

01,12

Энергия Ферми электронов в тонкой металлической пластине

© В.Д. Дымников

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Dymnik@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 6 июля 2010 г.

В окончательной редакции 27 октября 2010 г.)

Впервые получено строгое аналитическое выражение для энергии Ферми электронов в тонкой металлической пластине как функции толщины пластины при заданной концентрации электронов. Рассмотрение проведено с учетом размерного квантования в приближении свободных электронов при температуре $T = 0$.

Работа выполнена по Программе фундаментальных исследований Президиума РАН № 21 „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“.

1. Введение

В настоящее время актуальным является изучение тонких металлических слоев, нанесенных на подложки из различных материалов [1–5]. Выяснилось, что в таких случаях макроскопические характеристики — поверхностная энергия, работа выхода, поверхностная релаксация — зависят от толщины слоя, и эти зависимости имеют осцилляционный характер. Как показали авторы работ, в которых изучались осцилляционные зависимости характеристик металлической пластины от ее толщины, осцилляции связаны с эффектами размерного квантования [6–14]. С увеличением толщины слоя осцилляции ослабевают и пластина проявляет себя как объемный материал. Ряд авторов отмеченных работ природу наблюдаемых явлений объясняют результатами, полученными в классической работе Шульте [6], где в модели „желе“ решалась самосогласованная задача о поведении электронов в тонкой металлической пластине, помещенной в вакуум. В этой работе было показано, что размерное квантование приводит к тому, что указанные выше характеристики металла осциллируют с периодом, близким к половине длины волны Ферми $\frac{\lambda_F}{2}$, где $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$, k_F — волновое число Ферми. Следует отметить, что все расчеты в работе [6] выполнены численно и потому зависимости характеристик металлической пластины от ее толщины приведены только для некоторых значений длин волн λ_F . По этой причине выборочный характер значений λ_F в работе [6] затрудняет напрямую сравнение с наблюдаемыми данными, поскольку встречаются ситуации, отличающиеся от тех, которые рассчитывались в [6].

К сожалению, в настоящее время отсутствуют аналитические выражения отмеченных выше характеристик тонкого металлического слоя. Последнее обстоятельство послужило для автора настоящей работы побудительным мотивом для изучения такой модели металлической пластины, которая допускала бы аналитическое рассмотрение макроскопических характеристик с учетом размерного квантования. В качестве первого ша-

га рассматривается простейшая модель металлического слоя, помещенного в вакуум, в приближении вырожденных свободных электронов, находящихся при температуре $T = 0$ в одномерном ящике с бесконечными барьерами на границах. Автор понимает критику такого наивного подхода ввиду отсутствия самосогласованности, но, с другой стороны, как показано далее, предлагаемая модель позволяет получить строгие аналитические результаты для энергии Ферми E_F при заданной концентрации электронов как функции толщины пластины d . При этом характерный масштаб немонотонности изменения E_F оказывается близким к $\frac{\lambda_F}{2}$, как и в модели „желе“. У функции $E_F(d)$ участки немонотонности заключены между острыми максимумами. Очередной острый пик на графике $E_F(d)$ появляется на длине, на которой происходит погружение очередного уровня в квантовой яме под энергию Ферми E_F . Острота пика — квантовый эффект, и форма пика однозначно определяется номером поглощаемого уровня.

Отмеченные особенности в поведении энергии Ферми как функции толщины пластины получены в работе впервые.

2. Модель. Постановка задачи

Будем рассматривать тонкую металлическую пластину, ориентированную в пространстве так, что две параллельные бесконечные грани параллельны плоскости XU , а толщина пластины задается величиной d , которая откладывается по оси Z . Будем считать, что одна сторона пластины совпадает с плоскостью XU , т.е. задается уравнением $z = 0$, а другая, параллельная сторона, описывается уравнением $z = d$.

