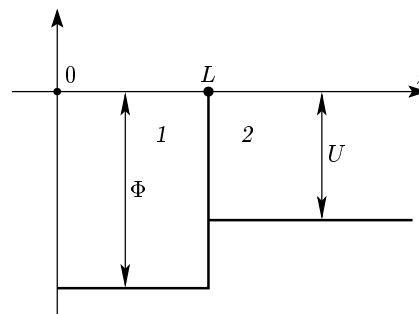


Рис. 1

частиц и соответствующей температурой, близкой к абсолютному нулю.

Мы не будем ограничиваться случаем идеально-го металла и принимать во внимание лишь квантовые поправки к классическому результату Ричарсона–Дэшмана (1). Поскольку поле внутри реального металла может заметно отличаться от поля идеальной решетки, интересно проследить, насколько подобное отклонение может повлиять на суммарный ток термоэмиссии. Заметим, что указанная «неидеальность» может быть вызвана как тепловыми колебаниями атомов решетки вблизи положений равновесия, так и присутствием различного рода дефектов, таких как вакансии, междоузлия и дислокации.

Поскольку нас, прежде всего, интересует ток термоэмиссии из данной системы при низких температурах, мы не будем принимать во внимание тепловые колебания решетки, приписав нарушение идеальности решетки наличию дефектов в структуре металла. В настоящей работе мы также не будем рассматривать эффекты, связанные с дислокациями и вакансиями, а ограничимся случаем, когда металл содержит примесные ионы, искажающие поле идеального кристалла.

Итак, мы будем считать, что металл 1, так же как и металл 2, содержит примеси. Подразумевается, что концентрация этих примесей известна и что возможно создавать металл с заданной концентрацией примеси. В настоящей работе мы будем использовать модель, схожую с моделью свободных электронов, т. е. рассматривать электронный газ в металле как свободный и движущийся в некотором эффективном потенциале, образованном ионами решетки и примесными центрами. Соответственно, потенциалы U и Φ , указанные на рис. 1, описывают потенциалы взаимодействия электронов между собой, с ионами металла и с ионами примеси. Ниже мы приведем явный вид этих потенциалов как функций работы выхода из металла, концентрации электронов, ионов решетки и примесных частиц.

Для того чтобы получить непосредственное выражение для тока термоэмиссии из рассматриваемой системы, нам необходим надежный математический формализм, который позволил бы учесть все интересующие нас эффекты. Как будет ясно из дальнейшего, в качестве этого формализма удобно выбрать аппарат кинетических функций Грина [3]. Для того чтобы записать уравнение для тока термоэмиссии, мы сначала выпишем хорошо известный результат для плотности электрического тока системы частиц, взятый из курса квантовой механики:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{R}, t) &= \\ &= \frac{i\hbar}{2M} e \left\{ \nabla_{\mathbf{R}} \rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t) - \nabla_{\mathbf{R}'} \rho^*(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t) \right\} \Big|_{\mathbf{R}'=\mathbf{R}}, \end{aligned} \quad (3)$$

где \hbar — постоянная Планка (в дальнейшем мы будем полагать ее равной единице), M — масса электрона. Одночастичная матрица плотности $\rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t)$, записанная в терминах вторично-квантованных полевых операторов, имеет следующий вид:

$$\rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t) = \langle \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{R}', t) \rangle. \quad (4)$$

Здесь $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$ — гейзенберговские полевые операторы, действующие в пространстве чисел заполнения. Эти операторы удовлетворяют фермиевской статистике и в нашем случае описывают движение электронов с учетом их взаимодействия с полем решетки и примесных ионов. Как известно, в формализме Гейзенберга волновые функции не зависят от времени. Следовательно, усреднение в (4) может проводиться по основному состоянию системы, в котором взаимодействие с примесью отсутствует (мы предполагаем адиабатическое выключение взаимодействия с примесными частицами при $t \rightarrow -\infty$).

Важно отметить следующее: для упрощения записи в выражении (4) были опущены спиновые индексы. Действительно, в отсутствие внешних магнитных полей функция $\rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t)$ изотропна относительно спиновых переменных т. е.

$$\rho_{ij}(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t) = \rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t) \delta_{ij}.$$

Следовательно, очень удобно рассматривать модель электронов со спином равным нулю. В окончательных результатах мы введем поправки, связанные со спином электрона, с помощью соответствующих численных множителей.

При известной матрице плотности $\rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t)$ уравнение (3) в принципе дает ответ на поставленный вопрос. Следовательно, нашей целью является нахождение явного вида матрицы $\rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t)$. Наиболее естественным средством, дающим возможность найти данную матрицу, является аппарат неравновесных функций Грина. Действительно, можно легко установить непосредственную связь между одночастичной матрицей плотности ρ и кинетической функцией Грина G^{-+} :

$$\rho(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t) = -iG^{-+}(\mathbf{R}'t', \mathbf{R}t) \Big|_{\mathbf{R}'=\mathbf{R}, t'=t},$$

где G^{-+} по определению удовлетворяет равенству

$$iG^{-+}(\mathbf{R}t, \mathbf{R}'t) = -\langle \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}'t') \hat{\Psi}(\mathbf{R}t) \rangle. \quad (5)$$

Следовательно, принимая во внимание соотношения (3) и (5), выражение для z -проекции вектора плотности тока можно переписать в терминах неравновесных функций Грина следующим образом:

$$J_z^{therm} = \frac{e}{M} \operatorname{Re} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2} \times \left(\frac{d}{dz} - \frac{d}{dz'} \right) G^{-+}(z, z', \mathbf{k}_\perp, \omega) \Big|_{z=z'}. \quad (6)$$

Под функцией $G^{-+}(z, z', \mathbf{k}_\perp, \omega)$ здесь понимается фурье-образ функции G^{-+} относительно переменных $\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp$ (этот вектор лежит в плоскости xy) и $t - t'$. В дальнейшем для упрощения записи мы будем опускать аргументы \mathbf{k}_\perp, ω . Таким образом, решение задачи о вычислении тока термоэмиссии свелось к нахождению кинетической функции Грина G^{-+} . В следующем разделе будет показано, что данный переход от одночастичной матрицы плотности к неравновесным функциям Грина позволяет свести нашу задачу (т. е. нахождение явного вида функции G^{-+}) к решению системы интегро-дифференциальных уравнений.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ЗАПАЗДЫВАЮЩИХ (ОПЕРЕЖАЮЩИХ) ФУНКЦИЙ ГРИНА

