

## Моделирование диффузионной утечки натрия из разрядных трубок натриевых ламп

В. К. Свешников, В. Н. Молин, А. Н. Камодин

Мордовский государственный педагогический институт имени М. Е. Евсевьева,  
г. Саранск, Россия

E-mail: kamalex84@yandex.ru

*Проведено моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии ионов натрия в моно- и поликристалле. Сопоставление компьютерного и натурального экспериментов подтверждает вакансионный механизм диффузии при различных структурах кристалла в широком диапазоне изменения температуры и электрического поля.*

PACS: 07.05.Tr

### Введение

В процессе эксплуатации натриевых ламп высокого давления происходит утечка натрия из объема разрядных трубок (РТ), следствием которой являются ухудшение электрических и световых характеристик ламп и их преждевременный выход из строя [1].

Известные результаты теоретических и экспериментальных исследований утечки натрия, а также опытно-конструкторских решений по ограничению утечки натрия в натриевых лампах применимы для определенной конструкции ламп [2, 3].

Однако отечественной и зарубежной промышленностью выпускаются натриевые лампы различной номенклатуры, оболочки РТ которых имеют как моно-, так и поликристаллическую структуру. От утечки натрия из объема лампы зависит их срок службы. В связи с этим чрезвычайно важно установить зависимость коэффициента диффузии, а следовательно, электрических и световых характеристик ламп от времени для различных структур оболочек РТ для выявления потенциально негодных ламп, прогнозирования срока службы и совершенствования их конструкции.

Цель данной работы — разработка компьютерной модели утечки натрия из РТ при различных типах их кристаллической структуры в отсутствие и при наличии электрического поля.

### Компьютерное моделирование процессов диффузии

Процессы роста, испарения и диффузии описываются решеточным вариантом метода Монте-Карло [4], суть которого состоит в воспроизведении с помощью ЭВМ функционирования вероятностной модели некоторого объекта. При применении метода

Монте-Карло моделируются случайные величины с известными законами распределения, и по заданным алгоритмам вычисляются значения более сложных величин.

Сочетание компьютерной модели утечки натрия с известными результатами натуральных экспериментов, изложенными в работе [5], позволит выбрать оптимальное решение для осуществления поставленных проблем с наименьшими затратами.

Существенной причиной обеднения объема РТ натрием являются диффузия ионов натрия из разрядного канала РТ, нейтрализация их на ее поверхности и десорбция натрия с РТ в виде атомов или ионов под действием ускоряющего электрического поля [6]. Коэффициент диффузии натрия зависит от материала и структуры керамической оболочки РТ [7].

Компьютерное моделирование методом Монте-Карло позволяет проследить за диффузией натрия в широком интервале параметров и изучить влияние дефектов структуры на этот процесс для различных типов натриевых ламп. В качестве основных параметров моделирования выбраны температура, энергия образования вакансии, энергия активации диффузии, напряженность электрического поля в стенке РТ.

При применении ЭВМ реальный кристалл моделируется обычно сравнительно небольшим массивом, в нашем случае он имеет размер  $10 \times 10 \times 4$  элементов. Края массива были замкнуты с помощью периодических граничных условий.

Элементы массива были трех сортов: 1 — атом основного вещества, 3 — атом или ион натрия, 0 — вакансия.

Формирование начального массива происходило следующим образом. Верхний слой кристалла — постоянный источник — полностью был заполнен атомами натрия, остальные же слои заполнялись

0 и 1 по следующему правилу. По известной

формуле (1) в работе [8] подсчитывалось число вакансий  $n$  в определенном слое кристалла. Затем случайным образом в данном слое кристалла распределялись вакансии, а остальные места в слое заполнялись атомами основного вещества. Аналогичным образом заполнялись другие слои кристалла. Пример заполнения приведен на рис. 1.

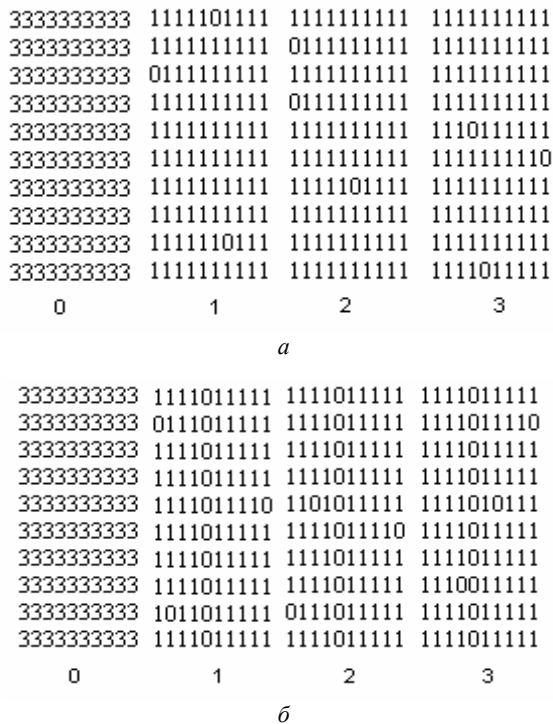


Рис 1. Заполнения слоев массива для:

*a* — монокристалла при  $T = 900$  К: слой 0 постоянный источник натрия, слои 1—3 — стенка РТ; *б* — поликристалла при  $T = 900$  К (нумерация слоев аналогична (*a*))

Для поликристаллической РТ в середине кристалла в виде ряда вакансий была задана межзеренная граница (см. рис. 1, *б*), представляющая собой аморфную “стеклофазу” [7].

В начале счета задавались температура и концентрация вакансий, которая принималась пропорциональной величине  $n$ , рассчитанной по формуле

$$n = N \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right), \tag{1}$$

где  $N$  — коэффициент, пропорциональный числу узлов в кристалле;

$E_v = 0,75$  эВ — энергия образования вакансии [8].

Таким образом, к началу счета был задан моно- или поликристалл с атомами натрия, локализованными на поверхности и вакансиями, концентрация которых зависит от температуры (1).

Диффузия осуществлялась путем перемещения атомов (ионов) из одного узла кристаллической решетки в другой. В процессе счета каждое место в массиве выбиралось случайным образом, и в зависимости от сорта выбранного атома с помощью двух подпрограмм осуществлялись различные процессы: для слоя 3 (натрия) — диффузия, для 0 и 1 — обмен, т. е. движение вакансий по кристаллу.

Если осуществлялась процедура “обмен”, то выбранный атом (0 или 1) обменивался со своим соседом с условной вероятностью 0,2 [4]. Когда выбранный атом имел сорт 3, для него, если среди ближайших соседей имелась вакансия 0, существовала возможность совершить диффузионный скачок в этот узел с вероятностью [8]:

$$p = p_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \tag{2}$$

где  $E$  — энергия активации диффузии.

Коэффициент  $p_0$  имеет следующий смысл: так как диффузия идет в сторону понижения концентрации, необходимо учитывать это при моделировании. Возможны две ситуации для атома примеси (рис. 2): уединенный атом с соседней вакансией и атом, имеющий в соседях с одной стороны вакансию, а с другой — такой же атом примеси 3.

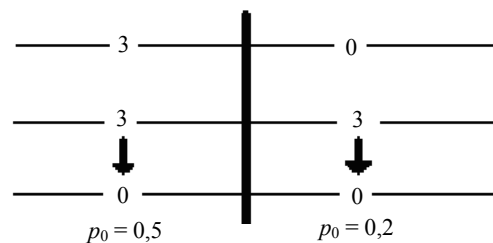


Рис. 2. Условная вероятность перехода иона между слоями

Очевидно, что во втором случае вероятность перескока иона в пустой узел должна быть больше. Таким образом, условная вероятность  $p_0$  принимает два значения: 0,2 и 0,5 для первого и второго случаев, соответственно.

Поскольку источник примеси мы считали постоянным, то слой натрия пополнялся после того, как происходило одно из перечисленных событий.

Окончательная координата атома в разработанной программе запоминалась. На этом цикл считался завершенным и открывался новый цикл, в котором могли происходить аналогичные события.

Влияние электрического поля на ионы натрия моделировалось с помощью изменения

коэффициента  $p_0$ , входящего в формулу (2). В этом случае условная вероятность  $p_0^U$  имеет вид

$$p_0^U = p_0 + 0,01 U, \quad (3)$$

где слагаемое  $0,01 U$  учитывает воздействие электрического поля на диффузию ионов натрия.

Коэффициент вероятности 0,2 для обмена 0 с 1, так же как и коэффициенты 0,2 и 0,5 для диффузии, и коэффициент 0,01 в формуле (3) подбирались эмпирическим путем так, чтобы программа работала достаточно быстро.

Результаты счета: число циклов, число диффузионных скачков для моно- и поликристалла, число перемещений вакансий, глубина проникновения атомов натрия по объему кристалла и конечное распределение элементов массива.