Предполагается, что толщина пластины d удовлетворяет условию размерного квантования, т.е. она сравнима с длиной волны де Бройля электрона в кристалле. В плоскости XU движение электрона предполагается инфинитным, а вдоль оси Z движение электрона опре-

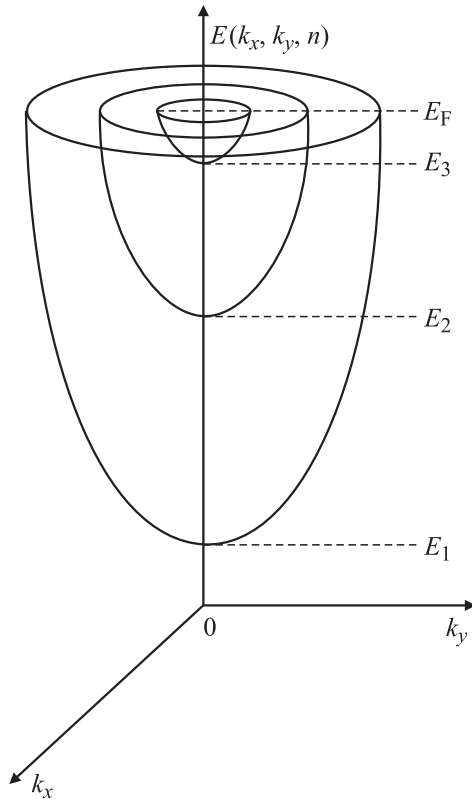


Рис. 1. Энергетический спектр двумерного электронного газа. Ниже энергии Ферми E_F заполнены состояния, относящиеся к подзонам с $n = 1, 2, 3$. Величина E_n — энергия дна n -й подзоны (8).

деляется потенциалом V_z

$$V(z) = \begin{cases} 0, & 0 < z < d, \\ \infty, & z \leq 0, \quad z \geq d. \end{cases} \quad (1)$$

В работе используются изотропный закон дисперсии и приближение эффективной массы. В описанной модели электроны представляют собой двумерный электронный газ (2D-электроны).

В такой 2D-системе нормированные волновые функции частиц можно записать в виде

$$\Psi_{\kappa_x, \kappa_y, n}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L_1}} \exp(ik_x x) \frac{1}{\sqrt{L_2}} \exp(ik_y y) \varphi_n(z). \quad (2)$$

Здесь $\kappa_x = \frac{2\pi}{L_1} n_1$, $\kappa_y = \frac{2\pi}{L_2} n_2$ — волновые числа, связанные с движением вдоль осей X и Y , L_1, L_2 — нормировочные длины, $n_1, n_2 = \text{целые числа}$. В рассматриваемой модели $L_1, L_2 \gg d$.

Нормированные функции $\varphi_n(z)$ в (2) в соответствии с (1) записываются в виде

$$\varphi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{n\pi z}{d}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

Энергии электронов, соответствующие состояниям (2), будут

$$E(\kappa_x, \kappa_y, n) = \frac{\hbar^2}{2m} (\kappa_x^2 + \kappa_y^2) + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2}. \quad (4)$$

Здесь и далее энергия отсчитывается от дна зоны проводимости объемного материала, m — эффективная масса. Энергетический спектр двумерного электронного газа приведен на рис. 1.

Из (4) и рис. 1 видно, что энергетический спектр 2D-системы разбивается на отдельные двумерные перекрывающиеся подзоны, характеризуемые числом n . Для простоты считаем эффективную массу m во всех подзонах одинаковой.

Температура кристалла T полагается равной нулю, так что электронный газ с учетом спина заполняет все уровни до энергии Ферми E_F включительно. Как показано далее, в постулируемой модели можно выполнить строго все вычисления и получить аналитическое выражение для энергии E_F как функции толщины слоя d .

3. Энергия Ферми 2D-электронного газа

Установим связь между концентрацией $n(x, y, z)$ электронов в рассматриваемой пластине и энергией Ферми. Очевидно,

$$n(x, y, z) = 2 \sum_{\kappa_x, \kappa_y, n} |\Psi_{\kappa_x, \kappa_y, n}(x, y, z)|^2. \quad (5)$$

Множитель 2 учитывает спин.