Как уже упоминалось ранее, для того чтобы найти явный вид тока термоэмиссии, нам необходимо вычислить кинетическую функцию G^{-+} . Из теории неравновесных гриновских функций нам известно, что функция G^{-+} может быть представлена в виде суммы диаграмм, отвечающих различным порядкам теории возмущений. Заметим, что эта сумма может быть переписана в форме интегрального уравнения Дайсона [4] (аргументы \mathbf{k}_\perp, ω опускаем):

$$G^{-+}(z, z') = - \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 dz_2 G^R(z, z_1) \Sigma^{-+}(z_1, z_2) G^{R*}(z', z_2). \quad (7)$$

Здесь Σ^{-+} — массовый оператор, представляющий собой сумму соответствующих неприводимых диаграмм и непосредственно описывающий взаимодействие электронного газа в металле с полем примесных ионов (как будет видно из дальнейшего, он пропорционален плотности примеси), G^R — запаздывающая (retarding) функция Грина, определенная как

$$iG^R(\mathbf{R}'t', \mathbf{R}t) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}'t') \hat{\Psi}(\mathbf{R}t) - \hat{\Psi}(\mathbf{R}t) \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}'t') \rangle, & t' > t, \\ 0 & t' < t. \end{cases}$$

Запаздывающая функция Грина G^R также удовлетворяет уравнению Дайсона (с соответствующим массовым оператором Σ^R), которое может быть записано в виде системы интегро-дифференциальных уравнений в частных производных. Решая данную систему при заданных начальных и граничных условиях для G^R , а также при заданном явном виде массового оператора Σ^{-+} , мы можем вычислить искомым ток термоэмиссии. Таким образом, нашим следующим шагом является решение системы уравнений для запаздывающей гриновской функции и оператора Σ^{-+} .

Сделаем несколько замечаний, касающихся нахождения оператора Σ^{-+} . Во-первых, подчеркнем, что присутствие границы металла сказывается лишь в тонком слое порядка тепловой дебройлевской длины волны частицы. Так как большинство столкновений происходит в глубине металла, мы можем пренебречь граничными эффектами и рассматривать металл как бесконечный. При этом (как следует из кинетического уравнения для G^{-+}) оператор Σ^{-+} определяет скорость прихода частиц в некоторое состояние за счет взаимодействия с примесью. Поскольку мы рассматриваем систему, находящуюся в состоянии термодинамического равновесия, из принципа детального равновесия следует, что

$$\Sigma^{-+}(\omega, \mathbf{p}) = \frac{G^{-+}(\omega, \mathbf{p})}{G^{+-}(\omega, \mathbf{p})} \Sigma^{+-}(\omega, \mathbf{p}) = i \frac{G^{-+}}{G^{+-} - G^{-+}} \Gamma. \quad (8)$$

Здесь Σ^{ab} и G^{ab} — фурье-образы соответственно массового оператора и функции Грина, $\Gamma = 2 \operatorname{Im} \Sigma^R$. Как будет показано в дальнейшем, величина Γ положительна и описывает неопределенность значения импульса электрона при заданной полной энергии. В первом порядке теории возмущений, когда функции G^{-+} и G^{+-} отвечают свободному движению электронов проводимости в металле в отсутствие примеси, соотношение (8) принимает вид

$$\Sigma^{-+}(\omega, \mathbf{p}) = -in(\omega)\Gamma(\omega, \mathbf{p}) = -i\Gamma \left\{ e^{\omega/T} + 1 \right\}^{-1}. \quad (9)$$

Здесь $n(\omega)$ — фермиевские числа заполнения электронов в металле. Как видно из приведенной выше формулы, все детали взаимодействия примеси и

электронов содержатся именно в $\Gamma(\omega, \mathbf{p})$. Предполагаем, что это взаимодействие является короткодействующим, и полагаем

$$\Sigma^{-+}(z, z') = \text{const} \cdot \delta(z - z'), \quad (10)$$

где const не зависит от z и z' (подразумевается, что концентрация примесных центров не зависит от глубины). В таком случае соотношение (9) остается в силе, но величины Σ^{-+} и Γ уже не зависят от z -компоненты вектора импульса \mathbf{p} . Из сравнения выражений (9) и (10) находим, что

$$\text{const} = -in(\omega)\Gamma.$$

Важно отметить, что согласно (9) массовый оператор Σ^{-+} пропорционален числам заполнения электронных состояний. Поскольку в вакууме эти числа равны нулю, мы полагаем

$$\Sigma_{vac}^{-+} = 0.$$

Таким образом, из теории возмущений и принципа детального равновесия мы получили выражение для массового оператора Σ^{-+} . Как следует из уравнения (7), для того чтобы получить окончательное выражение для кинетической функции Грина G^{-+} (и далее для тока термоэмиссии из составной системы согласно (6)), нам необходимо найти явный вид запаздывающей функции G^R . Прежде всего нужно установить, какие именно функции G^R нам нужны. Для этого заметим, что величина плотности потока частиц j_z из (6) не должна зависеть от координаты z . Поэтому без ограничения общности мы можем положить $z = -0$ (т. е. левый предел со стороны вакуума). Принимая во внимание сделанное предположение о локальности взаимодействия (10) и тот факт, что в вакууме (область $z < 0$) $\Sigma^{-+}(z, z') = 0$, выражение для G^{-+} можно упростить:

$$G^{-+}(z, z') = - \int_0^L G^R(z, z_1) \Sigma_{sl}^{-+} G^{R*}(z', z_1) dz_1 - \int_L^\infty G^R(z, z_1) \Sigma_{met}^{-+} G^{R*}(z', z_1) dz_1, \quad (11)$$

где Σ_{sl}^{-+} , Σ_{met}^{-+} — массовые операторы, описывающие взаимодействие электронов с примесью соответственно в слое и металле. Из (11) видно, что при $z, z' < 0$ нас будут интересовать лишь компоненты $G^R(z < 0, 0 < z' < L)$ и $G^R(z < 0, z' > L)$.