### Обсуждение результатов, полученных при моделировании

Результаты компьютерного моделирования ионного тока через стенку РТ при различных температурах при отсутствии и наличии электрического поля для поликристалла представлены на рис. 3, а. На графике также приведена среднеквадратичная ошибка результатов серий измерений ( $\sigma_1 = 4,4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\sigma_2 = 8,8 \cdot 10^{-5}$ ).

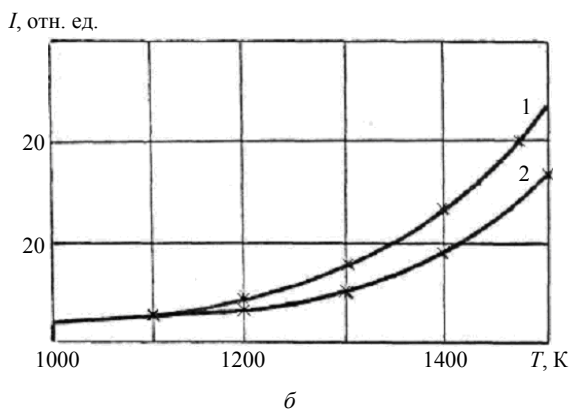
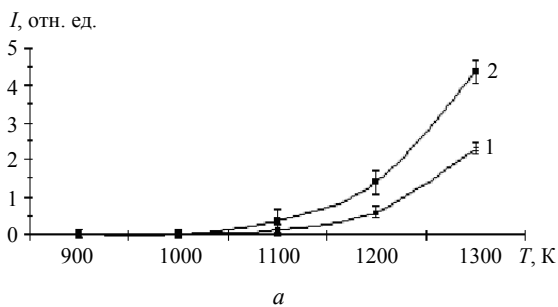


Рис. 3. Зависимость ионного тока от температуры: а — поликристаллической РТ в отсутствие (1) и при наличии ( $U = 160$  В) электрического поля (2);

б — натрия: 1, 2 — ускоряющий потенциал, соответственно, 160 и 0 В

Из рис. 3, а следует, что ионный ток при наличии ускоряющего поля при температурах, превышающих пороговую ( $T_b = 1100$  К), при которой возникает ионизация атомов натрия, больше, чем в отсутствие электрического поля. Для монокристалла изменение ионного тока от температуры существенно меньше, чем для поликристалла, как в отсутствие, так и при наличии электрического поля. Это объясняется тем, что диффузия натрия в случае поликристаллической структуры керамики происходит главным образом по границам зерен.

Результаты компьютерного моделирования, представленные на рис. 3, а, хорошо согласуются с результатами, полученными в натурном эксперименте, взятыми из [9], которые приведены на рис. 3, б.

Ионный ток РТ при температуре, превышающей пороговую, согласно [9] равен

$$I = I_0 \exp[b r_1 (2 + \varepsilon) E / 3 D], \quad (4)$$

где  $I_0 = 2\pi D n_0 e / (\ln r_2 - \ln r_1)$ ;

$b$  — подвижность ионов;

$r_1$  — внутренний радиус трубки;

$r_2$  — внешний радиус трубки;

$\varepsilon$  — относительная диэлектрическая проницаемость материала оболочки трубки;

$E$  — напряженность электрического поля;

$D$  — коэффициент диффузии ионов натрия;

$n_0$  — концентрация ионов натрия на межфазной границе плазма—керамическая оболочка РТ;

$l$  — длина внешнего электрода;

$e$  — заряд электрона.

Из выражения (4) следует, что ионный ток с трубки при постоянной температуре экспоненциально зависит от напряженности электрического поля. Для проверки процесса десорбции натрия с РТ на масс-спектрометре ИПДО-2 проведен анализ состава газов в камере. На рис. 4, взятом из [9], приведены масс-спектрограммы газов и паров в камере при температуре трубки 1550 К. Из данного рисунка следует, что электрическое поле на трубке увеличивает высоту пика натрия. Так, при потенциале на электроде  $U = 0$  относительно разрядного канала ток датчика составляет  $0,13 \cdot 10^{-11}$  А, а при  $U = 240$  В равен  $0,21 \cdot 10^{-11}$  А. Увеличение пика натрия при приложении к трубке ускоряющего электрического поля сопровождается также и уменьшением пика  $\text{OH}^-$  ( $\text{OH}^-$  образуются разложением  $\text{H}_2\text{O}$  на нагретой поверхности [9]). Другие газы среды при  $T < 1550$

К практически не участвуют в образовании ионов из-за их высоких энергий ионизации и диссоциации. Это подтверждает ионный характер эмиссии натрия с трубки. Это же утверждение доказывается в работе [10].