Подставляя в (5) выражения (2), (3) и учитывая, что переход от суммирования к интегрированию по k_x, k_y имеет простой вид

$$\sum_{\kappa_x, \kappa_y} \rightarrow \frac{L_1 L_2}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y,$$

получаем

$$\begin{aligned} N &= \iiint n(x, y, z) dx dy dz \\ &= 2 \sum_{\kappa_x, \kappa_y, n} \int |\Psi_{\kappa_x, \kappa_y, n}(x, y, z)|^2 dx dy dz = 2 \sum_{\kappa_x, \kappa_y, n} 1 \\ &= 2 \sum_n \frac{L_1 L_2}{(2\pi)^2} \int_{(n)} dk_x dk_y = 2 \sum_n \frac{L_1 L_2}{(2\pi)^2} \pi \kappa_{\perp n}^2. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь N — полное число электронов в нормировочном объеме пластины, символ $\int_{(n)}$ означает интегрирование в n -й подзоне, $\kappa_{\perp n}$ — максимально возможное волновое

число в n -й подзоне, определяемое из уравнения

$$\frac{\hbar^2 \kappa_{\perp n}^2}{2m} + E_n = E_F, \quad (7)$$

E_n — энергия электрона на дне n -й подзоны

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2}. \quad (8)$$

Мы будем полагать, что энергия Ферми удовлетворяет условию

$$E_N \leq E_F \leq E_{N+1}, \quad (9)$$

где N — максимальный номер подзоны, расположенной ниже энергии Ферми. Введем среднюю плотность электронов n_0 внутри пластины

$$n_0 = \frac{N}{L_1 L_2 d}. \quad (10)$$

Из выражений (6)–(10) можно получить

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{1}{2\pi d} \sum_n \kappa_{\perp n}^2 = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n (E_F - E_n) \\ &= \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \sum_n \left(E_F - E_N \frac{n^2}{N^2} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Суммирование в (11) производится по всем заполненным подзонам внутри E_F , т.е. от 1 до N включительно. Это суммирование тривиально, поскольку

$$\sum_{n=1}^N 1 = N, \quad \sum_{n=1}^N n^2 = \frac{N(N+1)(2N+1)}{6}.$$

В итоге концентрация n_0 имеет вид

$$n_0 = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} N \left(E_F - E_N \frac{N(N+1)(2N+1)}{6N^3} \right). \quad (12)$$

Если принять, что концентрация электронов n_0 имеет объемный характер, т.е.

$$n_0 = \frac{8\pi}{3\lambda_F^3}, \quad (13)$$

и в глубине кристалла, где размерное квантование несущественно, энергия Ферми E_F^0 дается соотношением

$$E_F^0 = 2\pi^2 \frac{\hbar^2}{m\lambda_F^2}, \quad (14)$$

где λ_F — длина волны Ферми, то из (12) можно получить выражение

$$\begin{aligned} E_F &= E_F^0 \Phi(N, x), \\ \Phi(N, x) &= \frac{4}{3} \left[\frac{1}{N} x + \frac{1}{32} \frac{(N+1)(2N+1)}{x^2} \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

В формуле (15) введена безразмерная длина $x = \frac{d}{\lambda_F}$. Следует помнить, что выражение (15) справедливо при выполнении условия (9).

Формула (15) является строгим выражением для энергии Ферми 2D-вырожденного электронного газа заданной концентрации с учетом размерного квантования как функции толщины пластины x и числа дискретных заполненных уровней в квантовой яме N .

4. Анализ зависимости энергии Ферми от толщины квантовой ямы

Выражение (15) устанавливает связь между энергией Ферми, концентрацией электронов, числом N занятых подзон для пластины определенной толщины. Этой же толщине соответствуют энергии E_N, E_{N+1} в неравенстве (9). В единицах энергии Ферми объемного материала E_F^0 энергии E_N, E_{N+1} записываются в виде

$$E_N = E_F^0 \frac{N^2}{4x^2}, \quad E_{N+1} = E_F^0 \frac{(N+1)^2}{4x^2}. \quad (16)$$

Тогда неравенство (9) с учетом (15), (16) можно записать как

$$\frac{N^2}{4x^2} \leq \Phi(N, x) \leq \frac{(N+1)^2}{4x^2}. \quad (17)$$

Теперь мы переходим к изучению зависимости энергии Ферми от толщины квантовой ямы. Нас будут интересовать изменение энергии Ферми E_F при изменении толщины пластины x при постоянной концентрации электронов n_0 (длине волны λ_F). С увеличением длины x уровни энергии E_n в каждой подзоне опускаются вниз, погружаясь под уровень Ферми. Пусть длина x_N соответствует условию $E_F(x_N) = E_N(x_N)$, а при длине x_{N+1} уровень Ферми совпадает с энергией $E_{N+1}(x_{N+1})$. Нас будет интересовать поведение функции $E_F(x)$, когда толщина x меняется в промежутке

$$x_N \leq x \leq x_{N+1}. \quad (18)$$

Очевидно, величины x_N и x_{N+1} находятся из условия (17).

