

УДК 621.382.032

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ НАТРИЯ В ОКСИДНОЕ ПОКРЫТИЕ КАТОДА

Свешников В.К., Базаркин А.Ф.

ФГБОУ ВПО «Мордовский государственный педагогический институт имени М.Е. Евсевьева», Саранск, e-mail:sveshnikovmgpi@mail.ru

Оксидные катоды являются базовыми элементами конструкции электровакуумных и газоразрядных приборов, в частности лазеров с парами натрия, натриевых ламп низкого и высокого давлений. В процессе эксплуатации приборов с парами натрия натрий адсорбируется на поверхности катода. Это приводит к уменьшению работы выхода и изменению вторично-эмиссионных свойств катода. Вопросам изучения свойств оксидных катодов в парах натрия посвящено незначительное число работ. Они отражают в основном, результаты экспериментальных исследований влияния натрия на катод в условиях вакуума. В работе приводится компьютерный метод расчета коэффициента диффузии натрия в оксид бария. Предложенный метод расчета коэффициента диффузии натрия в оксид бария может быть распространен и для оксидных покрытий со сложным элементным составом.

Ключевые слова: катод, диффузия, натрий, модель, метод Монте-Карло

PHYSICAL MODELS AND COMPUTER CALCULATION OF THE DIFFUSION COEFFICIENT SODIUM OXIDE COATING OF CATHODE

Sveshnikov V.K., Bazarkin A.F.

Mordovian State Pedagogical Institute named after M.E. Evseveva, Saransk, e-mail: sveshnikovmgpi@mail.ru

Oxide cathodes are basic elements of the design of vacuum and gas discharge devices, in particular, lasers with sodium vapor, sodium vapor lamps low and high pressure. In operation, devices with sodium sodium vapor adsorbed on the cathode surface. This reduces the work output and a change of secondary emission properties of the cathode. On studying the properties of oxide cathodes in sodium vapor devoted few papers. They reflect mainly the results of experimental studies of the effect of sodium on the cathode in a vacuum. The paper presents a computer method for calculating the diffusion coefficient of sodium barium oxide. The proposed method of calculation of the diffusion coefficient of sodium oxide, barium oxide can be used for oxide coatings with complicated elemental composition.

Keywords: cathode, diffusion, sodium, model, Monte Carlo method

В процессе эксплуатации приборов с парами натрия натрий диффундирует в оксидное покрытие катода, что приводит к снижению его работы выхода и увеличению коэффициента ионно-электронной эмиссии [5]. Дальнейшее улучшение характеристик приборов с парами натрия требует проведения исследований влияния натрия на параметры оксидного катода (ОК). Однако экспериментальное исследование процессов, происходящих в ОК при воздействии натрия, осложняется высокой химической активностью натрия, что ограничивает применение традиционных методов исследований. В этом плане компьютерное моделирование позволяет учесть процессы, протекающие в покрытии катода при адсорбции натрия, а также снизить материальные затраты на проведение экспериментов.

Ниже рассматривается расчет коэффициента диффузии натрия в бариевый катод.

Физическая модель диффузии натрия в оксидном покрытии

Структура кристалла оксида бария после термовакуумной обработки представляет собой гранецентрированный куб, в узлах

кристаллической решетки располагаются атомы бария и кислорода (рис. 1) [1]. В целях упрощения модели кристалла оксида бария рассмотрим линейный случай кубической решетки с восьмью узлами (рис. 2).



Рис. 1. Гранецентрированный куб

При сближении атомов в направлении друг к другу возможно появление вакансии. Объем вакансии в гранецентрированном кристалле составляет приблизительно

0,5–0,6 от объема атома, следовательно, вероятность образования вакансии для двухмерного случая составляет около 25% [1].



Рис. 2. Вероятное распределение вакансий в одномерном случае

Коэффициент диффузии D определяется [2]:

$$D = \frac{1}{6} v \lambda^2 f, \quad (1)$$

где v – частота перескоков атомов; λ – длина диффузионного скачка, соответствующая межатомному расстоянию; f – корреляционный множитель.