Зависимость  $\ln(I/I_0)$  для РТ от напряженности  $E$  электрического поля, полученная в результате компьютерного моделирования, приведена на рис. 5. Она является линейной, что согласуется с формулой (4).

Экспериментальные точки на рис. 5 соответствуют определенным значениям  $U$  в формуле (3). Относительная ошибка полученных результатов не превышает 10 %.

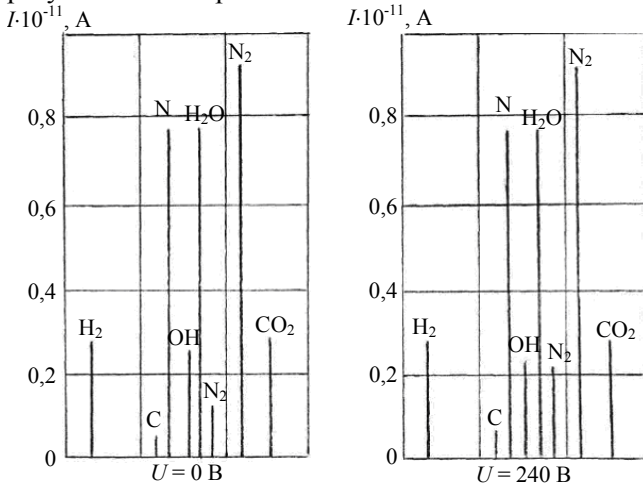


Рис. 4. Масс-спектрограммы газов в вакуумной камере при различных потенциалах на ускоряющем электроде относительно разрядного канала

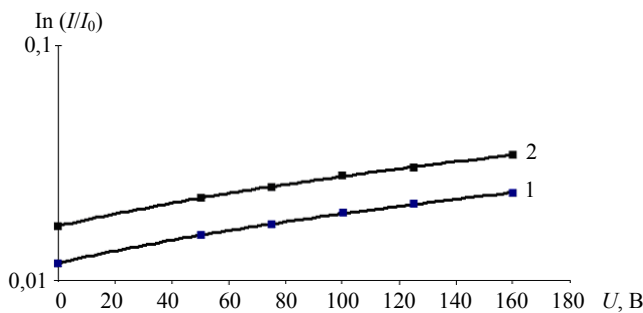


Рис. 5. Результаты компьютерного моделирования зависимости скорости диффузии ионов натрия от напряжения на РТ в моно- (1) и поликристаллах (2) при  $T = 1300$  К

Из рис. 5 следует, что в поликристаллической структуре керамики электрическое поле приводит к высокой скорости диффузии, что объясняется наличием в структуре большого количества дефектов, сосредоточенных на границах зерен.

Компьютерное моделирование позволяет проследить за динамикой диффузии натрия в РТ. Зависимости числа ионов натрия от времени для трех слоев моделирующего РТ массива приведены на рис. 6, из которого следует, что ускоряющее

поле приводит к быстрому заполнению слоев РТ натрием и способствует уходу ионов натрия из наружного слоя. Из сравнения рис. 6, а и б видно, что при  $U = 160$  В насыщение слоев натрием происходит уже при 2000 циклов, а при  $U = 0$  В — только при 5000—6000 циклов. Электрическое поле вытягивает ионы натрия из наружного слоя 3, что приводит к их меньшей концентрации (см. рис. 6, б) по сравнению с  $U = 0$  В (см. рис. 6, а) при достаточно большом (около 20000) числе циклов. В слоях 1 и 2 концентрация ионов натрия при этом же числе циклов примерно одинакова, так как она поддерживается за счет постоянного источника (см. рис. 1, а, б).

