

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

М-345

P14-87-903

И.М.Матора, С.И.Куликова

**АСИМПТОТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ
И ВЫРАЖЕНИЕ РАБОТЫ ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА
ИЗ МЕТАЛЛОВ И НЕМЕТАЛЛОВ**

Направлено в "Журнал технической физики"

1987

Основываясь на известном факте независимости работы выхода ϕ электрона из любого тела от энергии выбивающей его частицы, например фотона, и рассматривая случай, когда энергия фотона $h\nu \rightarrow \infty$, и, следовательно, скорость электрона $v_e \rightarrow c$ велика, приходим к простой, с точки зрения вычисления ϕ , модели явления.

В рассматриваемых условиях все заряды тела за время ухода электрона не успевают заметно изменить свое положение, и это дает основание как для металлов, так и для неметаллов записать /в гауссовой системе единиц/:

$$\phi = \frac{e^2}{r_\phi}, \quad /1/$$

где e - величина заряда электрона, а r_ϕ - характерное расстояние между двумя единственными нескомпенсированными зарядами системы - самим эмитируемым электроном и образовавшейся на его месте дыркой с положительным зарядом такой же, как у электрона, величины.

Если претендовать на универсальность формулы /1/, то значение r_ϕ должно определяться всеми геометрическими особенностями взаимного расположения зарядов в рассматриваемом конкретном теле, в том числе и, например, их неизотропностью относительно направлений на разноиндексные грани кристалла.

Однако в этой работе мы ограничимся пространственно изотропным приближением, позволяющим быстро вычислить значения ϕ по всем элементам таблицы Менделеева, для которых измерена плотность вещества в конденсированном состоянии /1,2,3/, с тем, чтобы получить возможно более полный материал для проверки адекватности модели.

Итак, предположим, что для всех элементов

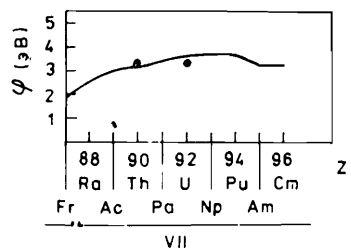
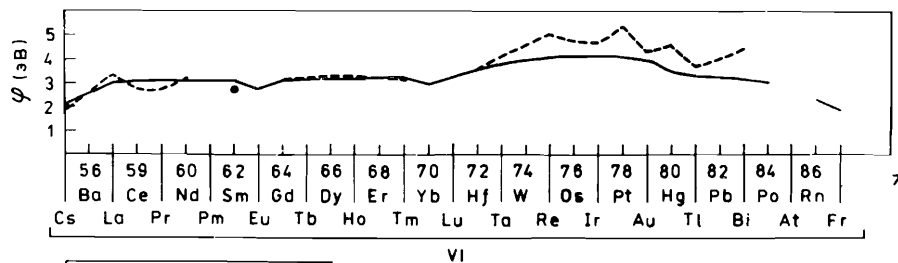
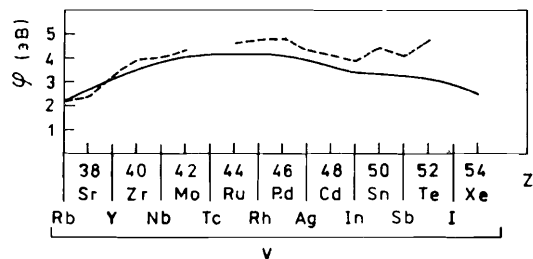
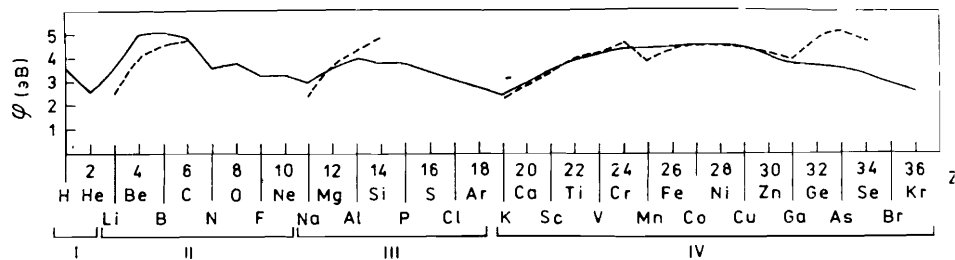
$$r_\phi = r \cdot \left(\frac{1}{N}\right)^{1/3}, \quad (N = \frac{\rho}{A}), \quad /2/$$

где ρ - плотность тела, A - масса атома в нем, а r - единственный подгоночный параметр модели, значение которого примем равным $r = 3^{1/3}$.

Тогда в этом приближении работа выхода электрона для составленных из одинаковых атомов тел есть

$$\phi = e^2 \left(\frac{N}{3}\right)^{1/3} \text{ эрг} = 10^{-7} N^{1/3} \text{ эВ.} \quad /3/$$

Что касается измерений ϕ , то практически все из имевшихся к 1981 г. экспериментальных данных систематизированы и обобщены в известной монографии В.С.Фоменко^{/4/}. Подавляющее количество опытных данных относится к элементам - металлам и полупроводникам, но имеются также три измерения для аллотропных модификаций диэлектрика иода^{/4,5/}. В^{/4/} приведены наиболее достоверные, так называемые рекомендуемые значения работы выхода, выбранные после анализа многочисленных опытных и расчетных их величин для поликристаллических образцов 66 элементов.



