HAL open science

Influencia de las condiciones de la superficie del cátodo en la emisión de corriente parásitas

Maykel Márquez-Mijares, Bruno Lepetit, Didier Lemoine

To cite this version:

Maykel Márquez-Mijares, Bruno Lepetit, Didier Lemoine. Influencia de las condiciones de la superficie del cátodo en la emisión de corriente parásitas. Anales de la Academia de Ciencias de Cuba, 2022, 12 (1), pp.9 P. hal-03573003

HAL Id: hal-03573003

https://hal.science/hal-03573003v1

Submitted on 14 Feb 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial 4.0 International License

ANALES DE LA
Academia de Ciencias de Cuba

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Premio Anual de la Academia de Ciencias de Cuba, 2020

Influencia de las condiciones de la superficie del cátodo en la emisión de corriente parásitas

Maykel Márquez Mijares [1, 3] * https://orcid.org/0000-0003-2503-2802
Bruno Lepetit [2] https://orcid.org/0000-0001-9099-6742
Didier Lemoine [2]

[1] *Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas. Universidad de La Habana. La Habana, Cuba*
[2] *Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité. Universidad de Toulouse. Toulouse, Francia*
[3] *Titular de la Academia de Ciencias de Cuba.*

**Autor para la correspondencia:* mmarquez@instec.cu

Palabras clave

inyector de partículas neutras; corrientes parásitas; emisión electrónica de campo

RESUMEN

Introducción. Dentro de las cámaras de alto vacío de los inyectores de partículas neutras al plasma de los futuros reactores de fusión nuclear, como el ITER o DEMO, se producen las llamadas "corrientes parásitas" que, con el tiempo, provocan el deterioro de diferentes componentes. A pesar de que esta emisión típica tiene una explicación sobre la base de la teoría de emisión de campo, aún quedan muchas interrogantes por ser descritas. El objetivo fue utilizar la Teoría del Funcional de la Densidad, como base principal para la descripción de algunos aspectos de la emisión electrónica desde superficies contaminadas o con irregularidades nanométricas. **Métodos.** Los estudios fueron realizados en superficies de tungsteno y carburo de tungsteno contaminadas con carbono, así como en superficies corrugadas de tungsteno limpio. **Resultados.** Se generaron nuevos conocimientos sobre el origen de las "corrientes parásitas" y su relación con diferentes irregularidades de las superficies de los cátodos.

Influence of the cathode surface conditions on dark current emission

Keywords

plasma heater; dark current; electronic field emission

ABSTRACT

Introduction. Inside the high vacuum chambers of the plasma heater of the future nuclear fusion reactors, such as ITER or DEMO, so-called "dark currents" are produced which, with time, cause damages to different components. Although this typical emission has an explanation on the basis of field emission theory, there are still many questions to be described. The objective was to use a model based on Density Functional Theory to describe some aspects of the field emission due to contaminated surfaces or nanometric irregularities. **Methods**. Studies were conducted on tungsten and tungsten carbide surfaces contaminated with car-

bon, as well as on clean tungsten corrugated surfaces. **Results**. Knowledge of the origin of "dark currents" was advanced, as well as its relation with different irregularities on the cathode surfaces.

INTRODUCCIÓN

Las denominadas "corrientes parásitas" caracterizan una emisión electrónica típica de baja intensidad, que se produce generalmente al someter un cátodo a grandes campos eléctricos y un alto vacío. Mientras en unos casos tal emisión eléctrica puede ser obtenida intencionalmente en otros puede resultar un serio problema. Por ejemplo, un funcionamiento prolongado del sistema de inyección de partículas neutras al plasma de los reactores de las futuras plantas de fusión nuclear, como el ITER y DEMO, provocaría un deterioro considerable de los materiales en la cámara de aceleración. Aunque el surgimiento de las "corrientes parásitas" tiene una explicación sobre la base de la teoría de emisión de campo, aún quedan muchas interrogantes por ser descritas.

