

19. Хенрици-Оливе Г., Оливе С. Химия каталитического гидрирования СО. М.: Мир, 1987.
20. Udovic N., Kelley R., Madey T. — Surf. Sci., 1985, v. 150, p. L71—L76.
21. Кузнецов В.А. Термозмиссионные реакторы. — In: Proc. the 3rd Intern. Conf. on Therm. Electr. Power Gener., Yuelich, FRG, 1972, v. 1, p. 365—380; Грязнов Г.М., Ельцов А.И., Кузнецов В.А. и др. Энергетические испытания термозмиссионного реактора «Топаз-3». — In: Proc. the 1975 Therm. Conv. Spec. Meeting, Eindhoven, Netherlands, 1975.
22. Пономарев-Степной Н.Н. Ядерная энергетика в космосе. — Атомная энергия, 1989, т. 66, вып. 6, с. 371—374.
23. Фромм Е., Гебхардт Е. Газы и углерод в металлах. М.: Металлургия, 1980. 712 с.
24. Примаков Н.Г., Руденко В.А., Казарников В.В., Овчаренко М.К. Эффекты массопереноса в конструкционных материалах в условиях работы термозмиссионных реакторов-преобразователей: Препринт ФЭИ-2717, 1998. 19 с.
25. Андреев П.В., Еремин А.Г., Жаботинский Е.Е. и др. Основные положения концепции термозмиссионных космических ЯЭУ второго поколения в составе ТЭМ с учетом возможностей современных средств выведения. Тезисы докл. 5-й Межд. конф. «Ядерная энергетика в космосе», Подольск, март 1999, с. 8.
26. Дегальцев Ю.Г., Пономарев-Степной Н.Н., Кузнецов В.Ф. Поведение высокотемпературного ядерного топлива при облучении. М.: Энергоатомиздат, 1987. 208 с.
27. Котельников Р.Б., Башлыков С.Н., Каштанов А.И., Меньшикова Т.С. Высокотемпературное ядерное топливо. М.: Атомиздат, 1969. 368 с.
28. Пономарев-Степной Н.Н., Хрулев А.А. Утечка продуктов деления из высокотемпературных топливных материалов. — В кн.: Межд. конф. по термозмиссионному преобразованию энергии, Юлих, Германия, июнь 1972, т. 2, с. 963—978.
29. Усов В.А., Фоменко В.Д., Хрулев А.А. К вопросу консервации объектов космического назначения с ядерно-энергетической установкой. Тезисы докл. отраслевой юбилейной конф. «Ядерная энергетика в космосе». Обнинск, ФЭИ, 1990, ч. 1, с. 288—289.
30. Асмолов В.Г. Результаты исследований тяжелых аварий водоохлаждаемых реакторов. — Атомная энергия, 1994, т. 76, вып. 4, с. 282—302.
31. Чернецов М.В., Козлов А.В., Скрыбин Л.А. Результаты электронно-микроскопических исследований и элементного анализа поверхностей вентилируемого высокотемпературного твэла после реакторных испытаний. Тезисы докл. 5-й Межд. конф. «Ядерная энергетика в космосе», Подольск, март 1999, с. 51.
32. Семенов В.П., Синявский В.В., Юдицкий В.Д. Космическая двухрежимная ядерная энергетическая установка для транспортировки информационных спутников на геостационарную орбиту и длительного (до 15 лет) энергоснабжения их аппаратуры. — В кн.: Расчет, проектирование, конструирование и испытания космических систем. Ч. 3 «Космические термозмиссионные ядерные энергетические установки и электроракетные двигатели большой мощности», 1998, РКК «Энергия» им. С.П. Королева, с. 8—20, 325 с.
33. Николаев Ю.В., Гонтарь А.С., Лапочкин Н.В. и др. Многоэлементный электрогенерирующий канал для ядерной энергодвигательной системы. Тезисы докл. Межд. сем. «Космическая энергетика XXI века (Ядерный аспект)», Обнинск, Подольск, ноябрь 1998, с. 70.
34. Читайкин В.И., Овчаренко М.К., Ионкин В.И. и др. Комбинированная ядерно-энергетическая установка ТЭМБР с реактором-преобразователем на быстрых нейтронах. Тезисы докл. 5-й Межд. конф. «Ядерная энергетика в космосе», Подольск, март 1999, с. 21.
35. Ярыгин В.И., Ионкин В.И., Купцов Г.А. и др. Космические термозмиссионные ядерные энергетические установки нового поколения с вынесенными из активной зоны реактора электрогенерирующими системами. Тезисы докл. 2-го Межд. сем. «Космическая ядерная энергетика XXI века» (19—21 апреля 2000 г.), Обнинск, 2000, с. 17.
36. Ярыгин Д.В., Миронов В.С., Соловьев Н.П. и др. Термозмиссионный преобразователь с высокими выходными электрическими характеристиками с Me—O системой на коллекторе. — Там же, с. 71.

