

УДК 621.317.7.621.372

Моделирование работы выхода оксидного катода при воздействии натрия

В.К. Свешников, А.Ф. Базаркин

В статье рассматривается математическая модель оксидного катода с учетом воздействия натрия. Приведена методика расчета температурной зависимости работы выхода бариевого катода при адсорбции натрия, которая может быть положена в основу расчета работы выхода ОК с более сложным составом эмиссионного покрытия.

PACS: 79.40.+z

Ключевые слова: атомы натрия, оксидный катод, моделирование, работа выхода, адсорбция натрия.

Введение

В процессе работы приборов с парами натрия, в частности, натриевых ламп, происходит адсорбция натрия на оксидном катоде (ОК) в виде атомов и ионов, что приводит к снижению работы выхода катода и изменению его вторично-эмиссионных характеристик. Следствием является снижение напряжения возбуждения разряда и уменьшение приэлектродных потерь мощности [1].

Отсутствие достоверных значений работы выхода для оксидных катодов с различными покрытиями затрудняет расчет и проектирование приборов с парами натрия. Экспериментальное определение работы выхода в таких приборах осложняется высокой химической активностью натрия, что ограничивает применение традиционных методов исследований и связано со значительными материальными затратами. Компьютерная модель работы выхода ОК и методика его расчета позволяют учесть процессы, происходящие на его поверхности и в объеме, как для простого, так и для сложного состава эмиссионного покрытия катода.

Ниже рассматривается математическая модель бариевого катода с учетом воздействия натрия. Приводится алгоритм расчета и сопоставление расчетных данных с экспериментальными результатами. Предложенная нами методика расчета температурной зависимости работы выхода бариевого катода при адсорбции натрия может быть положена в основу расчета температурной зависимости работы выхода ОК с более сложным составом эмиссионного покрытия.

Математическая модель работы выхода оксидного катода

На основе уравнений и соотношений, приведенных в [2, 3], нами получена модель работы выхода ОК при воздействии на него натрия.

При адсорбции атомов натрия на поверхности оксидного слоя происходит изменение работы выхода ОК, обусловленного изгибом зон полупроводникового эмиттера, а также образованием дипольного слоя из атомов натрия на его поверхности. Поэтому полная работа выхода ец катода определяется соотношением:

$$e\varphi = \mu + \chi - e\psi_0 - \Delta\chi \quad (1)$$

где μ – энергия Ферми, χ – внешняя работа выхода, $e\psi_0$ – изгиб зон полупроводника, $\Delta\chi$ – изменение внешней работы выхода катода вследствие адсорбции натрия.

Установим выражения для расчета полной работы выхода при воздействии натрия с учетом изгиба зон и образованием дипольного слоя натрия на поверхности ОК.

Работа выхода катода с учетом изгиба зон

Работа выхода ОК с учетом изгиба зон определяется соотношением:

$$e\varphi = \mu + \chi - e\psi_0 \quad (2)$$

Входящая в (2) энергия Ферми μ рассчитывается по формуле, приведенной в [2]:

$$\mu = kT \ln \left(\frac{N_c}{N_d} \right) \quad (3)$$

где k – постоянная Больцмана, T – температура катода, N_c – эффективная плотность состояний в зоне проводимости, N_d – концентрация объемных доноров.

Эффективная плотность состояний равна:

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi mkT}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (4)$$

Здесь m – масса электрона, \hbar – постоянная Планка.

Изменение работы выхода $e\psi_0$ вследствие адсорбции натрия на поверхности ОК может быть определено из уравнения [3]:

Свешников Виктор Константинович, профессор.
Базаркин Александр Федорович, аспирант.
Мордовский государственный педагогический институт им. М. Е. Евсевьева.
Россия, 430007, г. Саранск, ул. Студенческая, д. 11а.
Тел.: (8342) 33-92-81, Факс (8342) 33-92-67.
E-mail: systemhoster@yandex.ru

$$n_0 \left(e^{\frac{e\psi_0}{kT}} - 1 \right) - \frac{eN_d\psi_0}{kT} + N_d \ln \frac{1 + e^{\frac{E_d - \mu_l + e\psi_0}{kT}}}{1 + e^{\frac{E_a - \mu_l}{kT}}} = \left(\frac{N_p}{1 + e^{\frac{E_p - \mu_l + e\psi_0}{kT}}} \right)^2 \cdot \frac{1}{8\pi\epsilon kT} \quad (5)$$

