

# РАЗДЕЛ II. ФИЗИКА

---

УДК 533.72:535.3:539.1

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-1-50-56

## ЗЕРКАЛЬНО-ДИФFUЗНЫЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА С УЧЁТОМ ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ

**Каримов Ф. А., Юшканов А. А.**

*Московский государственный областной университет  
141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская  
Федерация*

**Аннотация.** Целью статьи является разработка модели зеркально-диффузных граничных условий для электронов на поверхности металла, обобщающей модели Фукса и Соффера.

**Процедура и методы исследования.** За основу модели принимаются зеркально-диффузные граничные условия. При этом принимается во внимание возможная зависимость коэффициента зеркальности от угла падения электронов на поверхность.

**Результаты проведённого исследования.** Предложенные граничные условия удовлетворяют условию Андреева на коэффициент зеркальности при почти касательном падении электронов на поверхность. Они также в предельном случае воспроизводят известные зеркально-диффузные граничные условия Фукса.

**Теоретическая/практическая значимость** заключается в том, что предложенную модель можно использовать для описания кинетических процессов вблизи поверхности металла, в тонких плёнках, проволоках, в мелких металлических частицах и при описании скин-эффекта в металле.

**Ключевые слова:** граничные условия, коэффициент зеркальности, угол падения, кинетические процессы.

## MIRROR-DIFFUSE BOUNDARY CONDITIONS FOR ELECTRONS ON A METAL SURFACE TAKING INTO ACCOUNT THE DEPENDENCE ON THE INCIDENCE ANGLE

**F. Karimov, A. Yushkanov**

*Moscow Region State University  
ul. Very Voloshinoy 24, 141014 Mytishchi, Moscow region, Russian Federation*

---

© СС ВУ Каримов Ф. А., Юшканов А. А., 2020.

**Abstract. Purpose.** We have developed a model of mirror-diffuse boundary conditions that satisfy the Fuchs and Soffer models.

**Methodology and Approach.** The model is based on mirror-diffuse boundary conditions. In this case, the possible dependence of the specular coefficient on the angle of incidence of the electron on the surface is taken into account.

**Results.** The proposed boundary conditions satisfy the Andreev reflection coefficient with an almost tangent incidence of the electrons on the surface. In the limiting case they also reproduce the known mirror-diffuse Fuchs boundary conditions.

**Theoretical and Practical Implications.** The proposed model satisfies all known models. This model can be used to describe kinetic processes near the surface of a metal, in thin films, wires, in small metal particles, and when describing the size effect in a metal.

**Keywords:** boundary conditions, specular coefficient, angle of incidence, kinetic process, size effect.

## Введение

Граничные условия для электронов в металле имеют большое значение для описания кинетических процессов в металле вблизи поверхности [1]. Граничные условия определяют ход процессов в скин-эффекте [1; 3–5], в явлениях переноса в тонких плёнках и проволоках [7; 11]. Задача о скин-эффекте является одной из наиболее важных задач в электродинамике металлов [1; 5; 6; 11].

В настоящее время при рассмотрении кинетических процессов в металле широко используется модель зеркально-диффузных граничных условий Фукса. В этой модели коэффициент зеркальности при отражении электронов от поверхности металла считается постоянным, не зависящим от угла падения. Модель, учитывающая такую зависимость, была предложена Соффером [12]. В работе Соффера была учтена зависимость коэффициента зеркальности от шероховатости поверхности металла при некоторых модельных предположениях. Однако данная модель не удовлетворяет условию Андреева [2] при углах падения электронов на поверхность, близких к касательным. В настоящей работе предложена модель граничных условий, удовлетворяющих условию Андреева. При этом предложенная модель при некоторых условиях близка к граничным условиям Фукса и Соффера.

## Формулировка граничных условий

Чаще всего для анализа кинетических процессов вблизи поверхности металла используются зеркально-диффузные граничные условия Фукса [10]. При этом предполагается, что при столкновении с поверхностью электроны могут рассеиваться как зеркально, так и диффузно. Вероятность зеркального отражения обозначается  $q$ . Вероятность диффузного рассеяния равна  $1 - q$ . Величину  $q$  называют коэффициентом зеркальности, а величину  $1 - q$  коэффициентом диффузности. Коэффициент зеркальности меняется в пределах  $0 < q < 1$ .

