

[10] L o c k w o o d D.J., D h o r m a - W a r d a n a M.W.C., B a r i b e a u J.M. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 5. P. 2243-2251.

Институт физики полупроводников
СО АН СССР, Новосибирск

Поступило в Редакцию
23 июня 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 18
11

26 сентября 1989 г.

УЧЕТ ВКЛАДА ЗАРЯЖЕННЫХ КЛАСТЕРОВ В ЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

В.В. Г л а з к о в, О.А. С и н к е в и ч

В настоящее время значительный интерес вызывают свойства плотных металлических паров при параметрах, близких к сверхкритическим. Как представляется, в этих условиях на свойства вещества могут оказать существенное влияние возникающие при данных плотностях в уже значительном количестве группы атомов с перекрывающимися электронными оболочками, далее именуемые кластерами (К). Влияние К на ионизационное равновесие в плазме рассматривалось, например, в [1]. Следует упомянуть цикл работ [2], в которых рассматривались переносные и оптические свойства плазмы с К. Представляется, однако, малореалистичным поиск или создание пространственно однородных систем с К металлов, т. к. все эффекты, связанные с К, имеет смысл учитывать лишь при плотностях, близких к 0.3 от твердотельной, а это соответствует пару с $T \sim 3 \cdot 10^3$ К и $P \sim 1$ МПа и более. Однако в лазерных факелах, катодных пятнах и, возможно, жидкометаллических эмиттерах ионов, могут быть легко получены области с такими параметрами, имеющие толщины $\sim 10^{-5}$ см, где могут возникать К из $\sim 10^2$ атомов. Так как подобная область, с одной стороны, граничит с твердой поверхностью, а с другой — проникает в приповерхностный объем, как бы размазывая границу раздела фаз, то представляет интерес оценить вызванное этим фактом изменение эмиссионных свойств поверхности (изменение других свойств в данной работе не рассматривается).

Довольно грубо попытаемся разбить изменение эмиссионных свойств, связанное с наличием К, на три группы: а) изменение термоэмиссии за счет увеличения площади эмиттирующей поверхности; б) изменение автоэлектронной эмиссии (полагаем, что оно происходит за счет усиления поля на концах вытянутых по направлению поля К); в) возникновение дополнительного эмиссионного механизма, который условно назовем переносный эмис-

сией (ПЭ). Он состоит в следующем: как показывают расчеты (см. обзор [3]), начиная с некоторого числа ($S_m \sim 8$) атомов в К, свойства К становятся весьма близкими к свойствам массивного металла (надо полагать, что К любой длины, контактирующий с поверхностью, следует считать металлическим, как фактически полубесконечный). Контактная с заряженной поверхностью, К заряжаются. В случае, если оторвавшаяся от точки контакта с поверхностью часть содержит более S_m атомов, заряд при отрыве не стекает обратно на поверхность и при последующем развале К переходит в объем вблизи поверхности.

Для дальнейшего заметим, что все К можно разделить на два класса: компактные (КК), где почти каждый атом контактирует более чем с двумя соседями, и линейные (ЛК - вытянутые атомные цепочки. Влияние КК на эмиссионные эффекты видимо мало, т. к. вероятность их возникновения меньше, чем у ЛК, при этом коэффициент усиления электрического поля на КК мал, изменение площади поверхности с КК невелико, а время контакта с поверхностью больше, чем у ЛК.

Учитывая далее только ЛК, произведем приближенную оценку эмиссионных токов.

Для плотности термоэмиссионного тока имеем:

$$j_T = j_T^0 (1 + \delta S), \quad (1)$$

где $j_T^0 = \frac{4\pi e m c}{(2\pi\hbar)^3} (kT)^2 \exp\left(-\frac{\omega}{kT}\right)$ - плотность тока термоэмиссии по формуле Ричардсона-Дэшмена [4], ω - работа выхода электрона, а изменение площади за счет наличия ЛК

$$\delta S = n \alpha_0 \cdot 2\pi \alpha_0^2 \langle s \rangle, \quad (2)$$

где n - концентрация, α_0 - радиус атома, $\langle s \rangle$ - средняя длина К:

$$\langle s \rangle \approx \frac{3r}{(B_c - B)r}, \quad (3)$$

где безразмерный параметр $B = \frac{32}{3} \pi n \alpha_0^3$ имеет смысл среднего числа связей на атом, $B_c \approx 3$, $r \approx 1.7$ (см. [5]). При достижении B значения B_c возникает К бесконечной длины, т. н. перколяционный. Окончательно в окрестности B_c получаем:

$$j_T = j_T^0 \left(1 - \frac{3}{32} B + R \frac{3r+2}{16} \frac{B}{(B_c - B)r} \right), \quad (4)$$

где $R < 1$ коэффициент, учитывающий обратное поглощение электронов поверхностью.

