Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 4

ТВЕРЬ 2012

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379
Ф50

Рецензенты:
Доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, проректор по научной работе Тверского государственного технического университета
В.А. Тихомиров
Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики пьезо- и сегнетоэлектриков Тверского государственного университета
Н.Н. Большакова

Редакционная коллегия:
Самсонов Владимир Михайлович – заведующий кафедрой теоретической физики ТвГУ, профессор, д.ф.-м.н. (ответственный редактор);
Созаев Виктор Адыгеевич – заведующий кафедрой физики факультета электронной техники Северо-Кавказского горно-металлургического института, профессор, д.ф.-м.н.;
Гафнер Юрий Яковлевич – заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Хакасского государственного университета, профессор, д.ф.-м.н.;
Сдобняков Николай Юрьевич – доцент, к.ф.-м.н. (зам. ответственного редактора, ответственный секретарь);
Базулев Анатолий Николаевич – доцент, к.ф.-м.н.;
Комаров Павел Вячеславович – доцент, к.ф.-м.н.;
Скопич Виктор Леонидович – доцент, к.ф.-м.н.;
Соколов Денис Николаевич – технический редактор.

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2012. – Вып. 4. – 364 с.

ISBN 978-5-7609-0560-4
Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей вузов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре теоретической физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379
ISBN 978-5-7609-0560-4
ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2012
© Тверской государственный университет, 2012

УДК 621.531.91

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ЗАЩИТЫ ФОТОКАТОДА ЭЛЕКТРОННОГО УСТРОЙСТВА БАРЬЕРНОЙ НАНОСТРУКТУРОЙ НА МИКРОКАНАЛЬНОМ ЭЛЕМЕНТЕ ПРИ ОБМЕННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ В СИСТЕМЕ ВХОДЯЩИЙ ИОН-СТРУКТУРА

В.Н. Гринюк, О.В. Гудиева, В.А. Созаев

ФГБОУ ВПО «Северо-Кавказский горно-металлургический институт (ГТУ)», РСО-Алания, 362021, Владикавказ, ул. Николаева, 44

sozaeff@mail.ru

Аннотация: Целью проведенной работы было построение корректной теории ионного переноса в наноструктурной среде и оценки на основе этой теории степени эффективности защиты фотокатода электронного устройства в терминах среднестатистического параметра длины свободного пробега положительных ионов, уменьшающих долговечность фотокатода. Впервые рассмотрено влияние обменного межионного взаимодействия на эффект ионного переноса и получено соотношение для истинного заряда положительного иона, входящего в наноструктурную среду. Отмечается лучшее соответствие данных на основе построенной теории с литературными, обсуждена степень универсальности построенной теории при рассмотрении перемещения ионов через любую межфазную границу в приложенном постоянном электрическом поле.

Ключевые слова: *наноструктура, микроканальный элемент, фотокатод, ионное взаимодействие.*

В ранних работах [1-3] уже обсуждались вопросы использования нанопленочных покрытий на микроканальных элементах (МЭ) вакуумных электронных приборов для защиты фотокатода от положительных ионов остаточных газов, проникающих через каналы МЭ при действии ускоряющего постоянного электрического поля в промежутке фотокатод-экран. Исследования в [1,3] показали, что лучшими для этой цели могут быть пленки оксидов металлов, наиболее изученными из которых являются структуры из оксида алюминия Al_2O_3. При этом основным механизмом задержания положительных ионов в структуре является процесс рассеяния этих ионов на ионах структуры, наиболее детально исследованный в рамках квантово-механической атомной модели Томаса-Ферми [2].

Целью настоящей работы было построение и анализ теории ионного переноса в постоянном электрическом поле в наноструктурной среде при вкладе обменного взаимодействия в системе входящий ион-структура в терминах среднего статистического параметра длины свободного пробега входящего иона.