Обозначим функцию распределения электронов через  $f$ . Введём систему координат с центром на поверхности металла, ось  $x$  проведём перпендикулярно поверхности вглубь металла. Тогда, согласно зеркально-диффузным граничным

условиям Фукса на границе металла (при  $x = 0$ ), имеет место следующее соотношение [1; 8–11]:

$$f(x=0, v_x)_{v_x>0} = (1-q)f_0 + qf(x=0, -v_x)_{v_x<0}.$$

В зеркально-диффузных граничных условиях Фукса предполагается, что коэффициент зеркальности является постоянной величиной и не зависит от угла падения электронов на поверхность. Данные граничные условия используются для описания широкого круга явлений [11]. В то же время предположения, в рамках которых сформулированы эти граничные условия, не всегда выполняются. Была предпринята попытка обобщения зеркально-диффузных граничных условий Фукса на случай, когда коэффициент зеркальности зависит от угла падения электрона на поверхность [12]. Согласно граничным условиям Соффера коэффициент зеркальности следующим образом зависит от угла падения электронов на поверхность  $\theta$ :

$$g(\theta) = \exp\left(-\left(4\pi g \cos\theta\right)^2\right).$$

Величина  $g$  определяется следующим соотношением:

$$g = \frac{g_s}{\lambda_F}.$$

Здесь  $g_s$  – среднеквадратичная высота поверхностного рельефа,  $\lambda_F$  – длина волны де Бройля электрона на поверхности Ферми. Параметр  $g$  является эмпирическим, подгоночным коэффициентом в данной модели, так как его расчет из микроскопических данных в реальных случаях невозможен.

В случае почти касательного падения электронов на поверхность  $\cos\theta \ll 1$ . Поэтому для величины  $g(\theta)$  в модели граничных условий Соффера имеем:

$$g(\theta) = 1 - \left(4\pi g \cos\theta\right)^2.$$

То есть

$$1 - g(\theta) \sim \cos^2\theta.$$

В то же время в работе [2] показано, что при почти касательном падении электронов на поверхность должно выполняться условие:

$$1 - g(\theta) \sim v_x \sim \cos\theta.$$

Отсюда следует, что модель Соффера нуждается в коррекции. Кроме того, модель Соффера не обеспечивает в некотором пределе переход к хорошо зарекомендовавшей себя модели граничных условий Фукса. Это создаёт трудности при сравнении результатов, полученных с применением этих двух моделей

Рассмотрим следующую феноменологическую модель зеркально-диффузных граничных условий. Будем аппроксимировать зависимость коэффициента зеркальности от угла падения электронов  $\theta$  следующей функцией:

$$q(\theta) = q_0 + (1 - q_0) \exp(-b_1 \cos \theta - b_2 \cos^2 \theta).$$

Здесь  $b_1$  и  $b_2$  некоторые положительные коэффициенты.

В случае, когда  $b_1 \gg 1$  и  $b_2 \gg 1$  имеем  $q(\theta) = q_0$ . Таким образом, мы переходим к модели Фукса с независящим от угла падения коэффициентом зеркальности. Когда  $q_0 = 0$ , а  $b_1 \ll b_2$  для почти всех углов падения данная модель переходит в модель Соффера. При промежуточных значениях параметров предложенная модель предлагает интерполяцию между известными моделями. При этом предложенная модель удовлетворяет условию Андреева [2] и при углах  $\theta$ , близких к  $\pi/2$ , имеем:

$$q(\theta) = 1 - (1 - q_0) b_1 \cos \theta.$$

На рис. 1 представлены зависимости коэффициента зеркальности  $q$  от угла падения  $\theta$  электронов на поверхность металла при различных значениях параметра  $b_1$ .