La emisión electrónica de materiales, especialmente metálicos, al ser sometidos a elevados campos electrostáticos puede ser descrita por la teoría de Fowler-Nordheim [1] (FN). El ancho de la barrera del potencial electrostático es disminuido, por la acción de un campo externo, y atravesado, por efecto túnel, por los electrones de las capas de valencia, menos enlazados y más próximos a la banda de conducción. De esta forma, se establece una relación entre el flujo electrónico, el campo externo aplicado y el trabajo de extracción. Una mejor predicción del campo macroscópico local, conduce a una reducción de la barrera del potencial electrostático y, por tanto, los electrones son emitidos con mayor facilidad. [2,3] Otro factor de importancia para la estimación de la barrera, β, es definido por la relación entre el campo local cercano a los sitios emisores de la superficie y el campo macroscópico. [4,5]

La aparición de imperfecciones en la superficie emisora del cátodo, incluso a nivel nanométrico, podría provocar alteraciones en el trabajo de extracción, tanto macroscópico como localizado, caracterizando una predicción más exacta de la emisión electrónica de campo. [6-17] Por un lado, las imperfecciones podrían estar dadas por la acumulación de contaminantes debido al contacto de los materiales con el ambiente o incluso por el sometimiento a las condiciones de trabajo. Mientras, por otro lado, la forma detallada o rugosidad de la superficie, producto de las irregularidades del propio proceso de pulido o por la difusión de los componentes de la superficie afectan el factor de incremento β. Aunque se tiene evidencia que alisando la superficie disminuye la emisión, desde centenas [18,19] para superficies sin pulir hasta decenas [20,21] para rugosidades del orden de 10 nm, en algunos casos se obtiene una emisión electrónica de campo más alta para rugosidades más reducidas, [22] dejando claro que la conexión entre la emisión y la rugosidad es algo débil. Por tanto, describir los efectos de la emisión de campo para superficies contaminadas o rugosas proporcionaría una orientación de los procesos que garanticen una calidad de los materiales a emplearse en los cátodos con el objetivo de disminuir las corrientes parásitas.

Como propósito de este trabajo fue realizado el estudio de posibles causas en la aparición de las llamadas "corrientes parásitas" en los inyectores de partículas neutras al plasma de los reactores de fusión nuclear. [23,24] Para ello fue implementado un modelo, basado en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés), a través del programa VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), que permitiese evaluar los efectos de la contaminación de carbono sobre superficies de tungsteno y carburo de tungsteno, [25-28] así como de la rugosidad nanométrica de la superficie de tungsteno, [28,29] en la emisión electrónica de campo macroscópica o localizada. El carbono puede incorporarse como contaminante debido a la deshidrogenación de los hidrocarburos existentes en las bombas de vacío, mientras las irregularidades son debidas a un bajo nivel de pulido de la superficie, como fue mencionado.

MÉTODOS

La emisión electrónica en campos intensos, puede ser descrita a través de la ecuación Fowler-Nordheim (1). La misma relaciona el flujo electrónico (*J*) con la intensidad del campo electrostático externo (*E*) y el trabajo de extracción del material (W_F),

$$J = \frac{e^3 E^2}{16\pi^2 h W_F} \exp\left(-\frac{4}{3e}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{W_F^{3/2}}{E}\right) \quad (1)$$

siendo *e* y *m* la carga y la masa electrónica, respectivamente.

Un comportamiento más general de la ecuación (1) es obtenida en estudios recientes, en los cuáles se consideran potenciales electrostáticos modificados por las cargas inducidas, como en el modelo de Murphy-Good [30] (MG), y la rugosidad de la superficie, [9-11]

$$J = \frac{e^3 (\beta E)^2}{16\pi^2 h W_F (t(y_E))^2} \exp\left(-\frac{4}{3e}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{W_F^{3/2} v(y_E)}{\beta E}\right) \quad (2)$$

siendo β el parámetro que caracteriza los micropicos o protuberancias existentes y $t(y_E)$ y $v(y_E)$ son integrales elípticas completas. Además, se tiene precedente de la determinación del flujo de emisión electrónica empleando un cálculo autoconsistente con DFT, donde continuamente se podía comprobar los valores del potencial (trabajo de extracción) y de la corriente emitida. [31]

Cualquiera de los comportamientos, dados por las ecuaciones (1) o (2), muestran la necesidad de precisar el valor del trabajo de extracción para caracterizar el flujo electrónico desde la superficie emisora. Por tal motivo, en una primera parte de nuestra investigación fueron simuladas modificaciones en la estructura de la superficie de emisión de tungsteno 100 y de carburo de tungsteno 0001, las cuales se recubrieron poco a poco con átomos de carbono. [25-28] Todas las superficies se optimizaron, limpias y contaminadas, y se calcularon las magnitudes de interés, con una convergencia energética y del trabajo de extracción del orden de 5 y 30 meV respectivamente. En la figura 1 se representa un esquema de las superficies utilizadas, así como la forma en que fueron depositados los átomos de carbono sobre las capas superiores de estas.