УДК 621.362:537.533.2

НЕМОНОТОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ ВНУТРИ АДсорбированного СЛОЯ НА КОЛЛЕКТОРЕ ТЕРМОЗМИССИОННОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ

Сидельников В.Н. (ГНЦ РФ—ФЭИ им. А.И. Лейпунского)

В термозмиссионном преобразователе возникает потребность в развитии теоретических подходов для описания механизмов эмиссии электронов из электродов с многослойными покрытиями. К настоящему времени получили распространение полуэмпирические подходы описания эмиттируемого тока в зависимости от параметров элект-

рода [1—4]. К сожалению, эти подходы не способствовали выяснению причин и механизмов образования низкой работы выхода электродов. Расчетно-теоретические исследования эмиссии электронов из электродов [5, 6] и другие проводили для чистых электродов, без покрытий. В связи с этим оказалась целесообразной разработка расчетно-теоретической модели эмиссии электронов из электрода с различными покрытиями. В основу разрабатываемой расчетно-теоретической модели эмиссии электронов положено многоэлектронное приближение [5], учитывающее эффекты межэлектронного взаимодействия, такие, как обменный и корреляционный. Используется упрощающее предположение о замене ионных остовов полубесконечным положительно заряженным равномерным фоном (модель «желе»). Профиль электронной плотности в полубесконечной модели желе предполагается однородным в поперечных направлениях. В направлении, перпендикулярном поверхности, электроны «выливаются» из электрода, создавая электростатический диполь. Распределение электронов не имеет резкого края. Ход потенциала в заряженной среде описывается уравнением Пуассона

$$d^2\varphi/dz^2 = 4\pi(n_0 - n_1),$$

где φ — потенциал электрического поля; z — расстояние от поверхности электрода; n_0 — плотность «однозарядных» ионов; $n_1 = n \cdot 10^{-24}$ см⁻³; n — плотность электронов. Плотность электронного газа в многоэлектронном приближении принято определять из минимизации функционала [6]:

$$\frac{\delta}{\delta n}(E(n) - \Phi N) = 0,$$

где E — энергия взаимодействующего неоднородного электронного газа; Φ — работа выхода электрода. Варьирование функционала позволяет получить дифференциальное уравнение для плотности электронного газа [7]

$$\frac{d^2n_1}{dz^2} - \frac{2}{3n_1} \left(\frac{dn_1}{dz} \right)^2 + 30n_1^{4/3} [(\varphi - \Phi) - f_0 - f_1 - f_2] = 0,$$

где f_0 — составляющая эффективного потенциала вследствие учета кинетической энергии электронов; f_1 — обменная составляющая; f_2 — корреляционная составляющая [7].

Систему дифференциальных уравнений решали конечно-разностным методом с использованием принципа установления. Расчеты позволили установить, что в случае металлического электрода без адсорбированного слоя на его поверхности ход плотности электронного газа, электрического потенциала и эффективного потенциала вне электрода монотонен и имеет спадающий характер. Работа выхода электрода обуславливается силами электростатического притяжения разноименных зарядов и квантовыми эффектами межэлектронного взаимодействия, такими, как обменный и корреляционный. Наличие на поверхности электрода адсорбированного слоя приводит к замедлению спада плотности электронов с удалением от поверхности электрода. Обусловлено это наличием в слое положительного заряда ионов небольшой плотности.

Вследствие спадающей плотности электронов вне электрода ближняя к электроду половина адсорбированного слоя сохраняет избыточный отрицательный заряд, дальняя приобретает избыточный положительный заряд (рис. 1). Такая частичная компенсированность отрицательного заряда электронов внутри слоя ослабляет силу, удерживающую электроны в пределах электрода.