Для того чтобы получить выражение для тока термоэмиссии с помощью уравнений (6), (7), нам необходимо вычислить две запаздывающие функции Грина G^R , а именно, компоненты

$G^R(z < 0, 0 < z' < L)$ и $G^R(z < 0, z' > L)$. С этой целью рассмотрим уравнение Дайсона для G^R . В общем случае оно является интегро-дифференциальным, но, принимая во внимание сделанное предположение о локальности взаимодействия (10), мы можем записать это уравнение в виде дифференциального уравнения второго порядка в частных производных. Следовательно, с учетом неоднородности пространства мы приходим к следующей системе (предполагается, что $z < 0$):

$$\left[\Omega_+ - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dz'^2} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu_+ + U_0 \right] G^R(z, z') = 0, \quad z' > L, \quad (12)$$

$$\left[\Omega_0 - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dz'^2} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu_0 + \Phi_0 \right] G^R(z, z') = 0, \quad 0 < z' < L, \quad (13)$$

$$\left[\omega - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dz'^2} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu_- \right] G^R(z, z') = \delta(z - z'), \quad z' < 0. \quad (14)$$

Здесь μ_-, μ_0, μ_+ — химические потенциалы электронов, соответственно, в вакууме, металлическом слое и полубесконечном металле. Важно отметить, что в состоянии термодинамического равновесия выполняется следующее соотношение:

$$\mu_- = \mu_0 = \mu_+,$$

что является прямым следствием закона сохранения числа частиц (электронов) в системе. В (12)–(14) потенциалы U_0 и Φ_0 описывают поле, создаваемое решеткой соответственно в металле и слое. В данной модели мы не учитываем пространственную зависимость U_0 и Φ_0 , рассматривая их как некоторые эффективные, усредненные по пространству потенциалы.

Величины

$$\Omega_k = \omega + \Delta_k + i\Gamma_k/2, \quad k = +, 0,$$

в левой части уравнений (12)–(14) определяют «обобщенные» (т. е. полученные в присутствии примеси) частоты. Индекс $k = +$ соответствует металлу, а $k = 0$ — металлическому слою. Важно отметить, что частоты Ω_k являются, вообще говоря, комплексными числами. Действительная часть Ω_k содержит вклад Δ_k , зависящий от концентрации примеси и характеризующий сдвиг энергии электрона за счет поля примеси. Заметим, что величины Δ_k связаны с Σ^R следующим соотношением:

$$\Delta_k = \text{Re } \Sigma^R = \frac{\Sigma^{--} + \Sigma^{++}}{2}. \quad (15)$$

Соответственно, мнимая часть Ω_k , т. е. Γ_k , описывает рассеяние электронов на примеси в металле и также связана с Σ^R :

$$\Gamma_k = 2 \text{Im } \Sigma^R = \Sigma^{+-} - \Sigma^{-+}. \quad (16)$$

Как будет показано ниже, Γ_k определяет степень «размытости» обобщенной функции распределения.

Заметим, что в работе [5] был проведен соответствующий квантовомеханический расчет сдвига Δ_k и ширины Γ_k для случая так называемого газа Лоренца, т. е. неидеального газа, находящегося в поле внешних статических ионов. Как было показано, величина Γ_k непосредственно связана с амплитудой рассеяния на внешнем ионе (см. также [6]).

Общее решение полученной системы уравнений для запаздывающих гриновских функций G^R (12)–(14) может быть записано как

$$G^R(z < 0, z') = \begin{cases} -\frac{iM}{s} \exp(is|z - z'|) + C_1 \exp(-is(z + z')), & z' < 0, \\ \{A_1 \exp(i\beta z') + A_2 \exp(-i\beta z')\} \exp(-isz), & 0 < z' < L, \\ C_2 \exp(i\alpha z' - isz), & z' > L, \end{cases} \quad (17)$$

где A_1, A_2, C_1, C_2 — константы, которые находятся из условия непрерывности функций Грина G^R и ее производной на границах вакуум–слой металла и слой металла–металл, и введены следующие обозначения:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} \left(\omega - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu_+ + U + \frac{i\Gamma_+}{2} \right)},$$

$$\beta = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} \left(\omega - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu_0 + \Phi + \frac{i\Gamma_0}{2} \right)},$$

$$s = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} \left(\omega - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu_- \right)}.$$

Ниже мы покажем, что «ширины» Γ , фигурирующие в приведенных выше формулах, положительны. Следовательно, мнимые части α и β также положительны и описывают затухание электронных волн в среде (см. (17)). Для того чтобы получить окончательные выражения для G^R , нам необходимо определить константы, фигурирующие в (17). Эти константы могут быть найдены из граничных условий для G^R . В качестве граничных условий мы можем выбрать непрерывность самих функций Грина G^R , а также их первых производных (вследствие непрерывности плотности потока частиц) на границах раздела сред $z = 0$ и $z' = L$. С учетом этих условий для интересующих нас функций $G^R(z < 0, 0 < z' < L)$ и $G^R(z < 0, z' > L)$ получаем

$$G^R(z < 0, z' > L) = \frac{4iM\beta \exp(-i\alpha L)}{(\beta - \alpha)(\beta - s) \exp(i\beta L) - (\beta + \alpha)(\beta + s) \exp(-i\beta L)} \exp(i\alpha z' - isz), \quad (18)$$

$$G^R(z < 0, 0 < z' < L) = 2iM \frac{(\alpha - \beta) \exp(i\beta(L - z')) - (\alpha - \beta) \exp(-i\beta(L - z'))}{(\beta + \alpha)(\beta + s) \exp(-i\beta L) - (\alpha - \beta)(s - \beta) \exp(i\beta L)} \exp(-isz). \quad (19)$$

Теперь нам известны выражения для гриновских функций G^R и мы можем получить явное выражение для тока термоэмиссии, испускаемого в вакуум рассматриваемой составной системой. Из соотношений (10) и (18), (19) мы можем найти кинетическую

функцию G^{-+} согласно (11). Далее, принимая во внимание формулу (6), можно непосредственно вычислить искомый ток термоэмиссии. Например, ток, создаваемый правым полупространством (область $z > L$), имеет следующий вид:

$$j_z^+ = -\frac{8M}{\pi} \int_0^\infty d\omega n_+(\omega) \int \frac{d\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2} \frac{|\beta|^2 \operatorname{Re} s}{|(\beta - \alpha)(\beta - s) \exp(i\beta L) - (\beta + \alpha)(\beta + s) \exp(-i\beta L)|^2} \frac{\Gamma_+}{\operatorname{Im} \alpha}. \quad (20)$$

Знак минус указывает на направление, а именно, из металла в вакуум. Аналогично, для тока, создаваемого слоем металла ($0 < z < l$), получаем

$$j_z^0 = -\frac{4M}{\pi^2} \int_0^\infty d\omega n_0(\omega) \int \frac{d\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2} \Gamma_0 \operatorname{Re} s \frac{|\beta + \alpha| \exp(\operatorname{Im} \beta L) + |\beta - \alpha| \exp(-\operatorname{Im} \beta L)}{|(\beta - \alpha)(\beta - s) \exp(i\beta L) - (\beta + \alpha)(\beta + s) \exp(-i\beta L)|^2} \times \frac{\operatorname{sh}(\operatorname{Im} \beta L)}{\operatorname{Im} \beta L}. \quad (21)$$