En los cálculos desarrollados en DFT son obtenidas cantidades en 3 dimensiones (3D), como por ejemplo el potencial electrostático $V_{el}(x,y,z)$. Estas magnitudes oscilan de forma apreciable en función de la posición, especialmente en la cercanía de los átomos que conforman la estructura de la superficie y resulta muy complicada, en la mayoría de los casos, la predicción de otras variables o la comparación con otros modelos de menor definición espacial. Para facilitar la interpretación de los resultados, es posible definir el promedio en planos paralelos a la superficie para cualquier magnitud [25,26] como

$$\bar{V}_{el}(z) = \frac{\iint_{cell} V_{el}(x,y,z)\,dxdy}{\iint_{cell} dxdy} \qquad (3)$$

siendo *z* la distancia perpendicular a la superficie y las integrales se evalúan para los planos a la superficie de toda la celda unitaria. A partir de esta se determina, por ejemplo, el trabajo de extracción [25,26] empleando la siguiente expresión,

$$W_F = V_{el}(\infty) - E_F \qquad (4)$$

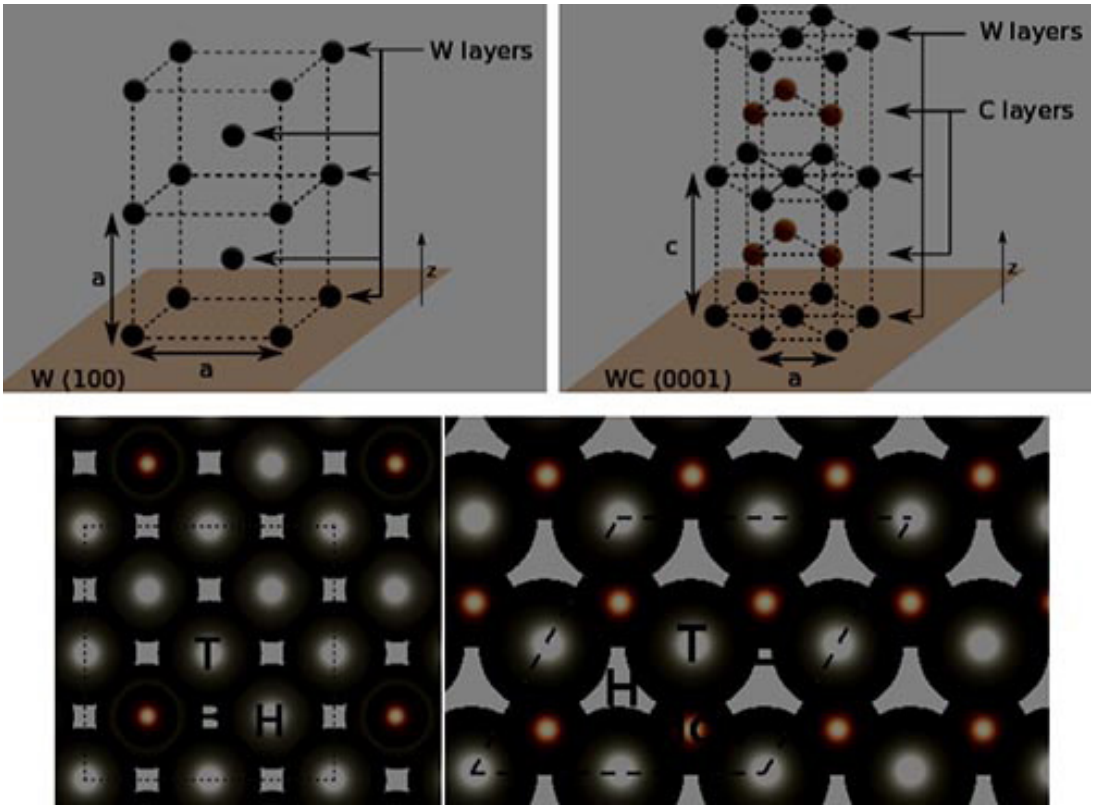

Fig. 1. (Superior) Representación esquemática de las superficies W (100) y WC (0001). Las esferas grises representan átomos de tungsteno y las de color marrón de carbono. (Inferior) Recubrimiento de átomos de C sobre las superficies de W (100) (izquierda) y WC (0001) (derecha) bajo la representación p (2 x 2). Las figuras representan los sitios típicos de adsorción, dados en relación a la capa superior: (T) encima de 1 átomo de W, (B) entre 2 átomos de W vecinos, (H) en un espacio intermedio entre más de 2 átomos de W, y (Hcp) en un espacio intermedio entre átomos de W pero manteniendo el crecimiento natural de la celda unitaria del WC.