В настоящей работе обсуждается дополнительный механизм, обусловленный обменным взаимодействием в системе входящий ион-структура в условиях перераспределения валентных электронов

взаимодействующих ионов. При этом прибавка к энергии взаимодействия в рамках модели Паулинга [4] пропорциональна сумме энергий ионизации атомов и их электронного сродства. Как результат этой прибавки будет увеличение электроотрицательности положительно заряженного иона, входящего в данную структуру и дополнительное уменьшение длины свободного пробега иона. Подобный механизм, уменьшающий положительный заряд входящего иона, ранее не рассматривался, и какие-либо сведения об этом механизме в литературе отсутствуют.

В соответствии с представлениями атомной модели Томаса-Ферми [2] имеем соотношение для безразмерной энергии иона ε, входящего в среду с ионами структурного элемента, имеющими заряд Z_1 так что

$$\varepsilon = \frac{E\lambda_{TF} M_2}{e^2 Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)}, \qquad (1)$$

где λ_{TF} – постоянная экранирования Томаса-Ферми; e – заряд электрона; Z_1, M_1 – заряд и масса иона, входящего в данную структуру; Z_2, M_2 – заряд и масса в данной структуре; E – размерная энергия иона в структуре.

В отдельном случае, если входящий ион есть частично ионизированная молекула вида $A_m B_n^+$, величина $\overline{M}$ такая что

$$\overline{M} = \frac{M_m M_n}{C_m \alpha_n + C_n \alpha_m}, \qquad (2)$$

где M_m, M_n – массы атомов A, B, соответственно C_m, C_n – атомные концентрации, соответствующие относительному количеству атомов сортов A и B в молекуле $A_m B_n$, α_m, α_n – абсолютные количества атомов сортов A и B. Таким образом, наиболее вероятный заряд иона $\overline{Z}_i$ наноструктуры в данном случае такой что

$$\overline{Z}_i = \frac{Z_m \cdot Z_n}{C_m \alpha_n + C_n \alpha_m}, \qquad (3)$$

где Z_m, Z_n-заряды атомов в наноструктуре сортов A, B.

Глубина проникновения i-го иона с энергией E_{0i} в наноструктуру пропорциональна модулю вектора проекции свободного пробега иона $\vec{R}_{red}$ на направление составляющей вектора начальной скорости и перпендикулярного к плоской границе наноструктуры так, что

$$R_{red} = cE_{0i}, \qquad (4)$$

где E_{0i} – энергия входящего иона, c – некоторый коэффициент, который не зависит от величин R_{red}, E_{0i}, а зависит только от вида наноструктурной среды.

В условиях случайных значений величины R_{red} для оценки истинной глубины проникновения удобно пользоваться статистическим

усреднением величины R_{red} так, что истинное ее значение будет $\overline{R}_{red} = R_{red}^{\max}/2$, с учетом, что

$$C = R_{red}^{*} / \overline{E}_{0i} \,, \tag{5}$$

где R_{red}^{*}, $\overline{E}_{0i}$ – параметры эталонной системы и исследуемой при данном значении $\varepsilon = const$ из (1). В настоящей работе в качестве эталонной системы выбрана $H^{+} - Al_2O_3$ с величиной $\overline{R}_{red.H^{+}}^{*} = \overline{R}_{red\,max}$ по данным [1].

Соотношения (1) и (3) описывают процесс дрейфа иона, входящего наноструктуру по причине действующей силы электрического внешнего поля с энергией E_{0i}. Учтем дополнительный эффект обменного взаимодействия входящего иона и атомов наноструктуры следующим образом.

В рамках принятого термина обменного взаимодействия надо понимать изменение энергетического состояния входящего положительного иона в структуру в связи с переходом к нему некоторого количества валентных электронов с внешних оболочек атомов наноструктурной среды. Такой процесс должен приводить к уменьшению его заряда Z и к уменьшению силы электрического поля, действующей на ион, и далее к уменьшению величины $\overline{R}_{red}$ для данной системы входящий ион-структура.