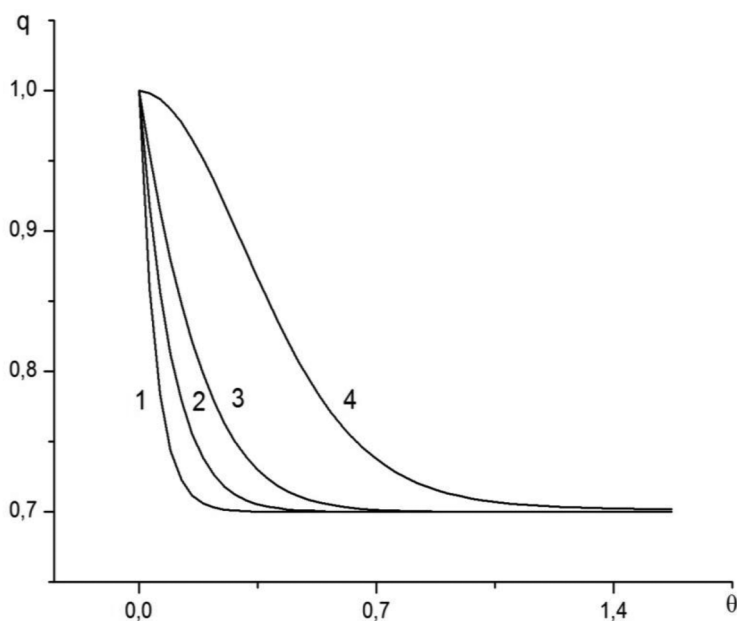


Рисунок 1 / Figure 1

Зависимость коэффициента зеркальности  $q$  от угла падения  $\theta$  электронов на поверхность.

Dependence of the specularity coefficient  $q$  on the angle  $\theta$  of electron incidence on the surface.

Источник: подготовлен авторами с помощью математического приложения Mathcad.

Величина  $b_2 = 5$ ,  $q_0 = 0,7$ . Кривая 1 соответствует  $b_1 = 20$ . Кривая 2 соответствует  $b_1 = 10$ . Кривая 3 соответствует  $b_1 = 5$ . Кривая 4 соответствует  $b_1 = 0$ .

Видно, что по мере уменьшения параметра  $b_1$  предложенная модель граничных условий всё в большей степени соответствует модели Фукса.

### Заключение

Предложенная модель граничных условий удовлетворяет всем необходимым требованиям и позволяет единым образом представить все известные модели. Она может быть использована для описания кинетических процессов вблизи поверхности металла. Это могут кинетические процессы в тонких плёнках, проволоках, в мелких металлических частицах. Также она может быть использована при описании скин-эффекта в металле.

*Статья поступила в редакцию 11.12.2019 г.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Абрикосов А. А. Основы теории металла. М.: Наука, 1977. 520 с.
2. Андреев А. Ф. Взаимодействие проводящих электронов с поверхностью металла // Успехи физических наук. 1971. Т. 105. Вып. 1. С. 114–123.
3. Кузнецова И. А., Романов Д. Н., Юшканов А. А. Расчёт высокочастотной электропроводности тонкого металлического слоя в случае эллипсоидальной поверхности Ферми // Микроэлектроника. 2018. Т. 47. № 3. С. 226–237.
4. Кузнецова И. А., Савенко О. В., Юшканов А. А. Влияние граничных условий на электропроводность тонкой цилиндрической проволоки // Микроэлектроника. 2016. Т. 45. № 2. С. 126–134.
5. Латышев А. В., Юшканов А. А. Решение задачи о скин-эффекте с произвольным коэффициентом зеркальности // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2009. Т. 49. № 1. С. 137–151.
6. Латышев А. В., Юшканов А. А. Взаимодействие электромагнитной Н-волны с тонкой металлической пленкой // Микроэлектроника. 2012. Т. 41. № 1. С. 30–35.
7. Уткин А. И., Юшканов А. А. Влияние коэффициентов зеркальности на взаимодействие электромагнитной Е-волны с тонкой металлической пленкой, расположенной между двумя диэлектрическими средами // Оптика и спектроскопия. 2018. Т. 124. Вып. 2. С. 250–254.
8. Уткин А. И., Завитаев Э. В., Юшканов А. А. Расчёт электрической проводимости тонкого металлического слоя в случае различных коэффициентов зеркальности его поверхностей // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2016. № 9. С. 85–91.
9. Уткин А. И., Юшканов А. А. Влияние коэффициентов зеркальности на проводимость тонкого металлического слоя в случае неоднородного, периодического по времени электрического поля // Микроэлектроника. 2016. Т. 45. № 5. С. 386–395.
10. Fuchs K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1938. Vol. 34. No. 1. P. 100–108.
11. Sondheimer E. H. The mean free path of electrons in metals // Advances in Physics. 2001. Vol. 50. Iss. 6. P. 499–537.
12. Soffer S. B. Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction // Journal of Applied Physics. 1967. Vol. 38. No. 4. P. 1710–1715.