donde E_F es la energía del nivel de Fermi y $V_{el}(\infty)$ caracteriza el potencial en el vacío dado a largas distancias de la superficie.

Empleando un modelo simple, construido por una celda unitaria formada por el corte de 2 planos cristalográficos específicos, fue simulado el efecto de la rugosidad en una superficie de tungsteno limpia. [28,29] En la figura 2 apreciamos las características esenciales de la rugosidad incorporada. En la misma no fue permitida la relajación de las capas y considerando la constante de la red para el tungsteno sólido es fácil percatarse que la simulación caracterizaría una rugosidad del orden de 1 nm, la cual es inferior a la considerada durante los procesos de pulido que se emplean en la actualidad.

Con el objetivo de evaluar los efectos locales en las magnitudes de interés, la ecuación (3) fue adaptada para obtener las mismas sobre un plano específico, como por ejemplo sobre el plano XZ el potencial electrostático promedio $\bar{V}_{el}(x,z)$ toma la forma

$$\bar{V}_{el}(x,z) = \frac{\int_{cell} V_{el}(x,y,z)\,dy}{\int_{cell} dy} \qquad (5)$$

Mediante los procedimientos descritos por las ecuaciones (3) y (5) fueron obtenidos y evaluados todos los cambios macroscópicos y locales de todas las magnitudes de interés durante el desarrollo de esta investigación, tales como el trabajo de extracción y el potencial electrostático.

En otra parte del estudio, fue evaluada la emisión electrónica localizada, para muy altos potenciales externos. [27] La aplicación de este último fue tratado como una perturbación del potencial electrostático del sistema, cuya validez fue comprobada con cálculos DFT para pequeños campos. En este proceso, la ocupación electrónica estaría dada por las funciones de Bloch $\Psi_m(e, E=0)$ obtenidas para ausencia de campos externos e igualmente calculada empleando DFT:

$$(T + U(r, E=0))\Psi_m(r, E=0) = \varepsilon_m \Psi_m(r, E=0) \qquad (6)$$

donde $U(r, E=0)$ caracteriza el potencial electrostático para la ausencia de campo externo y las condiciones periódicas son aplicadas en todo el volumen consistente de N_k celdas unitarias (número de puntos k usados para explorar la primera zona de Brillouin). Como fue mencionado, la aplicación del campo externo se consideró como un incremento lineal perturbativo del potencial electrostático según la ecuación

$$U(r,E) = U(r, E=0) + \Delta U(r,E) \qquad (7)$$

donde $U(r,E)$ y $\Delta U(r,E)$ son, respectivamente, el potencial electrostático y la perturbación asociada con la aplicación del campo externo. Entonces, aplicando la teoría perturbativa dependiente del tiempo, se puede calcular la tasa de fuga de cada orbital como una "corriente de estado" I_m, dada por la transformada de Fourier de la función de correlación $C_m(t)$:

$$I_m = \frac{e}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\frac{\varepsilon_m t}{\hbar}} C_m(t) \qquad (8)$$

donde $C_m(t)$ es un elemento matricial del operador de evolución asociado al potencial de perturbación