Опишем эффект обменного взаимодействия, обозначенный выше, с учетом соотношения (1) и нового значения входящего i-го иона Z_i^0 в связи с этим взаимодействием.

В рамках теории электроотрицательности ионов некоторой среды можно предложить формулу для электроположительности иона наноструктуры ε_p так что

$$\varepsilon_p = -(\varepsilon_n - \varepsilon_{n\min}), \tag{6}$$

где ε_n, $\varepsilon_{n\min}$ – значения электроотрицательности ионов по шкале Паулинга [4]. Пользуясь формулой (4) можно найти истинный заряд иона Z_i^0, входящего в наноструктурную среду с учетом обменного взаимодействия между этим ионом и ионами среды так что

$$Z_i^0 = \frac{\xi_p^{*}}{\overline{\xi}_p}\overline{Z}_i + \overline{Z}_i = \overline{Z}_i(1 - \frac{\xi_p^{*}}{\xi_p}) \,, \tag{5}$$

где $\overline{Z}_i$ - заряд иона до вхождения в структуру; ξ_p^{*}- электроположительность иона в эталонной (опорной) системе входящий ион-структура.

Выбирая эталонную систему $H_1^{+} - Al_2O_3$ по данным [1] получим из [4] значение $\xi_p^{*} \cong -1{,}053$ и с учетом (5) имеем

$$Z_i^0 = Z_i(1 - \frac{\xi_n^* - \xi_{n\min}^*}{\xi_p}) \qquad (6)$$

При известном значении $\xi_{n\min}^* \cong 0,667$ по шкале Паулинга [4] и компьютерной обработке базы данных для ξ_p по этой шкале получим соотношение для величины Z_i^0 из (6) так что

$$Z_i^0 \cong Z_i(1 + \frac{1,386}{0,446N_i + 0,076}), \qquad (7)$$

где Z_i – заряд иона элемента из таблицы Менделеева (ТМ), N_i – номер группы элемента для выбранного периода в ТМ.

При использовании уравнения (7) предполагается усредненная периодичность изменения функции $Z_i(N_i)$ при изменении номера группы элемента в ТМ так, что $Z_i^0 = \overline{Z}_i^0$.

Из уравнения (7) получим при $N_i \to N_{i\min}$ значение величины $\overline{Z}_i^0 \to \overline{Z}_{i\max}^0$, а при $N_i \to N_{i\max}$ соответственно $\overline{Z}_i^0 \to \overline{Z}_{i\min}^0$, что подтверждает правильный выбор исходного соотношения (4) для электроположительности ξ_p входящего иона.

На рис. 1 приведена полученная нами графическая зависимость функции $\overline{Z}_i^0 = \overline{Z}_i^0(N_i)$, из которой следует, что по мере роста числа электронов на валентной оболочке иона наноструктурной среды истинный положительный заряд $\overline{Z}_i^0$ входящего иона уменьшается.

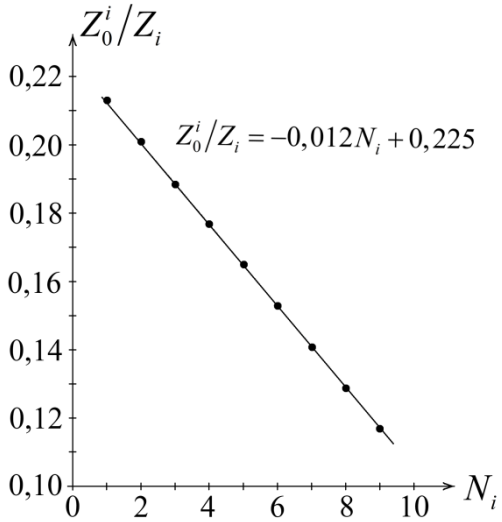

Рис. 1. Зависимость величины отношения Z_i^0/Z_i от параметра N_i для i-го иона в системе входящий ион-структура. ● – точки полученные по формуле (7)

Это должно привести к уменьшению параметра длины свободного пробега $\overline{R}_{red}$ в данной структуре.