Соответственно, полный ток термоэмиссии, испускаемый в вакуум, есть сумма этих двух величин:

$$J_z^{\text{therm}} = j_z^0 + j_z^+. \quad (22)$$

Необходимо сделать несколько замечаний, касающихся формул (20) и (21). Во-первых, нужно отметить, что эти выражения содержат квантовые эффекты, связанные с прохождением электронов через барьер (например, надбарьерное отражение). Величина $\operatorname{Re} s$ в правой части выражения для силы тока непосредственно связана с коэффициентом прохождения через барьер. Эта величина показывает, что не все электроны могут покинуть металл. Покинуть металл могут лишь электроны с энергией, большей работы выхода из металла (для которых $\operatorname{Re} s > 0$). Во-вторых, в формулы (20), (21) входят фермиевские числа заполнения электронов. Это является следствием того, что электронный газ в интересующем нас диапазоне температур (порядка 1000 К) является сильно вырожденным. В-третьих, видно, что выражения для тока термоэмиссии явно содержат ширины Γ_k , непосредственно связанные с присутствием примеси в металле. При достаточно малых концентрациях примеси и, как результат, при малых Γ_k (напомним, что Γ_k пропорциональна концентрации примеси) можно показать, что правые части (20), (21) будут содержать следующую функцию энергии и импульса электронов:

$$f(\omega, k_z, \mathbf{k}_\perp) = n(\omega) \times \frac{\Gamma}{\left(\omega + \Delta - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu - U\right)^2 + \Gamma^2}. \quad (23)$$

Эта функция пропорциональна числам заполнения электронных состояний и выполняет роль функции распределения электронов по состояниям в присутствии поля примеси. Мы будем трактовать

$f(\omega, k_z, \mathbf{k}_\perp)$ как обобщенную функцию распределения, где энергия ω и импульс (k_z, \mathbf{k}_\perp) рассматриваются как независимые переменные.

Заметим, что величины Δ и Γ в (23), вообще говоря, могут также зависеть от энергии ω и импульса (k_z, \mathbf{k}_\perp) . Как видно из (23), Δ представляет собой изменение полной энергии электрона под действием поля примеси, а «ширины» Γ описывают неопределенность значений импульса электрона при заданной полной энергии.

Указанная неоднозначность импульса при заданной энергии электрона связана с нарушением примесными центрами однородности пространства, вследствие чего перестает выполняться закон сохранения импульса. Важно заметить, что в пределе $\Gamma \rightarrow 0$ (т.е. случай идеального металла, не содержащего примеси) мы приходим к зависимости

$$f(\omega, k_z, \mathbf{k}_\perp) \propto n(\omega) \delta\left(\omega + \Delta - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu - U\right). \quad (24)$$

В этом случае (как уже было сказано во Введении) энергия и импульс электрона однозначно связаны друг с другом (см. (2)). В пределе высоких температур (когда становится возможным использование классической теории), используя функцию распределения (24), мы вновь приходим к результату Ричардсона–Дэшмана (1).

Таким образом, можно ожидать, что поле примесных ионов способно изменить функцию распределения электронов в металле. Соответственно, при достаточно высоких концентрациях примеси мы можем получить существенное отклонение от классического закона (1). В последующих разделах мы приведем результаты численного анализа уравнений (20)–(22).

4. ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ

Рассмотрим полученные нами явные выражения (20), (21) для тока термоэмиссии из интересующей нас составной системы в вакуум. Как было показано, в присутствии примеси ток определяется обобщенной функцией распределения $f(E, \mathbf{p})$, где энергия E и импульс \mathbf{p} являются независимыми переменными, в отличие от классического результата Ферми, где энергия однозначно связана с импульсом. Важно отметить, что, согласно (23), явный вид функции $f(E, \mathbf{p})$ зависит от конкретного вида взаимодействия электронов и примесных ионов через величины $\Delta(E, \mathbf{p})$ и $\Gamma(E, \mathbf{p})$. Здесь $\Delta(E, \mathbf{p})$ определяет сдвиг энергии электрона благодаря взаимодействию с примесью, а $\Gamma(E, \mathbf{p})$ характеризует степень «размазанности» функции распределения, т.е. степень неопределенности импульса при заданной энергии.

Нас прежде всего будет интересовать, как ток термоэмиссии зависит от температуры, ширины металлического слоя и концентрации примеси (в металле и в слое). Для того чтобы выписать окончательное явное выражение для обобщенной функции распределения $f(E, \mathbf{p})$ (23), нам необходимо выяснить законы дисперсии для величин $\Delta(E, \mathbf{p})$ и $\Gamma(E, \mathbf{p})$, т.е. установить явный вид зависимости от полной энергии и импульса. Этот вопрос достаточно подробно обсуждался в литературе [5, 6, 8, 9]. В частности, было показано, что в том случае, когда взаимодействие электронов с примесью описывается потенциалом $U(\mathbf{r}) \propto \delta(\mathbf{r})$, при больших значениях импульса \mathbf{p} обобщенная функция распределения (23) ведет себя как $f \propto 1/p^4$ (см. [9]); в случае кулоновского потенциала $U(\mathbf{r}) \propto 1/r$ в [8] было получено, что $f \propto 1/p^8$. В работе [5] подробно исследовался случай дебаевского потенциала. Там численно решалось уравнение для массового оператора Σ^R (напомним, что Δ и Γ выражаются через Σ^R согласно уравнениям (15), (16)) для случая неидеального газа, находящегося в поле внешних ионов, и была предложена удобная асимптотическая ($p \rightarrow \infty$) форма для ширины $\Gamma(E, \mathbf{p})$:

$$\Gamma(E, \mathbf{p}) = \frac{2\sqrt{2}\pi e^4 N_p}{\sqrt{M}} \frac{\sqrt{E}}{E_p^2}, \quad (25)$$

где M — масса электрона, N_p — концентрация примеси в металле, $E_p = \mathbf{p}^2/2M$ — кинетическая энергия электрона. При проведении численных расчетов мы воспользуемся следующей приближенной зависимостью $\Gamma(E, \mathbf{p})$:

$$\Gamma(E, \mathbf{p}) = \frac{2\sqrt{2}\pi e^4 N_p}{\sqrt{M}} \frac{\sqrt{E}}{E_{p\perp}^2 + U^2}. \quad (26)$$

Выражение (26) аналогично (25) с той лишь разницей, что мы пренебрегли зависимостью от компоненты импульса p_z , положив

$$E_{pz} = p_z^2/2M = U$$

(напомним, что, согласно классической теории, металл могут покинуть лишь электроны с $E_{pz} > U$).