Длина x_N находится из решения уравнения

$$\frac{N^2}{4x^2} = \Phi(N, x), \quad (19)$$

а толщина x_{N+1} есть решение уравнения

$$\Phi(N, x) = \frac{(N+1)^2}{4x^2}. \quad (20)$$

Решая уравнения (19), (20), получаем

$$x_N = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{N(N-1)(4N+1)}{4}}, \quad (21)$$

$$x_{N+1} = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{(N+1)N(4N+5)}{4}}. \quad (22)$$

Мы видим, что решение (22) получается из (21) заменой $N \rightarrow N+1$, как и должно быть. Здесь следует сделать важное замечание, что толщина пластины x отсчитывается от величины $x_1 = 0$ (21), соответствующей дну нижней подзоны E_1 . Кристалл начинает формироваться только при $x > x_1$ за счет заполнения инфинитных состояний в нижней подзоне. Энергия Ферми E_F при $x = 0$ смысла не имеет.

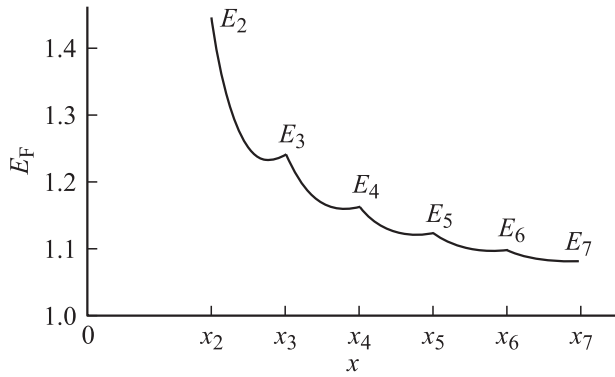


Рис. 2. Зависимость энергии Ферми E_F (15) от толщины слоя в промежутке $x_2 \leq x \leq x_7$. Пики на графике в точках x_N (21) соответствуют поглощаемым уровням энергии E_N (25) в квантовой яме с увеличением толщины. Все величины приведены в относительных единицах: энергии — в единицах E_F^0 , длины — в единицах λ_F .

Рассматривая поведение функции $E_F(x)$ (15) внутри промежутка (18), мы приходим к выводу, что в этой области величина $E_F(x)$ меняется немонотонно. При $x = x_N$ $E_F = E_N$, затем E_F уменьшается, проходя через минимум в точке

$$(x_N)_{\min} = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{N(N+1)(2N+1)}{2}}, \quad (23)$$

принимая в этой точке значение

$$(E_F)_{\min} = E_F^0 \sqrt[3]{\frac{(N+1)(2N+1)}{2N^2}}, \quad (24)$$

затем E_F возрастает и в точке $x = x_{N+1}$ $E_F = E_{N+1}$. Во всем промежутке изменения величины x (18) имеет место неравенство (17).

В точках $x = x_N$ функция E_F имеет острые максимумы и ее значения в этих точках таковы

$$E_F(x_N) = E_N(x_N) = E_F^0 \left[\frac{4N^2}{(N-1)(4N+1)} \right]^{\frac{2}{3}}, \quad (25)$$

$$N = 2, 3, \dots$$

Функция $E_F(x_N)$ монотонно убывает с увеличением номера N и при $N \rightarrow \infty$ $E_F \rightarrow E_F^0$. На рис. 2 приведен график функции $E_F(x)$ в промежутке $x_2 \leq x \leq x_7$.

5. Обсуждение результатов

Представляет интерес немонотонный характер изменения энергии E_F с толщиной пластины. Из формулы (17) следует, что расстояние между двумя соседними пиками, когда $E_F = E_N$ и $E_F = E_{N+1}$, равно

$$x_{N+1} - x_N = \frac{1}{2} + \frac{7}{96N^2} + o\left(\frac{1}{N^2}\right), \quad (26)$$

т.е., начиная с небольших чисел N , повторяемость острых пиков происходит на расстоянии порядка $\frac{\lambda_F}{2}$.