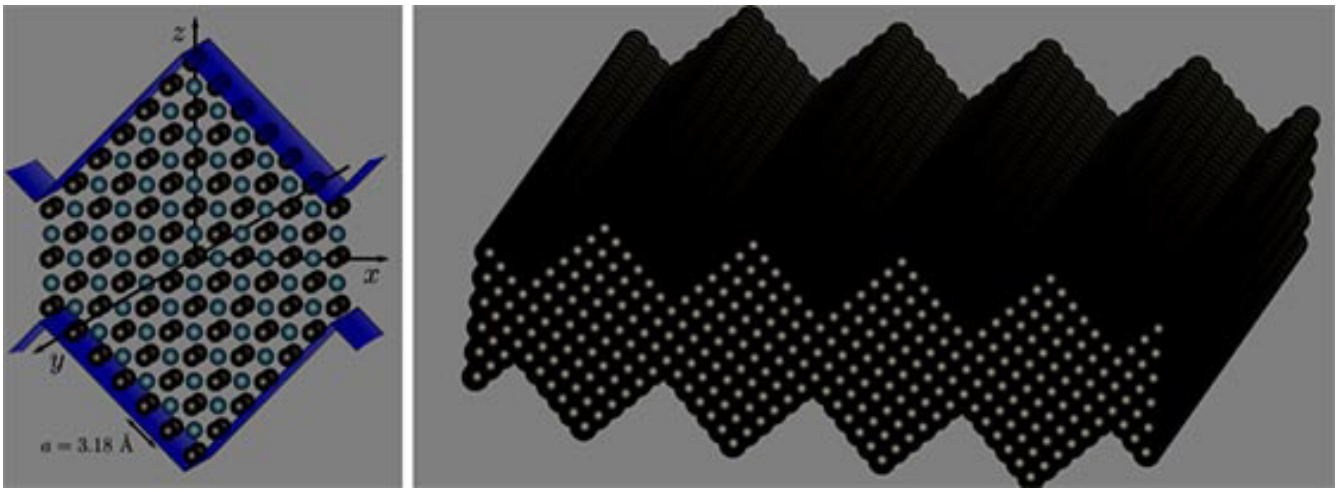

Fig. 2. (Izquierda) Celda unitaria de la estructura de tungsteno, formada por los planos cristalográficos (100) y (010), para estudiar los efectos de la corrugación de la superficie empleando DFT (son mostradas tres capas atómicas, 1 y 3 en gris y 2 en azul con igual periodicidad, dando una visión de la reconstrucción natural de la superficie). (Derecha) Extensión periódica de la rugosidad de la superficie.

$$C_m(t) = \iiint dxdydz\phi_m^* e^{-i\frac{T+\Delta U(r,E)+W_F}{\hbar}}\phi_m \quad (9)$$

y $\phi_m(r,E) = \Delta U(r,E)\Psi_m(r,E=0)$. Entonces, la corriente total emitida por todo el volumen Ω será $I_\Omega = 2\sum_m I_m$ y la densidad de corriente $\bar{J} = \frac{I}{N_k A_{uc}}$, donde A_{uc} es el área de la celda emisora.

Se define también la densidad de corriente local $J(x,y) = 2\sum_m J_m(x,y)$ siendo

$$J_m(x,y) = \frac{e}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\frac{\varepsilon_m t}{\hbar}} c_m(x,y,t) \quad (10)$$

donde

$$c_m(x,y,t) = \int dz\phi_m^*(r,E)e^{-i\frac{T+\Delta U(r,E)+W_F}{\hbar}t}\phi_m(r,E).$$

Este formalismo resulta similar al modelo de efecto túnel de Bardeen [32] (BTH, del inglés Bardeen Transfer Hamiltonian), que forma parte del modelo Tersoff-Haman, [33] utilizado en el contexto de la microscopía de barrido por efecto túnel para obtener el mapa de densidad de corriente.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Durante el presente estudio se simularon las superficies de tungsteno 100 y de carburo de tungsteno 0001. Las mismas fueron homogéneamente contaminadas con carbono, para diferentes niveles de recubrimiento. Todas las configuraciones resultantes fueron optimizadas, mostrando buena concordancia con resultados previos. La mayor estabilidad, durante el posicionamiento de los átomos de carbono, resultó en los espacios abiertos de las capas superficiales, identificadas como "hueco" (H) en el tungsteno o siguiendo la configuración de formación de la red hexagonal compacta (HPC) para el carburo de tungsteno. Como puede verse en la figura 3, se encontró que el trabajo de extracción macroscópico aumentaba al incrementar el recubrimiento de la contaminación. Este resultado entra en contradicción con algunas observaciones experimentales [6-17] que sugerían la aparición (incremento) de las corrientes parásitas al incrementar la contaminación de las superficies, lo cual estaría dado por la disminución del trabajo de extracción macroscópico.