где ϵ – диэлектрическая проницаемость, n_0 – концентрация электронов в зоне проводимости, E_a – энергия активации миграции доноров, N_p – концентрация поверхностных доноров, E_p, E_d – соответственно глубина залегания донорных уровней на поверхности и в объеме ОК. Уравнение (5) учитывает поверхностные уровни донорного типа и искривление зон.

Входящее в (5) выражение μ_l для локального уровня Ферми приведено в неявном виде в работе [3]:

$$\frac{2}{\hbar^3} \left(\frac{mkT}{2\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\mu_l}{kT}\right) = \frac{N_d}{1 + e^{\frac{E_d - \mu_l}{kT}}} \quad (6)$$

С целью упрощения уравнения (6) оно приведено нами к квадратному уравнению. Решение его имеет вид:

$$\mu = -kT \ln \left[\frac{(1 + 4 \exp(E_d / kT) [A])^{1/2} - 1}{2 \exp(E_d / kT)} \right] \quad (7)$$

$$A = N_d / \left(\frac{2}{\hbar^3} \left(\frac{mkT}{2\pi} \right)^{3/2} \right)$$

Входящая в уравнение (5) концентрация n_0 электронов равна [4]:

$$n_0 = \frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - \mu_l}{kT}} + 1} \quad (8)$$

Подставляя в (2) выражение (3), а также результат решения уравнения (5) для $e\psi_0$, получим формулу для расчета температурной зависимости работы выхода ОК с учетом изгиба зон:

$$e\phi = \chi + kT \ln \left(\frac{2 \left(\frac{2pmkT}{\hbar} \right)^{3/2}}{N_d} \right) - e\psi_0 \quad (9)$$

Входящие в (5) и (9) параметры E_d, E_p , соответственно, глубины залегания доноров в объеме и на поверхности оксида, а также N_p, N_d , соответственно, концентрации объемных и поверхностных доноров, энергия электронного сродства χ и температура T могут варьироваться в широких пределах. Они определяются свойствами используемых материалов при изготовлении оксидных катодов и режимами термовакуумной обработки и активировки ОК.

Изменение работы выхода катода вследствие образования дипольного слоя натрия

Контактирующая с катодом пленка натрия дополнительно приводит к изменению его работы выхода вследствие образования слоя диполей. Возникающее электрическое поле, образованное двойным слоем диполей на катоде, снижает потенциальный барьер у поверхности катода и увеличивает его эмиссионную способность. Внешняя работа выхода χ при образовании слоя диполей понижается на величину [5]:

$$\Delta\chi = NP_d / \epsilon_0, \quad (10)$$

где N – число атомов адсорбированных на единичной поверхности катода, ϵ_0 – электрическая постоянная (в системе СИ), P_d – индуцируемый дипольный момент. Индуцированный дипольный момент P_d можно определить с помощью коэффициента α поляризуемости:

$$P_d = \alpha E. \quad (11)$$

Локальная напряженность электрического поля определяется выражением из работы [5]:

$$E = \frac{q_f(\epsilon - 1)}{16\pi\epsilon_0 d^2(\epsilon + 1)}, \quad (12)$$

где q_f – эффективный заряд иона натрия, d – плечо диполя, ϵ – диэлектрическая проницаемость оксидного покрытия.

Подставляя в (10) выражения (11) и (12), получим формулу для изменения работы выхода ОК:

$$\Delta\chi = \frac{aNq_f(\epsilon - 1)}{16\pi\epsilon_0 d^2(\epsilon + 1)}. \quad (13)$$

Число атомов N , адсорбировавшихся на единичной поверхности катода, равно концентрации поверхностных доноров N_p , входящего в уравнение (5), и определяется из формулы (14) с учетом степени покрытия катода натрием.

$$N = \theta N_p, \quad (14)$$

где N_p – число частиц на 1 м², образующих монокатодный слой.