Этот результат совпадает с численным результатом работы [6]. Аналогичным образом из (18) получаем, что минимумы в зависимости E_F от толщины повторяются через расстояния

$$(x_{N+1})_{\min} - (x_N)_{\min} = \frac{1}{2} + \frac{1}{24N^2} + o\left(\frac{1}{N^2}\right), \quad (27)$$

т.е. соседние минимумы отстоят друг от друга также на расстоянии порядка $\frac{\lambda_F}{2}$. Из формул (17), (18) следует, что относительное расположение значения $E_F[(x_N)_{\min}]$ определяется соотношением

$$\frac{x_{N+1} - (x_N)_{\min}}{(x_N)_{\min} - x_N} = \frac{1}{4N} + o\left(\frac{1}{N}\right). \quad (28)$$

По мере увеличения толщины пластины (роста N) положение $E_F[(x_N)_{\min}]$ смещается в сторону x_{N+1} . В формулах (26)–(28) символ $o(x)$ означает бесконечно малую величину более высокого порядка малости по сравнению с x , т.е. $\frac{o(x)}{x} \rightarrow 0$, если $x \rightarrow 0$.

Следует отметить, что роль параметра $\frac{\lambda_F}{2}$ в формировании периодичности макроскопических характеристик металлического слоя отмечалась ранее в работах [6–9], где проводились численные расчеты.

В табл. 1, 2 приведено несколько значений энергии Ферми в точках максимума и минимума в единицах E_F^0 (25), (24). По этим значениям можно судить о быстроте спада с увеличением толщины слоя величин $E_F(x_N)$ и $E_F[(x_N)_{\min}]$.

Представляет интерес информация, которую можно извлечь из анализа острых пиков на графике функции $E_F(x)$ (рис. 2). Как увидим далее, форма пика однозначно связана с номером подзоны, которой пик соответствует. Для выяснения этого вопроса мы не будем исходить формально из выражения (15), а выведем уравнение для производной $\frac{\partial E_F}{\partial x}$, опираясь на прозрачный физический смысл. Из выражений (10), (11) следует, что плотность занятых состояний $\sigma(x)$ на единицу площади боковой

Таблица 1. Максимальные значения энергии Ферми E_F в единицах E_F^0 в точках x_N , где $E_F(x_N) = E_N(x_N)$

N	$\frac{E_F(x_N)}{E_F^0}$
2	1.467
3	1.242
4	1.163
5	1.123
6	1.099
7	1.083
8	1.071
9	1.062
10	1.055
...	...
20	1.026

Таблица 2. Минимальные значения энергии Ферми E_F в единицах E_F^0 (номер N означает, что минимум реализуется в промежутке $x_N \leq x \leq x_{N+1}$)

N	$\frac{(E_F)_{\min}}{E_F^0}$
1	1.442
2	1.233
3	1.159
4	1.120
5	1.097
6	1.081
7	1.070
8	1.061
9	1.055
10	1.049
...	...
20	1.025

поверхности в пластине толщиной x записывается в виде

$$\sigma(x) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_{n=1}^N (E_F(x) - E_n(x)) = \int_0^{E_F} g(E, x) dE. \quad (29)$$

Здесь $g(E, x)$ — плотность состояний на единицу энергии и на единицу площади боковой поверхности слоя. В соответствии с (29)

$$g(E, x) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n(x)), \quad (30)$$

где

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (31)$$

Функция $g(E, x)$ является ступенчатой функцией энергии, ее график приведен на рис. 3. В формуле (29) предполагается выполненным условие (9). При увеличении толщины пластины $x \rightarrow x + \Delta x$ энергии зон в квантовой яме опускаются и в материале образуются дополнительные квантовые уровни, которые заполняются новыми электронами. В результате формируется новое значение энергии Ферми $E_F(x + \Delta x)$. Прирост новых заполненных состояний на длине Δx соответствует появлению новых частиц на этой же длине

$$\sigma(x + \Delta x) - \sigma(x) = \frac{1}{2} n_0 \lambda_F \Delta x. \quad (32)$$

Множитель $\frac{1}{2}$ в правой части (32) учитывает спин электрона.