Как известно, процесс диффузии можно рассматривать как серию последовательных перескоков атомов с их узлов в вакансии. В этом плане нами рассмотрен как наиболее вероятный вакансионный механизм диффузии. Частота перескоков атома v определяется в виде:

$$v = \frac{N_{j4} v_0}{NMK}, \quad (2)$$

где N_{j4} – количество диффузионных скачков меченого атома натрия, получаемое по окончании работы программы; v_0 – частота, соответствующая частоте колебаний узлов кристаллической решетки; NMK – количество машинных циклов Монте-Карло.

Вероятность диффузионного скачка, необходимая для имитации случайных перемещений атома натрия в кристалле, определяется [2]:

$$w = c \exp\left(-\frac{E}{kT}\right). \quad (3)$$

Здесь c – поправочный коэффициент; E – энергия активации диффузии; k – постоянная Больцмана; T – температура кристалла.

При рассмотрении диффузии предполагается, что вероятность атомных скачков не зависит от направлений предшествующих перемещений. Однако в реальных кристаллах существует зависимость вероятности диффузионного скачка от предшествующих перемещений атома. Каждый диффузионный скачок связан с предыдущим, и атом совершает не случайные, а коррелирован-

ные блуждания, что учитывает f корреляционный множитель [3]:

$$f \approx \frac{z-1}{z+1}, \quad (4)$$

где z – число ближайших соседей атома. Корреляционный множитель показывает долю скачков, вносящих эффективный вклад в диффузию.

Подставляя (2), (4) в (1), получаем:

$$D = \frac{1}{6} \frac{N_{j4} v_0}{NMK} \frac{z-1}{z+1} \lambda^2. \quad (5)$$

Используя формулу (5), можно рассчитать коэффициент диффузии натрия в оксиде бария.

Компьютерная программа расчета коэффициента диффузии

Компьютерная программа расчета коэффициента диффузии натрия в оксид бария разработана нами на языке программирования C++ (рис. 3).

В основе модели использован двухмерный массив размерности 100×30 ячеек кристалла оксида бария. Края массива были замкнуты с помощью периодических граничных условий. Элементы целочисленного массива представляли собой атомы взаимодействующих атомов и вакансии (рис. 4, а). Атомы задавались трех сортов: 1 – атом бария, 3 – атом натрия, 0 – вакансия, 4 – меченый атом натрия.

В рассматриваемом случае диффузия натрия осуществлялась из постоянного источника. Для этого выбиралось определенное количество NMK циклов Монте-Карло, и происходил перебор атомов в массиве на возможность совершить диффузионный скачок. Вероятность диффузионного скачка натрия или вакансии определялась по формуле (3). Она сравнивалась со значением числа, полученного с помощью генератора случайных чисел. Вероятность диффузионного скачка, как известно, зависит от энергии активации диффузии. Она имеет различные значения для разных сортов атомов. Так, если:

1. Выпал элемент массива, равный «3», то возможен однонаправленный акт диффузии.

2. Выпал элемент массива, равный «0» или «1», то возможен акт обмена.

В этом случае движение вакансий по кристаллу происходило в двух направлениях.

После реализации одного из указанных событий поверхностный слой оксида бария пополнялся слоем натрия. На этом цикл счета являлся завершенным. После чего следовал новый цикл счета, в котором происходили аналогичные события.