Степень покрытия ОК атомами натрия определяется балансом между поступлением адсорбированных атомов на поверхности катода и их тепловым испарением. Если атомы адсорбируются из газообразной фазы, то число v_a атомов, адсорбируемых за 1 с на 1 м² поверхности, может быть подсчитано на основе закона кинетической теории газов [6]:

$$v_a = \frac{\beta(1 - \theta)P}{\sqrt{2\pi MkT_p}}, \quad (15)$$

где P – давление пара, M – масса адсорбируемой частицы, β – коэффициент конденсации, T_p – температура пара.

Скорость десорбции частиц v_d с поверхности 1 м² за 1 с равно [6]:

$$v_d = \frac{N_1\theta}{\tau_0} e^{-F/kT_k}. \quad (16)$$

Здесь F – энергия адсорбции, τ_0 – период колебания атомов решетки оксида, на поверхности которого происходит адсорбция, T_k – температура катода.

Из условия равенства скоростей адсорбции (15) и десорбции (16) находим степень покрытия ОК натрием:

$$\theta = \frac{P\tau_0}{\beta P\tau_0 + N_1 \sqrt{2\pi M k T_p} e^{-F/kT_k}} \quad (17)$$

Подставляя в (13) выражение (17), получим формулу для определения изменения внешней работы выхода катода:

$$\Delta\chi = \frac{N_1 P \tau_0}{\beta P \tau_0 + N_1 \sqrt{2\pi M k T_p} e^{-F/kT_k}} \times \frac{\alpha N q_f (\varepsilon - 1)}{16\pi \epsilon_0 d^2 (\varepsilon + 1)} \quad (18)$$

Входящая в (18) энергия адсорбции атомов натрия определяется по формуле [7]:

$$F = \frac{4,574 (\lg P_2 - \lg P_1)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}, \quad (19)$$

здесь P_1 и P_2 – равновесные давления при температурах T_1 и T_2 .

Компьютерное моделирование работы выхода катода при воздействии натрия

На основе полученной математической модели работы выхода бариевого катода при воздействии натрия нами составлен алгоритм и компьютерная программа, позволяющая осуществить расчет температурной зависимости работы выхода оксидного катода при воздействии натрия.

Формула для расчета работы выхода ОК при воздействии натрия с учетом (9) и (18) имеет вид:

$$e\varphi = \chi + kT \ln \left(\frac{2 \left(\frac{2\pi m k T}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}}}{N_d} \right) - e\psi_0 - \Delta\chi \quad (20)$$

Алгоритм расчета температурной зависимости работы выхода ОК на основе формулы (20) приведён на рисунке. Расчет работы выхода состоит из нескольких этапов. В частности, расчет энергии Ферми и изгиба зон ОК осуществляется по формулам (3) и (5). Концентрация электронов на уровне донорной примеси определяется из (8).