Из выражений (29) и (32) следует интегриродифференциальное уравнение для функции $E_F(x)$

$$\begin{aligned} \frac{\sigma(x + \Delta x) - \sigma(x)}{\Delta x} &= \frac{\partial}{\partial x} \sigma(x) \\ &= g(E_F, x) \frac{\partial E_F}{\partial x} + \int_0^{E_F(x)} \frac{\partial}{\partial x} g(E, x) dE = \frac{1}{2} n_0 \lambda_F. \end{aligned} \quad (33)$$

Из (30) следует

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} g(E, x) &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_n \delta(E - E_n) \left(-\frac{\partial E_n}{\partial x} \right) \\ &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_n \delta(E - E_n) E_F^0 \frac{n^2}{2x^3}. \end{aligned} \quad (34)$$

Здесь $\delta(x)$ — δ -функция Дирака.

Подставляя (34) в (33) и учитывая условие (9), получаем дифференциальное уравнение для функции $E_F(x)$

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} N \frac{\partial E_F}{\partial x} = \frac{1}{2} n_0 \lambda_F - \frac{m}{2\pi\hbar^2} E_F^0 \frac{1}{2x^3} \frac{N(N+1)(2N+1)}{6}. \quad (35)$$

При выводе этого выражения был использован тот же результат суммирования, что и в формуле (12).

Уравнение (35) имеет прозрачный физический смысл. Если при увеличении толщины пластины $x \rightarrow x + \Delta x$ число возникших новых состояний с энергиями, меньшими $E_F(x)$, больше половины числа поступивших новых электронов на той же длине Δx , то правая часть уравнения (35) будет отрицательна, производная $\frac{\partial E_F}{\partial x}$ будет меньше нуля и новый уровень Ферми $E_F(x + \Delta x)$ сформируется ниже $E_F(x)$. В противоположном случае среди занятых уровней будут состояния с энергиями больше $E_F(x)$, и новый уровень Ферми $E_F(x + \Delta x)$ будет располагаться выше $E_F(x)$. В последнем случае $\frac{\partial E_F}{\partial x} > 0$.

Выражая концентрацию электронов через объемное значение энергии Ферми с помощью формул (13), (14), получаем

$$\frac{1}{2} n_0 \lambda_F = \frac{4}{3} \frac{m}{2\pi\hbar^2} E_F^0. \quad (36)$$

С учетом (36) уравнение (35) записывается в виде

$$N \frac{\partial E_F}{\partial x} = \frac{4}{3} E_F^0 \left[1 - \frac{N(N+1)(2N+1)}{16x^3} \right]. \quad (37)$$

Как и следовало ожидать, значение x , при котором правая часть уравнения (37) обращается в нуль, в

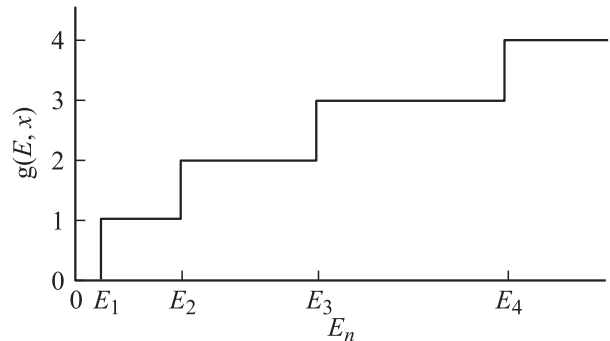


Рис. 3. Зависимость плотности состояний $g(E, x)$ (30) при постоянной толщине x от энергии E . По оси абсцисс отложены значения E_n (8). По оси ординат значения g приведены в единицах $g_0 = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$.

точности соответствует выражению $(x_N)_{\min}$ (23), полученному ранее. Уравнение (37) справедливо в области значений x (18).