В работе [5] также был проведен соответствующий расчет для величины сдвига $\Delta(E, \mathbf{p})$ в плазме, содержащей малую концентрацию примеси. Данный расчет использует свойства мнимой и действительной частей массового оператора Σ^R (см. [6]) и основан на теории возмущений. Было получено, что

$$\Delta(E, \mathbf{p}) = \frac{\sqrt{\pi} e^2 n_p e_p^2}{\sqrt{4\Gamma n_I e_I^2}}. \quad (27)$$

Здесь n_I, e_I и n_p, e_p — концентрации и заряды соответственно ионных остовов решетки и примесных центров. Заметим, что в пределе низких концентраций примесей $\Delta(E, \mathbf{p})$ линейно зависит от n_p . Кроме того, как следует из (27), в первом порядке теории возмущений этот сдвиг не зависит от энергии и импульса, а является лишь функцией концентраций и зарядов ионов. Мы воспользуемся аппроксимацией (27) в численных расчетах с целью качественной иллюстрации полученных эффектов осциллирующей зависимости тока термоэмиссии составной системы от концентрации примеси.

Зная концентрацию электронов проводимости в металле и работу выхода, можно легко найти эффективный потенциал, в котором движутся электроны в случае идеального металла, т.е. металла с пренебрежимо малой концентрацией примесных центров:

$$U_0 = E_F^0 + W. \quad (28)$$

Здесь E_F^0 — энергия Ферми электронов в отсутствие потенциала U_0 , W — работа выхода из металла. Заметим, что при проведении численных расчетов значения для работ выхода W были взяты из экспериментальных таблиц по фотоэмиссии. Из экспериментальных данных о концентрации электронов проводимости в металле также можно найти соответствующие значения E_F^0 , воспользовавшись следующей известной формулой:

$$E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2M} (3\pi^2 N)^{2/3}, \quad (29)$$

где N — концентрация электронов. Важно отметить, что выражение (29), строго говоря, справедливо для бесконечного металла и не может быть использовано

для нахождения химического потенциала металлического слоя конечной ширины, поскольку предполагает однородное пространственное распределение электронов. В случае слоя конечной ширины это распределение существенно неоднородно и необходим более тщательный расчет. Однако можно показать, что для конечного слоя металла шириной $L > 10 \text{ \AA}$ мы можем пренебречь эффектами, связанными с конечными размерами образца, и воспользоваться выражением (29).

Зная поправку к энергии электрона за счет примеси $\Delta(E, \mathbf{p})$ (27), мы можем обобщить полученный результат (28) на случай малых концентраций примеси, добавив соответствующее слагаемое в правую часть, тогда

$$U = E_F^0 + W + \Delta(E, \mathbf{p}). \quad (30)$$

Следует также упомянуть, что потенциал внутри изолированного металла (металлического слоя) может отличаться от соответствующего потенциала в составной системе. При соприкосновении двух металлов часть электронов одного металла переходит в другой металл. Соответственно, с одной стороны мы получаем избыток электронов в одном металле, с другой стороны — недостаток электронов вблизи поверхности в другом металле. Подобное перераспределение зарядов между двумя проводниками приводит к возникновению запирающего слоя, препятствующего дальнейшему переходу электронов (так называемый двойной слой). Выражение для потенциала двойного слоя хорошо известно (см., например, [7]) и может быть выражено через разность работ выхода металлов:

$$\Delta\Phi = W_1 - W_2. \quad (31)$$

Для того чтобы учесть поправку на дополнительный потенциал $\Delta\Phi$, при численном расчете мы заменим потенциал изолированного металлического слоя Φ в (17) на $\Phi + \Delta\Phi$.

Таким образом, численный анализ проводился для следующей системы: в качестве металла 1 (слой ширины L) было взято серебро, в качестве металла 2 (полубесконечный металл) — натрий. Работа выхода и концентрация электронов проводимости для серебра: $W = 2.3 \text{ эВ}$ и $N_e = 2.5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$; для натрия — $W = 1.8 \text{ эВ}$ и $N_e = 0.85 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (данные взяты из работы [10]). На рис. 2–6 представлены зависимости полного тока термоэмиссии (20)–(22) из рассматриваемой составной системы как функции температуры, ширины слоя L и концентраций примеси в металле $N_p^{(M)}$ и в слое $N_p^{(s)}$ при различных значениях остальных параметров.

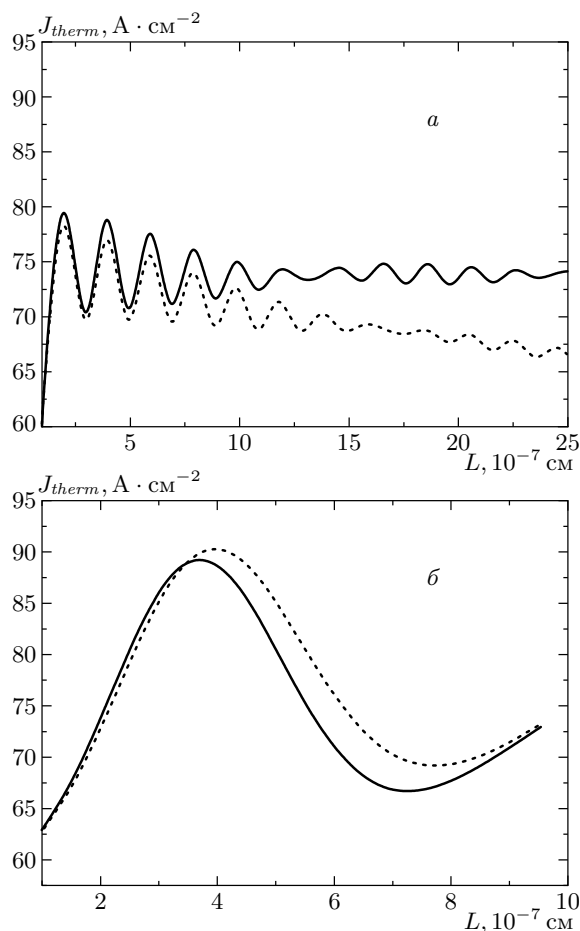


Рис. 2. Зависимости тока термоэмиссии J_{therm} от ширины слоя L при различных значениях концентрации примеси в слое: $N_p^{(s)} = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (сплошная кривая) и 10^{20} см^{-3} (пунктирная кривая), $T = 1500 \text{ К}$, концентрация примеси в металле $N_p^{(M)} = 10^{19}$ (а) и 10^{18} (б) см^{-3}

Для начала рассмотрим зависимость тока термоэмиссии J_{therm} от ширины металлического слоя L . Как следует из выражений (20)–(22), нам следует ожидать осциллирующую (с затухающей амплитудой, поскольку $\text{Im} \beta > 0$) зависимость тока термоэмиссии от ширины слоя благодаря наличию экспонент $\exp(\pm i\beta L)$ в подынтегральном выражении. Данное предположение подтверждается графиками, представленными на рис. 2а, б.