Таким образом, внутри слоя реализуется электростатический диполь, роль которого возрастает с повышением степени покрытия. В итоге ход потенциала внутри покрытия становится немонотонным, с горбом, высота которого увеличивается с ростом степени покрытия и достигает нескольких электрон-вольт. С ростом высоты горба начинает деформироваться и эффективный потенциал, главным слагаемым которого яв-

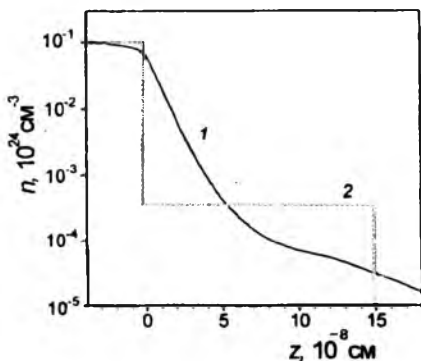
ляется электростатический потенциал. На эффективном потенциале появляется дополнительный потенциальный барьер для электронов, высота которого увеличивается с ростом степени покрытия электрода и достигает 2 эВ при ширине барьера 0,5—0,1 нм (рис. 2).

Таким образом, наличие дополнительного потенциального барьера на эффективном потенциале можно объяснить с позиции электрического диполя, реализующегося в покрытии на электроде. Электроны, летящие из электрода, сперва тормозятся прилегающим к поверхности электрода отрицательным зарядом, затем в зоне положительного заряда (в наружной части покрытия) ускоряются. Это и обуславливает горбообразный характер эффективного потенциала, задерживающего как летящие из электрода электроны, так и летящие к электроду из плазмы. Высота дополнительного барьера, естественно, зависит от момента диполя, т.е. от положительного и отрицательного зарядов. Положительный заряд пропорционален степени покрытия, отрицательный — вакуумной работе выхода. Следовательно, можно ожидать роста высоты задерживающего барьера с увеличением вакуумной работы выхода электрода.

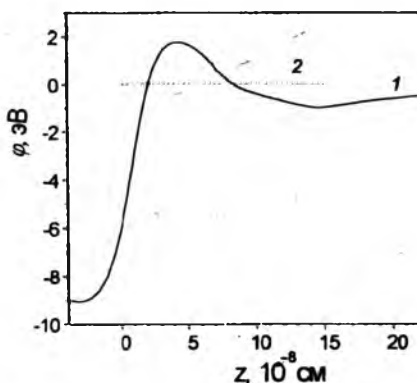
Были проведены расчеты эмиссии электронов из электродов с вакуумной работой выхода от $\Phi_0 = 2,7$ эВ ($n_1 = 0,003$) до $\Phi_0 = 7,5$ эВ ($n_1 = 0,5$). Как видно из рис. 3, а, в случае вакуумной работы выхода электрода ниже 5,3 эВ ($n_1 < 0,1$) для цезиевого покрытия ($L = 0,1$ нм) дополнительного потенциального барьера нет. Интерполяция данных позволяет получить полуэмпирическую формулу расчета высоты дополнительного потенциального барьера для электронов внутри монослойного покрытия:

$$\varphi_0 \cong \ln(1 + 0,007 n_c L^3),$$

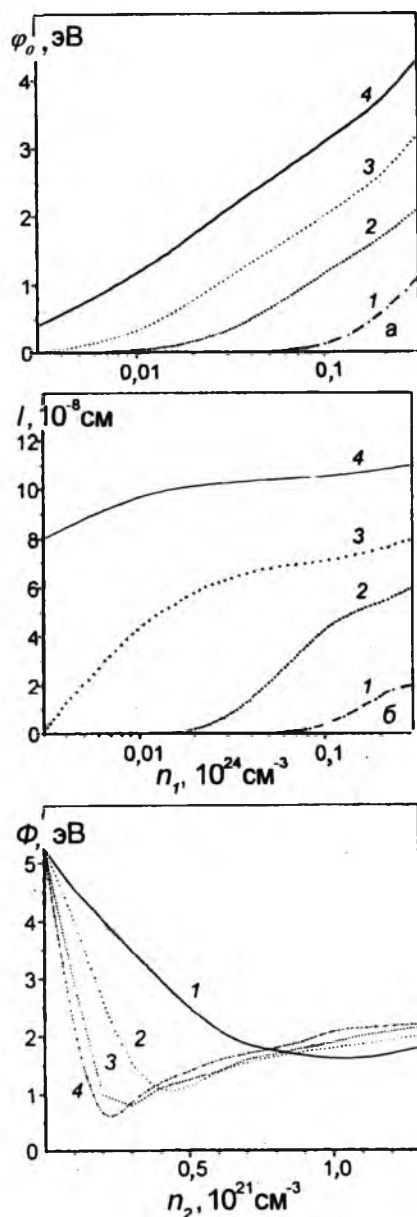
где n_c — плотность однозарядных ионов покрытия; L — толщина адсорбированного слоя. Из рис. 2 видно, что форма потенциального барьера близка к куполообразной. Ширина барьера на полувысоте (рис. 3, б) слабо зависит от плотности заряда ионов электрода и возрастает с ростом толщины адсорбированного слоя линейным образом. Интерполяция этих расчетных данных позволяет получить полуэмпирическую формулу расчета ширины барьера на полувысоте: $l \cong 0,35L$. Из этой формулы следует, что ширина потенциального барьера для электронов составляет примерно треть толщины адсорбированного слоя. Толщина адсорбированного слоя при степени покрытия $\theta < 1$, как оказалось, пропорциональна межионному расстоянию для вещества слоя: $L \cong 1,1L_{ii} = 1,1 n_c^{-3}$. В случае иридиевого покрытия толщина монослоя составляет 0,25 нм, лантанового — 0,5 нм, цезиевого (это наиболее «рыхлое» покрытие) — 0,1 нм. В соответствии с формулой для l ширина потенциального барьера внутри цезиевого покрытия составляет ~0,2—0,3 нм. Длина волны Де-Бройля для электронов энергией 1 эВ равна ~0,12 нм. Следовательно, можно ожидать уменьшения коэффициента про-



Р и с. 1. Распределение плотности электронов вблизи поверхности электрода с монослойным покрытием при $n_0 = 0,1$ (вольфрам), $n_1 = 0,00035$, $L = 0,15$ нм: 1, 2 — плотность электронов и ионов соответственно



Р и с. 2. Ход эффективного потенциала вблизи поверхности электрода с монослойным покрытием: 1 — эффективный потенциал; 2 — местоположение адсорбированного слоя



Р и с. 4. Работа выхода электрода с двух-
слойным покрытием при $n_0 = 0,1$
(вольфрам), при L , равном 0 (1), 0,5 (2),
0,1 (3), 0,15 нм (4)

работы выхода электродов. Необходимо изучение явления роста потенциального барьера в адсорбированном слое, а также тщательный анализ влияния особенностей структуры покрытий на форму и размер барьера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Raser N. The collector enigma. — In: Proc. Thermionic Energy Conversion Specialist Conf., Goeteborg, Sweden, 1993, p. 1.
2. Gyftopoulos E., Hatsopoulos G. Quantum-thermodynamic meaning of electronegativity and work function. — In: Second Intern. Conf. on Thermionic Electrical Power Generation, Streasa, 1968, p. 45.
3. Яковлев В.М. Простейшее выражение работы выхода электрона. — Поверхность, 1994, № 12, с. 18—20.

Р и с. 3. Высота (а) и ширина дополнительного потенциального барьера (б) для электронов внутри монослойного покрытия при L , равном 0,1 (1), 0,15 (2), 0,2 (3), 0,3 нм (4)

хождения электронов через цезиевый слой в 1,5—2 раза из-за наличия в нем сравнительно неширокого потенциального барьера. Для снижения работы выхода электрода приходится наносить на все более рыхлые (с меньшей плотностью ионов) слои. Однако с ростом толщины адсорбированного слоя ширина потенциального барьера возрастает, следовательно, коэффициент прохождения электронов сквозь слой будет снижаться. Снижение вероятности прохождения электронов сквозь адсорбированный слой эквивалентно росту эффективной работы выхода электрода и росту коэффициента отражения электронов от электрода. В случае коллектора это может приводить к потерям полезного напряжения на 0,1—0,5 В. На основании экспериментальных и расчетных работ можно сделать предварительный вывод о том, что достичь стабильной работы выхода электрода ниже 1,5 эВ при минимальной работе выхода тугоплавких электродов с однослойным цезиевым покрытием затруднительно. Нанесение двух-слойного покрытия на электрод, как и следовало ожидать, расширяет диапазон достижимой работы выхода (рис. 4). Здесь в качестве первого слоя используется изолятор толщиной до 0,15 нм. Вторым слоем является адсорбируемый цезий толщиной 0,1 нм. В случае изолирующего слоя толщиной 0,15 нм при оптимальном покрытии цезием ($\theta \approx 0,2$) достигается работа выхода $\sim 0,3$ эВ. Однако внутри изоляционного слоя реализуется потенциальный барьер для электронов высотой $\sim 2,8$ эВ при ширине барьера $\sim 0,1$ нм (на полувысоте). Из-за барьера эффективная работа выхода электрода возрастет на 0,5—1 эВ, но уже в этом случае можно ожидать эффективной работы выхода электрода ~ 1 эВ.