## REFERENCES

1. Abrikosov A. A. Fundamentals of the theory of metals. New York, North-Holland, 1988. 630 p.
2. Andreev A. F. [Interaction of conduction electrons with a metal surface]. In: *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Physics-Uspekhi], 1971, vol. 105, no. 1, pp. 114–123.
3. Kuznetsova I. A., Romanov D. N., Yushkanov A. A. [Calculating the High-Frequency Electrical Conductivity of a Thin Metallic Layer for an Ellipsoidal Fermi Surface]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2018, vol. 47, no. 3, pp. 226–237.
4. Kuznetsova I. A., Savenko O. V., Yushkanov A. A. [The influence of boundary conditions on the electrical conductivity of a thin cylindrical wire]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2016, vol. 45, no. 2, pp. 126–134.
5. Latyshev A. V., Yushkanov A. A. [Solution of the skin effect problem with an arbitrary coefficient of specular reflection]. In: *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki* [Computational Mathematics and Mathematical Physics], 2009, vol. 49, no. 1, pp. 137–151.
6. Latyshev A. V., Yushkanov A. A. [Interaction of electromagnetic H-wave with thin metal film]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2012, vol. 41, no. 1, pp. 30–35.
7. Utkin A. I., Yushkanov A. A. [The Effect of Specular Reflectances on the Interaction of an Electromagnetic E Wave with a Thin Metal Film Placed between Two Dielectric Media]. In: *Optika i spektroskopiya* [Optics and Spectroscopy], 2018, vol. 124, no. 2, pp. 250–254.
8. Utkin A. I., Zavitaev E. V., Yushkanov A. A. [Calculation of the electrical conductivity of a thin metal layer in the case of different specular reflectances of its surfaces]. In: *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neitronnye issledovaniya* [The Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques], 2016, no. 9, pp. 85–91.
9. Utkin A. I., Yushkanov A. A. [Effect of the reflection coefficients on the conductivity of a thin metal layer in the case of an inhomogeneous time-periodic electric field]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2016, vol. 45, no. 5, pp. 386–395.
10. Fuchs K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals. In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1938, vol. 34, no. 1, pp. 100–108.
11. Sondheimer E. H. The mean free path of electrons in metals. In: *Advances in Physics*, 2001, vol. 50, iss. 6, pp. 499–537.
12. Soffer S. B. Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction. In: *Journal of Applied Physics*, 1967, vol. 38, no. 4, pp. 1710–1715.

---

## ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Каримов Фахриддин Ахмаджонович – аспирант кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;  
e-mail: faha\_rtsu\_2003@mail.ru

Юшканов Александр Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;  
e-mail: yushkanov@inbox.ru

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Fakhriddin A. Karimov* – postgraduate student at the Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University;  
e-mail: faha\_rtsu\_2003@mail.ru

*Alexander A. Yushkanov* – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor at the Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University;  
e-mail: yushkanov@inbox.ru

---

### ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

*Каримов Ф. А., Юшканов А. А.* Зеркально-диффузные граничные условия для электронов на поверхности металла с учётом зависимости от угла падения // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 1. С. 50–56.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-1-50-56

### FOR CITATION

*Karimov F. A., Yushkanov A. A.* Mirror-diffuse boundary conditions for electrons on a metal surface taking into account the dependence on the incidence angle. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2020, no. 1, pp. 50–56.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-1-50-56