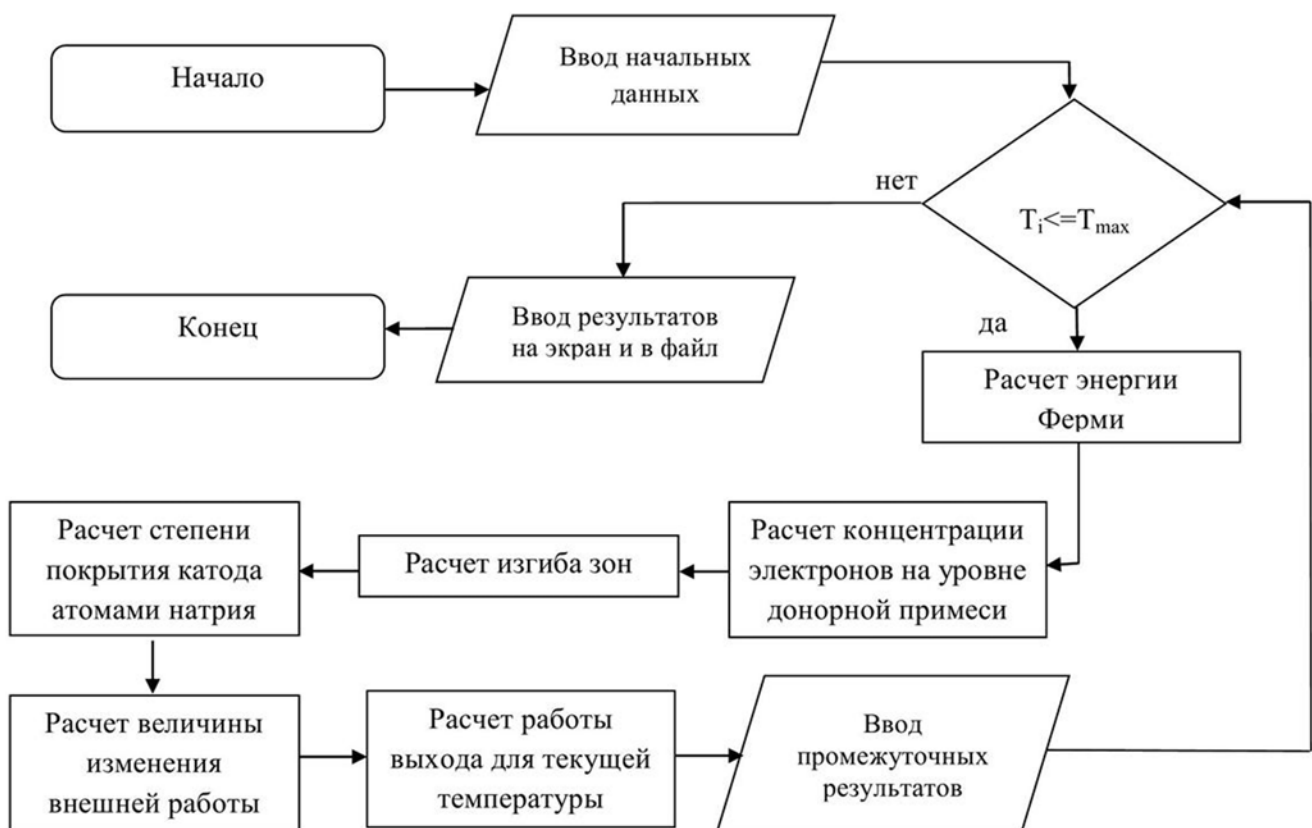


Рисунок. Алгоритм расчета температурной зависимости работы выхода ОК.

Сопоставление расчётных и экспериментальных данных

На основе приведенного алгоритма нами рассчитана работа выхода оксида бария при адсорбции натрия в диапазоне температур 600–900 К. При расчете приняты

следующие параметры: $N_1 = 7 \cdot 10^{18} \text{ м}^2$ [5], $d = 1,89 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\alpha = 2,59 \cdot 10^{-39} \text{ Ф/м}^2$ [8], $\tau_0 = 10^{-12} \text{ с}$, $P = 0,38 \text{ Па}$ при температуре 543 К, $M = 23 \text{ а.е.м.}$, $\beta = 1$ [9], $q_f = 0,02e$, $F = 1,06 \text{ эВ}$.

Сопоставление расчетных и экспериментальных данных сведено в таблицу.

Таблица

Расчетные и экспериментальные данные работы выхода бариевого катода при адсорбции натрия

Температура, К	Расчет (без N), эВ	Эксперимент (без N), эВ [5]	Относит. погрешн. δ , %	Расчет (с натрием), эВ	Эксперимент (с натрием), эВ [5]	Относит. погрешн. δ , %
620	1,54	1,65	6,79	1,24	1,25	0,31
660	1,6	1,7	6,42	1,33	1,35	0,76
710	1,65	1,75	5,75	1,46	1,45	0,56
770	1,7	1,8	5,11	1,6	1,8	11,27
830	1,76	1,85	4,89	1,73	1,85	6,8
900	1,81	1,9	4,34	1,85	1,9	2,81

Из таблицы следует, что при воздействии натрия на бариевый катод работа выхода с увеличением температуры уменьшается. Так, для бариевого катода при температуре 620 К она составляет 1,5 эВ, тогда как при адсорбции натрия она составляет 1,25 эВ, т. е. происходит снижение работы выхода на 27%.