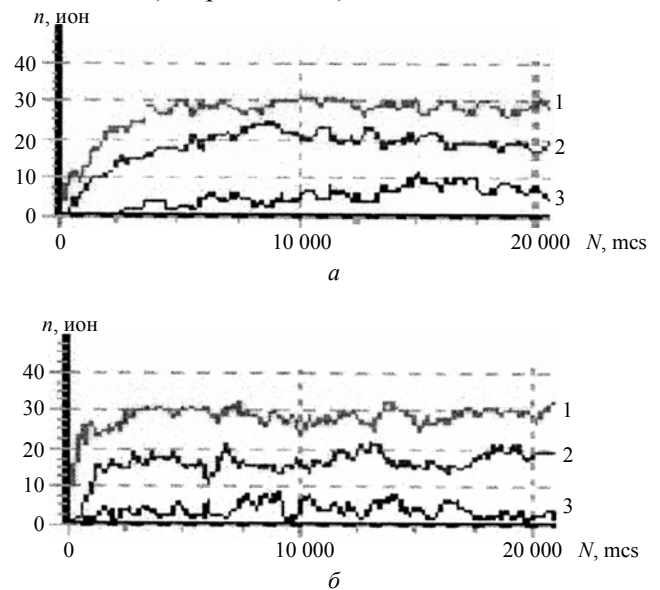


Рис. 6. Зависимость числа ионов натрия  $n$  от числа циклов Монте-Карло  $N$  в различных слоях монокристалла при  $T = 1200$  К: а — без ускоряющего поля ( $U = 0$  В); б — при наличии ускоряющего поля ( $U = 160$  В); 1—3 — номера слоев массива, наружный слой 3

### Заключение

Комплекс проведенных теоретических и экспериментальных исследований позволил создать компьютерную модель диффузионной утечки натрия через керамические оболочки разрядных трубок.

Сопоставление результатов компьютерного и натурального экспериментов свидетельствует об адекватности предложенной компьютерной модели диффузионных процессов в РТ. Эта модель может быть использована для изучения поведения натрия для различных размеров зерен в поликристаллических РТ в условиях, соответствующих рабочим режимам натриевых ламп.

На основании сопоставления компьютерного и натурального экспериментов показано, что

существенной причиной обеднения объема трубки натрием является его утечка. Она обусловлена диффузией ионов натрия из объема керамической разрядной трубки в вакуум под действием ускоряющего электрического поля. Коэффициент диффузии натрия зависит от применяемого материала и структуры оболочки трубки.

Результаты компьютерной модели позволяют установить зависимости световой отдачи, напряжения на лампе и разрядного тока от времени работы последних.

#### Л и т е р а т у р а

1. Камодин А. Н. Состояние разработок натриевых ламп высокого давления// Источники излучения: Межвуз. сб. науч.-техн. работ/ Мордов. гос. пед. ин-т. Саранск. 2008. С. 40—44.
2. Свешников В. К. Механизм утечки натрия в натриевых лампах// Светотехника и инфракрасная техника. 1983. № 8. С.15. Деп. Информэлектро 15.02.83, № 89эт-Д83-Д.
3. Свешников В. К. Выбор информативных параметров для контроля утечки натрия из разрядных трубок натриевых ламп// Электронная техника. Сер. Электровакуумные и газоразрядные приборы. 1991. Вып. 4. С. 87—91.
4. Александров Л. Н., Бочкова Р. В., Коган А. Н., Тихоно-

ва Н. П. Моделирование роста и легирования полупроводниковых пленок методом Монте-Карло: — Новосибирск: Наука, 1991.

5. Мордюк В. С. К расчету временной зависимости световой отдачи натриевых ламп высокого давления// Светотехника. 1976. № 2. С. 20.

6. Свешников В. К. Диффузия натрия в системе разрядная трубка — внешний электрод натриевой лампы// Источники излучения: Межвуз. сб. науч.-техн. работ/ Мордов. гос. пед. ин-т. Саранск. 1999. С. 28—35.

7. Свешников В. К. Связь ионного тока со структурой оболочки разрядной трубки натриевой лампы// Там же. 2002. С. 24—27.

8. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. — М.: Мир, 1969.

9. Свешников В. К. Десорбция натрия с разрядных трубок натриевых ламп// Электронная техника. Сер. Электровакуумные и газоразрядные приборы. 1985. Вып. 2. С. 6—9.

10. Rhodes W. H., Dugger D. L., Feuersanger A. E. The kinetics and consequences of alkali permeation through HPS envelopes// 3 Int. Symp. Sci. and Technol. Light Sources, Toulouse.

18—21 Apr. 1983. Sum. Pap. Toulouse S.A. P. 70, 71.

*Статья поступила в редакцию 15 мая 2008 г.*

## Modeling of diffusive natrium escape from discharge tubes of natrium lamps

V. K. Sveshnikov, V. N. Molin, A. N. Kamodin  
Evsevjev Mordovian State Pedagogical Institute, Saransk, Russia  
E-mail: kamalex84@yandex.ru

*Modeling of the process of diffusion of natrium ions in mono- and poly-crystal under the method of Monte-Carlo was held. Comparison of computer based and natural experiments proves vacancies mechanism of the diffusion when having different crystal structure in the wide range of temperature and electric field change.*

PACS: 07.05.Tr