На рисунке сплошной линией представлена зависимость рассчитанной по формуле /3/ работы выхода ϕ от порядкового номера элемента Z , а ход рекомендуемых значений ϕ ^{/4/} - отрезками пунктирной кривой и отдельными точками /для Sm, Th и U/.

Расчетные ϕ по элементам H, N и O соответствуют их твердой фазе, а по He, F, Ne, Cl, Ar, Br, Kr, Xe, Hg - жидкой. На рисунке дана работа выхода из углерода-графита, а рассчитанная для алмаза $\phi = 5,6$ эВ. Расчет для фосфора-диэлектрика дает $\phi = 3,5$ эВ, а значение для P металлического имеется на графике. Мы располагали только плотностью иода орторомбического /4,94 г/см³/, для которого $\phi = 2,86$ эВ.

И периодичность, и амплитуда вариации в ходе расчетной кривой $\phi(Z)$ согласуются с поведением практически всех имеющихся отрезков кривой рекомендуемых значений работы выхода, причем протяженность каждого периода равна интервалу по Z периода в таблице Менделеева, а фазы колебаний во всех периодах одинаковы - в их концах расположены минимумы. Средняя величина отклонения вычисленных значений от рекомендованных ϕ по всем 66 элементам^{/4/} ~ 12%. Такое согласие, по-видимому, можно считать удовлетворительным.

Таким образом, отмечавшееся ранее наличие периодичности ϕ по атомному номеру Z ^{/6/} и прямая зависимость между плотностью элемента и его работой выхода^{/7/} получили здесь количественную формулировку. Вместе с тем показано, что связь между ϕ и числом z валентных электронов элемента, противоречивость которой была проиллюстрирована в^{/7/}, в соответствии с моделью отсутствует.

В ходе рассчитанных значений $\phi(Z)$ большие скачки производной по Z наблюдаются только на границах периодов и границах между 8 и 9, а также между 9 и 10 рядами периодической системы Д.И.Менделеева в редакции В.П.Гладышева^{/8/}. Но вместе с тем имеется один короткий отрезок $6 < Z < 11$ с двумя аномально короткопериодными колебаниями. Вероятной причиной аномалии может быть неточность измерения плотности ρ твердых азота и кислорода и жидких фтора и неона, которая, возможно, взята несколько выше действительной у O и Ne и ниже - у N и F.

Модель дает возможность оценить и величину работы множественного выхода двух (ϕ_2) или более (ϕ_n) электронов, вызванного одним фотоном, в частности выхода связанной в бозон пары электронов из элемента-сверхпроводника или сложного высокотемпературного сверхпроводника. В последнем случае из-за большого расстояния между электронами в паре взаимодействия каждого из электронов пары с электроном-партнером, дальней дыркой и дырок между собой малы и ими можно пренебречь. В результате работа выхода пары $\phi_2 \sim 2\phi / \phi$ - работа выхода одного электрона из сверхпроводника/.

Фотоэмиссия пар может быть зарегистрирована в экспериментах типа /9, 10/ при сопоставлении спектров эмитированных из образца частиц до и после его перехода в сверхпроводящее состояние.

В заключение выражаем благодарность В.Л.Аксенову, Л.Б.Голованову, Е.В.Куликову, В.И.Луцикову, С.А.Ракитянскому за ценные дискуссии и помощь.

ЛИТЕРАТУРА

1. Свойства элементов. М.: Metallurgy, 1976.
2. Таблицы физических величин. М.: Атомиздат, 1976.
3. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий справочник химика. Л.: Химия, 1977.
4. Фоменко В.С. Эмиссионные свойства материалов. Киев: Наукова думка, 1981.
5. West D.-Canad. J. Phys., 1953, v.31, p.691.
6. Michaelson H.J. - J.Appl.Phys., 1950, v.21, p.536.
7. Царев Б.М. Контактная разность потенциалов. М.: ГИТТЛ, 1955, с.165-172.
8. Гладышев В.П. - Ж.физ.химии, 1985, 59, в.6, с.1458.
9. Johnson P.D. et al. - Phys.Rev., 1987, v.35B, No.16, p.8811.
10. Dauth B. et al. - Z.Phys. B. Cond. Matter, 1987, v.68, p.407.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 декабря 1987 года.

Матора И.М., Куликова С.И.

P14-87-903

Асимптотическая модель и выражение
работы выхода электрона из металлов
и неметаллов

На основе факта независимости работы выхода ϕ от скорости эмитируемого из твердого или жидкого тела электрона предложена модель явления и формула $\phi = 10^{-7} N^{1/3} \text{эВ} / N$ - число атомов элемента в 1 см^3 . Рассчитана работа выхода для 95 элементов таблицы Менделеева. Средняя величина отклонения расчетных ϕ от полученных к настоящему времени так называемых рекомендуемых значений работы выхода для 66 элементов близка к 12%.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой.

Matora I.M., Kulikova S.I.

P14-87-903

Asymptotic Model and Expression of the
Electron Work Function for Metals
and Nonmetals

The asymptotic model and the formula $\phi = 10^{-7} N^{1/3} \text{eV}$ are proposed for the electron surface work function ϕ for metals, semiconductor and nonmetal elements (N - number of atoms per cm^3). The work functions for 95 elements of Mendeleev Table are calculated. The average value of difference between the calculated and 66 well-known so-called recommended values of work function is about 12%.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987