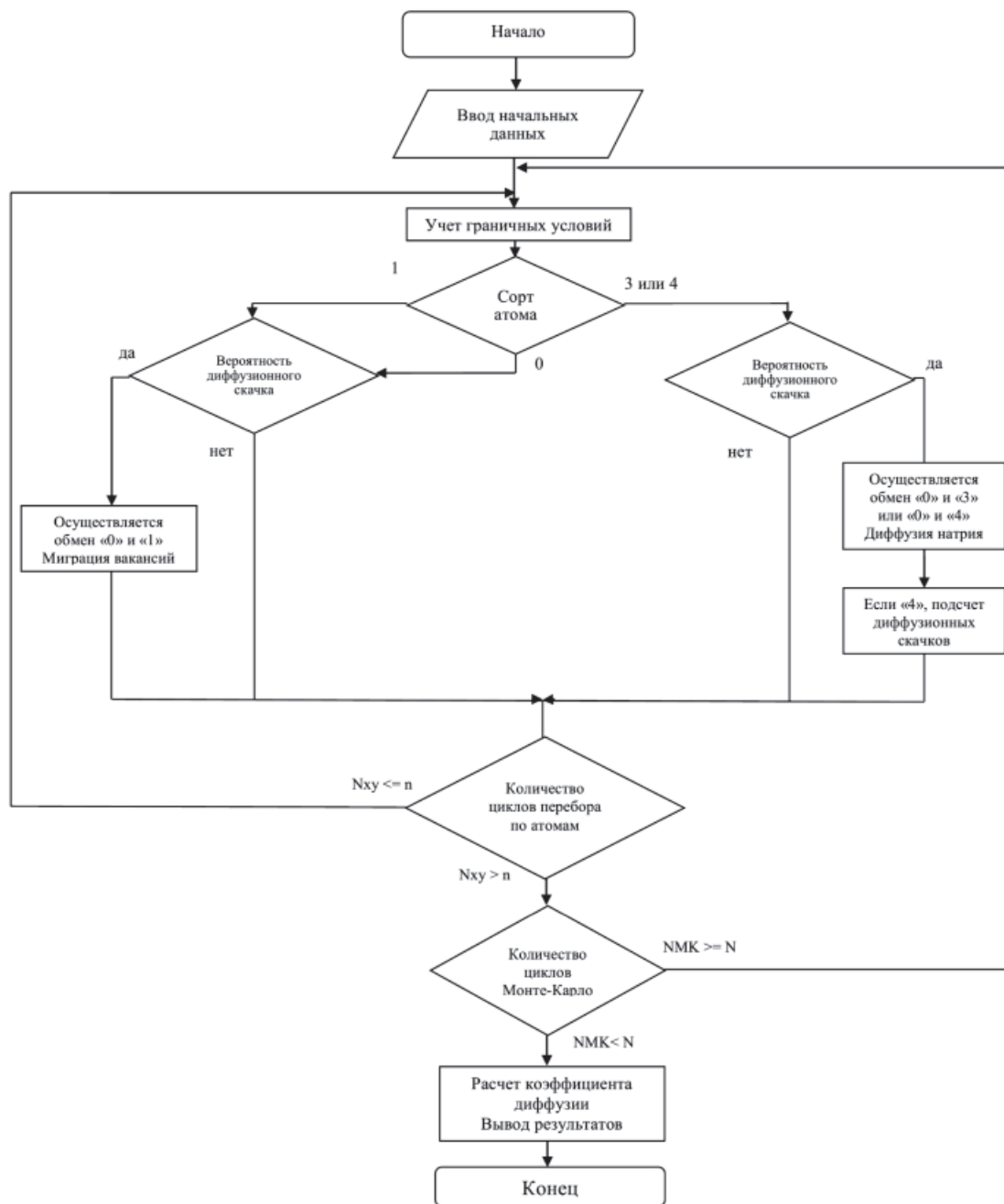


Рис. 3. Блок-схема расчета коэффициента диффузии натрия в оксиде бария

В результате счета определено число скачков меченого атома, а также всех атомов натрия в оксиде бария. Коэффициент диффузии рассчитывался по формуле (5).

Расчет коэффициента диффузии натрия в оксиде бария осуществлялся при следующих параметрах: $T = 600$ К, энергии активации диффузии E натрия и вакансий соответственно равны 0,5 и 0,3 эВ [4], $\lambda = 2,77$ А [4], $\tau_0 = 10^{-13}$ с и $\nu = 10^{13}$ [1], $z = 2$ [2], количество NMK выбрано нами $4 \cdot 10^6$.

В результате работы программы мы получили значение коэффициента диффузии натрия, суммарное количество скачков и ко-

личество скачков меченого атома натрия, а также распределение атомов в кристалле (рис. 4, б).

Из рис. 4, б следует, что с течением времени происходит насыщение кристалла оксида бария натрием. Расчетное значение коэффициента диффузии в оксид бария при температуре 600 К составляет $D = 1,47 \cdot 10^{-12}$ м²/с, что достаточно близко к экспериментальному значению $D = 1,2 \cdot 10^{-12}$ м²/с, приведённому в работе [6]. Результаты компьютерного моделирования дополнительно подтверждают вакансионный механизм диффузии натрия в оксиде бария.