На рис. 2а показано поведение тока J_{therm} при достаточно больших ширинах L . Как видно из полученного графика, при увеличении ширины ямы L ток термоэмиссии асимптотически стремится к значению, равному току от нагретого металлического полупространства; причем скорость этой сходимости существенно зависит от концентрации примеси в

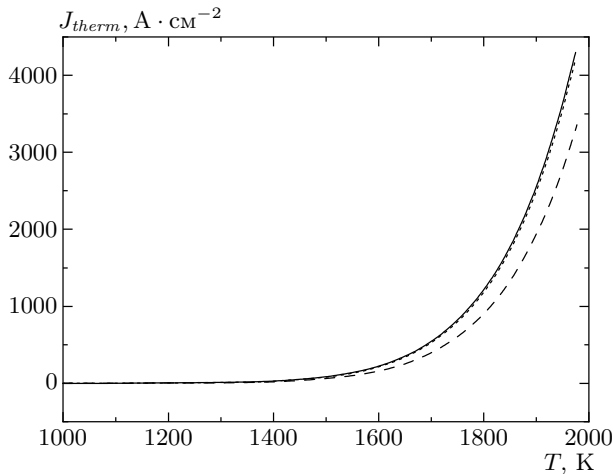


Рис. 3. Зависимости тока термоэмиссии от температуры при различных значениях концентрации примеси в металле $N_p^{(M)} = 10^{18}$ (сплошная кривая), 10^{19} (штриховая кривая), $10^{20} cm^{-3}$ (пунктирная кривая), ширина $L = 10^{-6}$ см, концентрация примеси в слое $N_p^{(s)} = 10^{19} cm^{-3}$

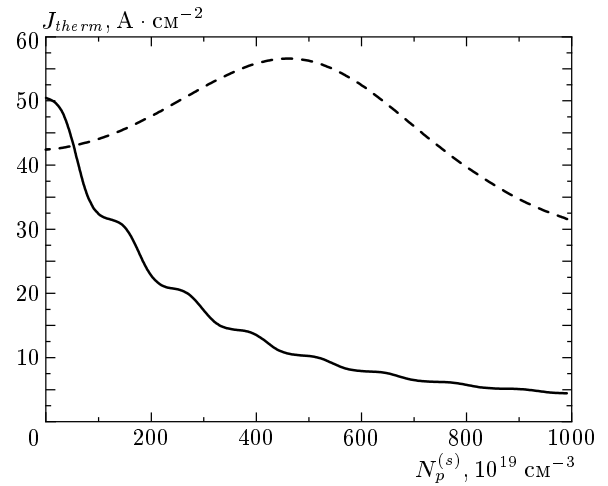


Рис. 4. Зависимости тока термоэмиссии от концентрации примеси в слое при различных значениях ширины слоя $L = 10^{-6}$ (сплошная кривая) и 10^{-7} (штриховая кривая) см, концентрация примеси в металле $N_p^{(M)} = 10^{20} cm^{-3}$, $T = 1500$ К

слое $N_p^{(s)}$. Действительно, согласно формуле (20), вероятность электрону из области $z > L$ пройти через металлический слой и оказаться в вакууме пропорциональна $\exp(-2 \text{Im} \beta L)$. Таким образом, увеличивая ширину слоя L или концентрацию примеси $N_p^{(s)}$ (напомним, что $\text{Im} \beta \propto N_p^{(s)}$, $\text{Im} \beta > 0$) мы, тем самым, уменьшаем вклад от полупространства $z > L$ и одновременно увеличиваем вклад области $0 < z < L$ (см. (21)). На рис. 2б показано, что изменение концентрации примеси в слое приводит к изменению периода и амплитуды осцилляций тока термоэмиссии благодаря наличию экспонент $\exp(\pm i \beta L)$, входящих в (20), (21).

На рис. 3 изображена зависимость тока термоэмиссии от температуры при различных значениях концентрации примеси в металле $N_p^{(M)}$. Как следует из приведенной зависимости, при достаточно высоких плотностях $N_p^{(M)} \sim 10^{20} cm^{-3}$ происходит отклонение от «классического» результата, соответствующего чрезвычайно низким концентрациям примесей и при высоких температурах переходящего в закон Ричардсона–Дэшмана (1). Аналогичная кривая может быть построена и для случая различных концентраций примеси в слое, где также показывается, что при достаточно высоких величинах $N_p^{(s)}$ происходит отклонение от классического результата.

На рис. 4 приведен график J_{therm} как функции $N_p^{(s)}$ для различных ширин L . Видно, что эта зависимость имеет осциллирующий характер. Природа

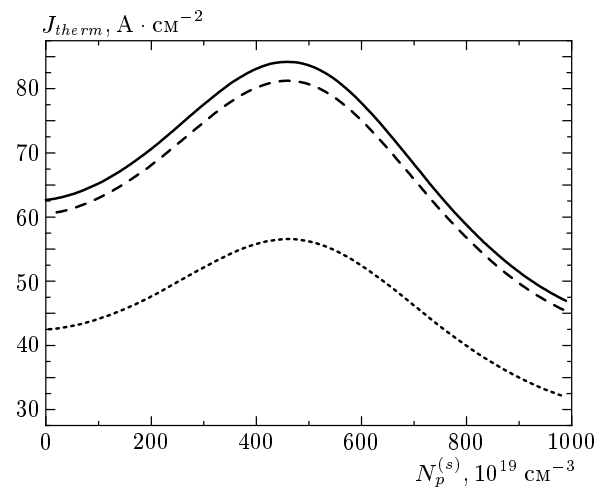


Рис. 5. Зависимости тока термоэмиссии от концентрации примеси в слое при различных значениях концентрации примеси в металле $N_p^{(M)} = 10^{18}$ (сплошная кривая), 10^{19} (пунктирная кривая), $10^{20} cm^{-3}$ (штриховая кривая) см⁻³, ширина $L = 10^{-7}$ см, концентрация примеси в слое $N_p^{(s)} = 10^{19} cm^{-3}$, $T = 1500$ К

этих осцилляций (так же, как и в случае с осцилляциями при изменении толщины слоя L) также связана с наличием экспонент $\exp(\pm i \beta L)$ в подынтегральных выражениях (20), (21). Как следует из рисунка, период и амплитуда этих осцилляций зависят от L .