Оценим плотность автоэмиссионного тока. Предварительно необходимо заметить, что учитывать автоэмиссию следует лишь с ЛК, для которых выполняется условие:

$$\tau(s) > \frac{l(s)}{v_F}, \quad (5)$$

где $\tau(s)$ - время жизни, $l(s)$ - длина ЛК из s атомов, v_F - фермиевская скорость электрона. Полагая, что образование и распад ЛК (т. е. перестройка волновых функций валентных электронов) не влияет на движение ядер атомов, получим $\tau(s) \approx \frac{1}{s} \frac{\alpha_0}{v_\alpha}$, где v_α - тепловая скорость ядер. Подставляя температуру атомов $T_\alpha \sim 0.3-0.5$ эВ, $\epsilon_F \sim 10$ эВ, легко получить из (5), что $s < 20$. Вводя коэффициент усиления поля на конце ЛК $A(s) = A \cdot s$, где $A \sim 1$, и используя выражение Фаулера-Нортгейма [4] для автоэмиссионного тока, в окрестности перколяционной точки и без учета экранировки ЛК друг друга получим:

$$j_A \sim \frac{3^{2r+1}}{32} B \cdot D \cdot E_0^2 (B_c - B)^{-2r} \exp\left(-\frac{4E_* (B_c - B)^r}{3^{r+1} \cdot A \cdot E_0}\right), \quad (6)$$

где $D = \frac{e^3 \sqrt{\epsilon_F}}{2\pi \hbar \sqrt{\omega} (\omega + \epsilon_F)}$, E_0 - напряженность электрического поля, $E_* = \frac{\omega}{e \hbar} \sqrt{2m_e \omega}$, $E_* \sim 10$ В/см. Формула (6) показывает, что на $\frac{3}{32} B$ части поверхности с ЛК электрическое поле эффективно усиливается в $\langle s \rangle$ раз (но, видимо, не более 20).

Наконец, рассмотрим переносный механизм эмиссии. Полагая, что заряд ЛК

$$q(s) = E_0 \cdot \pi \alpha_0^2 \cdot C(s), \quad (7)$$

где $C(s) = C s$, $C \sim 1$ - коэффициент, характеризующий рост заряда ЛК за счет увеличения его поверхности и усиления поля на его конце. Обозначив $\rho(s)$ вероятность атому принадлежать ЛК из s атомов и учитывая множителем $\gamma(s) = \frac{s - s_m + 1}{s}$, что при развале ЛК заряд попадает в объем лишь в случае, если остаток имеет длину не менее s_m , для плотности тока ПЭ получаем:

$$j_c = n \alpha_0 \left(\sum_{s=s_m}^{\infty} \frac{q(s)}{\tau(s)} \rho(s) \gamma(s) \right) \quad (8)$$

и, полагая приближенно, что от первого атома в ЛК до s_m нет

ветвлений и т. о. $\rho(s_m + s) \sim \left(\frac{B}{3}\right)^{s_m - 1} \rho(s)$, а также полагая $\langle s^2 \rangle \sim \langle s \rangle^2$, имеем:

$$j_c \sim \frac{9}{16} E_0 \left(\frac{v_a}{\alpha_0}\right) \left(\frac{B}{3}\right)^{s_m} \cdot C \left[\frac{3}{B_c - B}\right]^{2s_m}. \quad (9)$$

Суммируя все выше изложенное, можно заключить, что в принятых допущениях все три рассмотренных механизма эмиссии имеют сингулярности при приближении к перколяционной точке, причем автоэлектронная эмиссия наиболее сильным образом. Данными результатами можно попытаться объяснить явление аномально высокой, т. н. взрывной эмиссии при пробое и большую термоэмиссию в катодных пятнах на тугоплавких металлах [6]. Переносная эмиссия играет, возможно, существенную роль в анодных пятнах и в жидкометаллических источниках ионов [7], как единственный механизм, для которого знак заряда на поверхности не играет роли.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Погосов В.В., Храпак А.Г. // ТВТ. 1988. Т. 26. № 2. С. 209-217.
- [2] Ликальтер А.А. // ТВТ. 1987. Т. 25. № 1. С. 1-7 // ТВТ. 1988. Т. 26. № 4. С. 707-717.
- [3] Полуэмпирические методы расчета электронной структуры / Под ред. Дж. Сигнал, статья Р. Мессмер, т. 2. М.: Мир, 1980, 289 с.
- [4] Бродский А.М., Гуревич Ю.Я. Теория электронной эмиссии из металлов. М.: Наука, 1973. 256 с.
- [5] Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников, М., 1979. 416 с.
- [6] Вакуумные дуги. Теория и приложения / Под ред. Дж. Лафферти. М.: Мир, 1982. 428 с.
- [7] Габович М.Д. // УФН. 1983. Т. 140. № 1. С. 137-151.

Московский энергетический институт

Поступило в Редакцию
12 июня 1989 г.