На рис. 2 приведены точки зависимости полученной функции $\overline{R}_{red}(E_0)$

для систем $H_1^+ - Al_2O_3$, $O^+ - Al_2O_3$, $CO_2^+ - Al_2O_3$ с учетом или в отсутствие механизма обменного взаимодействия на фоне известных зависимостей $\bar{R}_{red}^{lit}(E_0)$ по данным [1]. Из рис. 2 видно, что средняя длина свободного пробега для всех ионов, входящих в наноструктуру, уменьшается при обменном механизме взаимодействий.

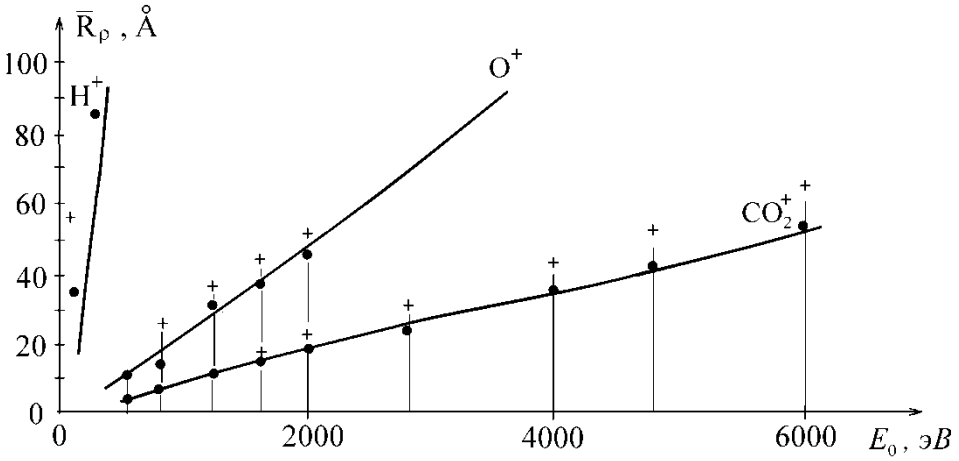

Рис. 2. Сравнение зависимости $\bar{R}_{red} = f(E_0)$ для системы входящий ион-наноструктура Al_2O_3 по данным настоящей работы и данным [1]: + – без учета обменного взаимодействия; ● – с учетом обменного взаимодействия.

Интересно отметить, что полученные при этом величины $\bar{R}_{red}^{lit}$ лучше согласуются с литературными величинами, что свидетельствует о достаточной корректности предлагаемой выше теории переноса в условиях действия механизма обменного взаимодействия ионов. Надо полагать, что это имеет место, когда происходит процесс перехода положительных ионов через межфазную границу двух сред под действием приложенного электрического поля.

Библиографический список:

1. **Романов, В.Г.** Внедрение технологического процесса нанесения прострельной пленки на МКП методом переноса / В.Г. Романов // Отчет по НИР. − Л.: ЛИТМО, 1984. − 141 с.

2. **Lindhard, J.** Range Concepts and Heavy Ion Ranges / J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott // Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. Ser. Mathematisk-fysiske meddelelser. – 1963. – Bd 33. – №14. – P. 1-42.

3. **Гринюк, В.Н.** К методике оценки толщины нанопленок Al_2O_3 при прямом прострелe их электронами энергий $0{,}6-1{,}4$ КэВ / В.Н. Гринюк, П.К. Коротков, В.А. Созаев // Тринадцатый Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов (ODPO-13)»: Труды симпозиума, Ростов-на-Дону – пос. Лоо (16-21 сентября 2010). – Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2010 – С. 193-195.

4. **Киттель, Ч.** Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1963. – 695 с.