На рис. 5 приведен аналогичный график зависи-

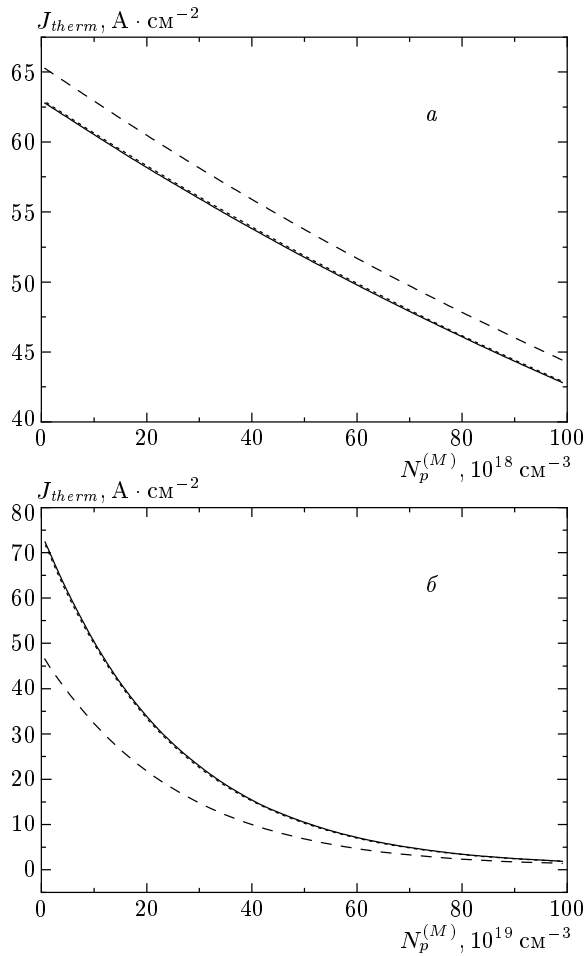


Рис. 6. Зависимости тока термоэмиссии от концентрации примеси в металле при различных значениях концентрации примеси в слое: *a* — $N_p^{(s)} = 10^{18}$ (штриховая кривая), 10^{19} (сплошная кривая), 10^{21} (пунктирная кривая) см^{-3} , $L = 10^{-7}$ см, $T = 1500$ К; *б* — $N_p^{(s)} = 10^{18}$ (сплошная кривая), 10^{20} (штриховая кривая), 10^{21} (пунктирная кривая) см^{-3} , $L = 10^{-6}$ см, $T = 1500$ К

мости тока термоэмиссии J_{therm} как функции концентрации примеси в слое $N_p^{(s)}$, но уже при различных концентрациях примеси в металле. Видно, что увеличение концентрации примеси в металле приводит к уменьшению амплитуды и периода осцилляций J_{therm} .

На рис. 6*а*, *б* приведены графики J_{therm} как функции плотности примеси в металле $N_p^{(M)}$ при различных значениях концентрации примеси в слое: для случая низких (рис. 6*а*) и высоких (рис. 6*б*) плотностей $N_p^{(M)}$. Как видно из рис. 6*а*, при низких плотностях примеси в металле полный ток термоэмиссии линейно убывает с ростом концентрации

$N_p^{(M)}$. С ростом $N_p^{(M)}$ эта кривая перестает быть линейной и приобретает более сложную форму (см. рис. 6*б*). Как уже было отмечено, увеличение концентрации примеси в слое уменьшает суммарный ток термоэмиссии.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перед тем как перейти к непосредственному обсуждению результатов, следует сказать несколько слов о случае одного металлического полупространства (без металлического слоя). Выражение для тока термоэмиссии в этом случае легко может быть найдено из полученных ранее уравнений (20)–(22), если положить $\beta = s$ и $n_0 = \Gamma_0 = 0$:

$$j_z^{therm} = j_z^+ = -\frac{4|e|}{\pi} \int_0^\infty dE n_+(E) \times \int \frac{d\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2} \frac{\text{Re } \beta \text{ Re } \alpha}{|\beta + \alpha|^2}. \quad (32)$$

Данное уравнение допускает наглядное физическое толкование. Величина $n_+(E)$ в подынтегральном выражении представляет собой функцию распределения электронов по энергиям. Второй интеграл в (32) есть не что иное, как вероятность электрону с энергией E покинуть металл.

Ранее нами было показано, что, благодаря наличию примесных ионов в металле, функция распределения электронов может существенно отличаться от классического распределения Ферми–Дирака. Введенная обобщенная функция распределения зависит от концентрации примеси в металле через величину сдвига Δ и конечных ширин Γ (см. (23)). Но, как видно из (32), в случае полупространства конечное выражение для тока не содержит явной зависимости от Δ и Γ . При этом ток термоэмиссии (32) зависит от концентрации примеси $N_p^{(M)}$ лишь через коэффициент отражения электронной волны от границы металла ρ (напомним, что $\text{Im } \alpha$ пропорциональна $N_p^{(M)}$). Как показал численный расчет по формуле (32), указанная зависимость является слабой. Таким образом, в случае одного полупространства мы можем ожидать хорошего согласия с классическим результатом Ричардсона–Дэшмана (1). Это было подтверждено проведенным численным анализом.

Таким образом, мы получили, что конечный ток термоэмиссии (32), испускаемый нагретым полупространством, слабо зависит от концентрации примеси в металле, что находится в хорошем согласии с классическим результатом (1), несмотря на то что функ-

ция распределения электронов может отличаться от фермиевской. Для того чтобы снять кажущееся противоречие, перепишем (32) в несколько ином виде, вводя обобщенную функцию распределения. Тогда при не слишком больших плотностях примесных ионов получаем

$$j_z^{therm} = -\frac{8|e|}{M} \int_0^\infty dE n_+(E) \int \frac{d\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2} \times \int_0^\infty \frac{dk_z}{2\pi} k_z \delta_\Gamma \left(E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + \mu_+ - U \right) (1 - \rho^2), \quad (33)$$

где мы ввели вспомогательную функцию

$$\delta_\Gamma(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2/4}.$$

Напомним, что U в (32) — обобщенный на случай присутствия примеси потенциал (см. (30)). Величина $1 - \rho^2$ определяет долю электронов, которые покидают металл, а ρ^2 — часть электронов, которые отражаются от границы металла. Заметим, что интеграл по dk_z равен

$$\int_0^\infty dk_z k_z \delta_\Gamma \left(\tilde{E} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M} \right) W(k_z) \propto \propto \int_0^\infty \frac{dE_{k_z} \Gamma}{\left(\tilde{E} - E_{k_z} \right)^2 + \Gamma^2/4} W(E_{k_z}) \approx \approx W(E) \int_0^\infty \frac{dE_{k_z} \Gamma}{\left(\tilde{E} - E_{k_z} \right)^2 + \Gamma^2/4} \approx 2\pi W(E),$$