При температуре свыше 700 К происходит десорбция натрия с катода. В этом случае работа выхода бариевого катода, покрытого атомами натрия, приближается к работе выхода катода без натрия, что согласуется с результатами работы [5]. Максимальное расхождение между расчетными и экспериментальными данными не превышает 12%.

Заключение

Основные результаты работы состоят в следующих положениях. Предложена математическая модель работы выхода оксидного катода при адсорбции натрия с учетом изгиба зон и образованием диполей натрия на его поверхности. Установлена температурная зависимость работы выхода катода при адсорбции натрия. Составлен алгоритм расчета работы выхода при использовании ЭВМ. При температуре свыше 700 К происходит десорбция

натрия с катода и его работа выхода приближается к работе выхода катода без натрия. Методика расчета работы выхода бариевого катода при воздействии на него натрия может быть распространена на катоды, имеющие сложный элементный состав оксидного покрытия.

Литература

1. Свешников В. К. // Электронная техника. Сер. Электровакuumные и газоразрядные приборы. 1982. Вып. 2. С. 13.
2. Никонов Б. П. Оксидный катод. – М.: Энергия, 1979.
3. Князев А. Я. // Электронная техника. Сер.1. Электроника СВЧ. 1972. № 9. С. 54.
4. Шалимова К. В. Физика полупроводников. – М.: Энергоатомиздат, 1985.
5. Свешников В. К. // Известия высших учебных заведений. 2012. Т. 55. № 1. С.58.
6. Де-Бур Д. Г. Электронная эмиссия и явления адсорбции. – М.–Л.: ОНТИ. 1936.
7. Дэшман С. Научные основы вакуумной техники. – М.: Издательство иностранной литературы, 1950.
8. Виноградов А. В., Шевченко В. И. // Тр. ФИАН. 1980. Вып. 119. С. 165.
9. Субботин В. И., Сорокин В. П., Чулков Б. А. // Общие вопросы тепло и массообмена. 1966. С. 247.

Modeling the work function of an oxide cathode under the influence of sodium

V. K. Sveshnikov and A. F. Bazarkin

Mordovian State Pedagogical Institute
11a Student's str., Saransk, 430007, Russia
E-mail: systemhoster@yandex.ru

Received December 10, 2013

The article deals with the mathematical model of the oxide cathode, because of effects of sodium. The methodology of calculation of the temperature dependence of the work function cathode barium sodium adsorption, which can be the basis for calculating the work function OK with a more complex structure of the emission coating.

PACS: 79.40.+z

Keywords: sodium atoms, oxide cathode, modeling, work function, adsorption of sodium.

References

1. V. L. Sveshnikov, *Elektronnaya Tekhnika*, No. 2, 13 (1982).
2. B. P. Nikonov, *Oxide-Coated Cathode* (Energiya, Moscow, 1979) [in Russian].
3. A. Ya. Knyazev, *Elektronnaya Tekhnika*, No. 9, 54 (1972).
4. K. V. Shalomova, *Semiconductor Physics* (Energoatomizdat, Moscow, 1985) [in Russian].
5. V. K. Sveshnikov, *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved.* **55**, 58 (2012).
6. D. G. De-Bur, *Electron Emission and Phenomena of Adsorption* (ONTI, Moscow-Leningrad, 1936) [in Russian].
7. S. Deshman, *Scientific Foundations of Vacuum Technique* (Izdat. Inostr. Literat. Moscow, 1950) [in Russian].
8. A. V. Vinogradov and V. I. Shevchenko, *Proc. Lebedev Institute (FIAN)*, No. 119, 165 (1980).
9. V. I. Subbotin, V. P. Sorokin, and B. A. Chulkov, in *Generalities of Heat-and-Mass Transfer*. Collected Articles. Ed. by A. V. Lykov, (Minsk, 1966). p. 247 [in Russian].