Таким образом, создаваемая модель эмиссии электронов из электродов с многослойными покрытиями на них позволяет выяснить причины, ответственные за образование и деградацию низкой ра-

4. Антонов А.Ю., Денисов В.П. Математическое моделирование прохождения электронов через границу твердое тело—вакуум при малых изменениях работы выхода. — Там же. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 1999, № 12, с. 116—118.
5. Wagner H. Work function of bare and coated metal surfaces. — In: 3-rd Intern. Conf. on Thermionic Electrical Power Generation, June 1972, Julich, FRG.
6. Smith J. Many-electron theory of electron work functions and surface potential characteristics for selected metals. — Phys. Rev., 1969, v. 181, № 2, p. 522—529.
7. Сидельников В.Н. Расчетно-теоретическая модель эмиссии электронов из электрода: Препринт ФЭИ № 2683, 1998.

УДК 621.362:537.58

БАНК ДАННЫХ ВОЛЬТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕРМОЭМИССИОННОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ

Виноградов Е.Г., Миронов В.С., Смольникова Г.И., Юферов А.Г., Ярыгин В.И.
(ГНЦ РФ—ФЭИ им. А.И. Лейпунского)

В лаборатории исследования фундаментальных проблем преобразования различных видов энергии ГНЦ РФ—ФЭИ уже более 35 лет ведутся работы, поддерживающие проектные исследования в области космических ЯЭУ [1—4]. В результате накоплен большой экспериментальный материал в виде вольт-амперных характеристик дуговых режимов работы с разными электродными материалами преобразователей [1]. Создаваемый банк данных призван сохранить экспериментальный материал в электронном виде. Он предназначен также для использования в составе современных информационно-моделирующих систем, которые создаются для поддержки проектных работ по электрогенерирующим каналам и ЯЭУ нового поколения [5]. Банк данных вольт-амперных характеристик термоэмиссионного преобразователя — часть термоэмиссионной базы, которая будет включать результаты исследований термоэмиссионного преобразователя, электрогенерирующего канала, поверхности электродов и пространства межэлектродного зазора, расчетные данные и библиографические сведения. Это большая самостоятельная научно-техническая работа, которая требует решения вопросов, определяемых аппаратно-техническими средствами и характеристиками данных, хранящихся в базах и банках данных [6, 7].

На рис. 1 показана структура данных эксперимента. Она включает для каждого измерения блок VJ , где хранятся вольт-амперные характеристики (V — напряжение, J — плотность тока) в оцифрованном виде (~ 300 — 400 точек), блок параметров (всего около 50) и температурных полей ($P + TP$) (см. таблицу). Общий объем информации, полученной в процессе исследования, например, электродной пары K17 составил ~ 11 Мбайт.

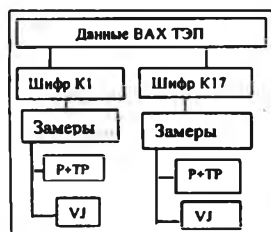


Рис. 1. Структура данных эксперимента

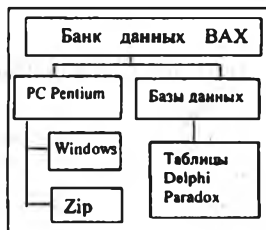


Рис. 2. Компоненты банка данных вольт-амперных характеристик преобразователя

Структура данных, подлежащих хранению, имеет динамический характер и по количеству таблиц, и по числу полей в таблицах, и по количеству записей в таблицах, чем отличается от традиционных принципов проектирования баз данных [8].

Для повышения производительности обработки массива создается банк данных вольт-амперных характеристик преобразователя, структура которого показана на рис. 2. Из него видно, что данные обрабатываются современными средствами с использованием компьютера типа Pentium с операционной системой Windows и разных исторически сложившихся программных процедур [9—13].