где мы ввели обозначения

$$\tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2M} + \mu_+ - U, \quad W = 1 - \rho^2, \quad E_{k_z} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M}$$

и учли, что $\Gamma \ll \tilde{E}$ (это критерий, определяющий границы теории возмущений и, следовательно, приведенной выше теории), а также довольно слабую зависимость от k_z вероятности прохождения через границу $W = 1 - \rho^2$. В итоге мы получили, что в случае одного полупространства конечный ответ не содержит обобщенной функции распределения. Как результат, зависимость тока термоэмиссии от концентрации примеси в этом случае входит лишь через изменение коэффициента отражения ρ .

Теперь покажем, что в классическом пределе выражение для силы тока (32) переходит в закон Ричардсона–Дэшмана (1). Пренебрегая эффектами

надбарьерного отражения, мы можем записать упрощенное выражение для коэффициента отражения как

$$\rho = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M} < \Phi_0, \\ \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M} > \Phi_0. \end{cases} \quad (34)$$

Тогда выражение для силы тока (32) в классическом пределе упрощается до

$$j_z^{therm} = -\frac{MT^2}{2\pi^2} e \exp\left(-\frac{E_F - \Phi_0}{T}\right) = -\frac{MT^2}{2\pi^2} e \exp\left(-\frac{W}{T}\right).$$

Таким образом, в настоящей работе была предпринята попытка детального квантовомеханического анализа процессов в реальных металлах и сплавах при низких температурах. Были рассмотрены две системы: первая — составная система, состоящая из металлического слоя конечной толщины и полубесконечного металла, и вторая — более простая система, состоящая из полубесконечного металла без металлического слоя. В обоих случаях нас интересовало конечное выражение для тока термоэмиссии, испускаемого системой в вакуум. Мы считали, что как полубесконечный металл, так и слой могут содержать примеси. Поэтому особенный акцент был сделан на влияние примесей на функцию распределения электронов в металле. Как было показано, присутствие примеси может существенно изменить функцию распределения (напомним, что в модели свободных электронов без учета примеси это функция распределения Ферми для электронного газа с эффективной массой). При этом энергия и импульс электрона становятся независимыми переменными вследствие нарушения полем примеси поля идеальной решетки в металле и, тем самым, однородности пространства.

Было установлено, что в теории металла, содержащего примесь, возникают две новые величины, Γ и Δ , описывающие взаимодействие электронного газа с примесными ионами. Величина Γ определяет отражение электронных волн на примесных центрах и характеризует степень неопределенности импульса электрона при известной полной энергии. Величина Δ может рассматриваться как сдвиг энергии электрона под действием поля примеси. Заметим, что Δ и Γ не независимы, а связаны между собой соотношением, имеющим вид уравнения Крамерса–Кронинга (см. [6]).

Мы показали, что в случае одного нагретого металлического полупространства без слоя выражение для тока не содержит обобщенной функции распределения электронов и, следовательно, не содержит явно ширины Γ . Зависимость от концентрации примеси возникает лишь посредством изменения коэффициента отражения от границы и является чрезвычайно слабой. Как следствие, полученный результат находится в хорошем согласии с классической формулой Ричардсона–Дэшмана (1) в широком диапазоне температур, несмотря на то что функция распределения электронов в металле отличается от фермиевской.

Ситуация радикально меняется в случае более сложной системы, состоящей из плоскопараллельного металлического слоя и полубесконечного металла. Как было показано, ток термоэмиссии явно зависит от обобщенной функции распределения, учитывающей эффекты взаимодействия электронов с примесью через введенные ранее величины Γ и Δ . Найдено, что ток термоэмиссии из такой системы весьма чувствителен к концентрации примесей как в слое, так и в полубесконечном металле. Численный расчет показал, что указанная зависимость носит осциллирующий характер. Кроме того, было найдена осциллирующая зависимость тока термоэмиссии от ширины слоя. Таким образом, слой металла может играть роль резонатора для электронных волн, испускаемых полубесконечным металлом, тем самым усиливая или, наоборот, ослабляя (в зависимости от толщины) вклад в полный ток (22) от полубесконечного металла (20).

Необходимо сказать и о возможной практической пользе полученных результатов. Благодаря стремительному росту электронной индустрии, все больше ощущается потребность в компактных и надежных источниках электронного пучка заданной интенсивности (новые источники света, сверхтонкие мониторы высокой четкости и так далее). Результаты, полученные в настоящей работе, могут быть обобщены на случай, когда металлический слой конечной ширины представляет собой плазму, получаемую при облучении поверхности металла коротковолновым (пикосекундным) лазером. Становится возможным непосредственно влиять на ширину слоя металла и температуру поверхности, тем самым изменяя ток, испускаемый данной составной системой. Приведенные зависимости могут дать

ответ на вопрос, как изменится ток термоэмиссии при изменении интенсивности лазерного пучка. Также становится возможным измерять температуру плазмы, возникающей при облучении металла лазерным лучом. Можно указать путь для усовершенствования предложенной теории. Например, рассматривать слой и полубесконечный металл при различных температурах, исследуя, как кинетика электронов на границе двух металлов может повлиять на представленные здесь результаты (строго говоря, полученные в равновесном пределе).

Авторы выражают искреннюю признательность Н. В. Степановой за полезные советы и консультации. Работа выполнена при частичной поддержке гранта Президента Российской Федерации для поддержки ведущих научных школ НШ-1257.2003.2.

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Herring and M. H. Nichols, *Rev. Mod. Phys.* **21**, 185 (1949).
2. G. Baym and L. Kadanoff, *Quantum Statistical Mechanics. Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems*, W. A. Benjamin, Inc., New York (1962).
3. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1515 (1964).
4. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
5. A. N. Starostin, A. B. Mironov et al., *Physica A* **305**, 287 (2002).
6. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Наука, Москва (1962).
7. А. И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников*, Физматлит, Москва (1962).
8. A. N. Starostin, N. L. Alexandrov, A. B. Mironov, and M. V. Schipka, *Contrib. Plasma Phys.* **41**, 299 (2001).
9. V. M. Galitskii and V. V. Yakimets, *Zh. Exp. Teor. Fiz.* **51**, 957 (1966).
10. *Физические величины*, под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, Москва (1991).