С помощью выражения (37) легко получить выражение для скачка производной $\frac{\partial E_F}{\partial x}$ в точке $x = x_{N+1}$. Из (37) следуют равенства

$$N \frac{\partial E_F}{\partial x} (x_{N+1} - 0) = \frac{4}{3} E_F^0 \left[1 - \frac{N(N+1)(2N+1)}{16x_{N+1}^3} \right], \quad (38)$$

$$(N+1) \frac{\partial E_F}{\partial x} (x_{N+1} + 0) = \frac{4}{3} E_F^0 \left[1 - \frac{(N+1)(N+2)(2N+3)}{16x_{N+1}^3} \right]. \quad (39)$$

Подставляя в (38), (39) значение x_{N+1} (22), получаем

$$\frac{\partial E_F}{\partial x} (x_{N+1} - 0) = \frac{4E_F^0}{N(4N+5)}, \quad (40)$$

$$\frac{\partial E_F}{\partial x} (x_{N+1} + 0) = -\frac{4E_F^0(3N+4)}{N(N+1)(4N+5)}. \quad (41)$$

Из полученных формул видно, что левая производная (40) в точке $x = x_{N+1}$ положительна. Это означает, что с увеличением толщины пластины перед погружением уровня E_{N+1} ниже энергии Ферми число электронов растет быстрее числа дополнительных уровней. После погружения уровня E_{N+1} ниже энергии Ферми происходит скачок в плотности состояний $g(E, x)$ (30) (рис. 3), что приводит к увеличению темпа роста числа свободных состояний по сравнению с темпом роста числа поступающих новых электронов. Последнее обстоятельство понижает энергию Ферми, и поэтому правая производная $\frac{\partial E_F}{\partial x} (x_{N+1} + 0) < 0$.

Из соотношений (40), (41) следует выражение для скачка производной от энергии Ферми в точке $x = x_{N+1}$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial E_F}{\partial x} (x_{N+1} + 0) - \frac{\partial E_F}{\partial x} (x_{N+1} - 0) \\ &= -\frac{4E_F^0}{N(N+1)}, \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (42) \end{aligned}$$

Погружение очередного уровня в квантовой яме под энергию Ферми проявляется в скачке производной от функции E_F в точке погружения. Наличие острых пиков в зависимости энергии Ферми от толщины пластины обусловлено проявлением существенно квантовых эффектов.

6. Заключение

Автор надеется, что полученные теоретические сведения о зависимости энергии Ферми от толщины слоя в рассмотренной простой модели позволят судить в дальнейшем о влиянии размерного квантования на макроскопические характеристики металлических пластин,

зависящие от энергии Ферми. В частности, сравнение полученных теоретических сведений с экспериментальными данными о работе выхода позволит качественно судить о зависимости потенциала двойного слоя от толщины пластины, что будет полезным в будущем при построении теории двойного слоя в тонких металлических материалах.

Автор благодарит А.А. Клочихина и С.Г. Пржибельского за полезные обсуждения результатов работы, М.А. Митцева за ознакомление с литературой, Д.В. Дымникова за компьютерную помощь в оформлении статьи.

Список литературы

- [1] К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин, А.В. Зотов, М. Катаяма. Введение в физику поверхности. Наука, М. (2006). 490 с.
- [2] Д.В. Бутурович, Д.В. Вялых, М.В. Кузьмин, М.А. Митцев. ФТГ **48**, 1890 (2006).
- [3] Д.В. Бутурович, М.А. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. ФТГ **50**, 168 (2008).
- [4] J.-H. Chou, Q. Niu, Z. Zhang. Phys. Rev. Lett. **80**, 3582 (1998).
- [5] K.P. Bohnen, K.M. Ho. Surf. Sci. Rep. **19**, 99 (1993).
- [6] F.K. Schulte. Surf. Sci. **55**, 427 (1976).
- [7] A. Kiejna, J. Peisert, P. Scharoch. Surf. Sci. **432**, 54 (1999).
- [8] P.J. Feibelman. Phys. Rev. B **27**, 1991 (1983).
- [9] P.J. Feibelman, D.R. Hamann. Phys. Rev. B **29**, 6463 (1984).
- [10] S. Ciraci, I.P. Batra. Phys. Rev. B **33**, 4294 (1986).
- [11] I.P. Batra, S. Ciraci. G.P. Srivastava, J.S. Nelson, C.Y. Fong. Phys. Rev. B **34**, 8246 (1986).
- [12] J.C. Boettger, U. Brikenheuer, N. Rösch, S.B. Trickey. Int. J. Quant. Chem. Symp. **28**, 675 (1994).
- [13] J.C. Boettger. Phys. Rev. B **53**, 13 133 (1996).
- [14] K.M. Ho, K.P. Bohnen. Phys. Rev. B **32**, 3446 (1985).