Por otra parte, fue estudiada la rugosidad de una superficie de tungsteno correspondiente a 6 capas atómicas de la superficie metálica, lo cual equivale a un error en el pulido del orden de 1 nm. En este estudio fue aplicado un potencial externo y evaluadas las condiciones locales de emisión electrónica. Los promedios de la densidad de carga y el campo eléctrico, así como sus valores inducidos, producto de la aplicación del campo externo $(E_\infty = 0{,}1\,V/A)$ a la superficie rugosa de tungsteno, se muestran en la figura 4. Puede apreciarse inmediatamente, el efecto de las puntas en la superficie. Como es de esperar, en la misma existe un exceso de electrones en el lado del cátodo (parte inferior) y un déficit en el lado del ánodo (parte superior) (figura 4, (A)-derecha). Esta carga inducida se concentra principalmente cerca de cada pico de la estructura y resulta interesante que no se encuentra localizada en la zona más elevada del plano atómico, sino desplazada un tanto hacia el vacío.

En la figura 5(A) se muestra un gráfico, tipo Fowler-Nordheim, del promedio de la densidad total de corriente emitida para las contaminaciones 0ML, 1ML y 2ML de carbono sobre el tungsteno. También se muestran los resultados de los mo-

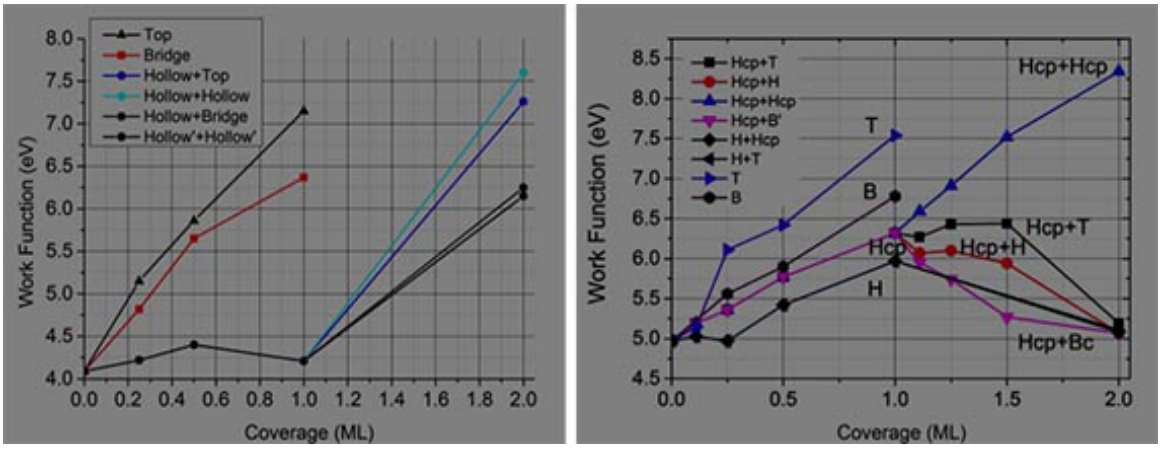

Fig. 3. Trabajo de extracción para tungsteno 100 (izquierda) y carburo de tungsteno 0001 (derecha), contaminado con carbono, en función de diferentes niveles de recubrimiento y para varias posiciones de los átomos contaminantes.

delos de Fowler-Nordheim (FN) y Murphy-Good (MG) utilizando los trabajos de extracción macroscópicos determinados para dichas configuraciones por nuestro modelo. La contaminación por carbono provoca un decrecimiento de la emisión, lo cual era esperado producto del aumento del trabajo de extracción macroscópico. Todos los resultados muestran un decrecimiento de $\bar{J}/F^2$ como función de $1/F$ típico de la emisión electrónica de campo. Las pendientes de los resultados asociados con los modelos DFT están próximos a los asociados a los modelos de FN y MG. Todo sugiere que el trabajo de extracción es la clave principal en el valor de la pendiente, como esperábamos. Presumimos que otros materiales de similar trabajo de extracción que el tungsteno, al ser recubiertos con carbono, muestren comportamientos similares al descrito en la presente investigación. La saturación observada para campos muy fuertes no se debe a la limitación de la carga espacial (como en Koh WS., Ang LK. y Sun S., Ang LK. por ejemplo), [34,35] más bien se debe al haber superado clásicamente la barrera de Schottky. En el modelo MG unidimensional simple, la saturación ocurre bruscamente, pero si se consideran plenamente los efectos cuánticos, esta transición brusca se convierte en una transición más suave (véase, por ejemplo, la figura 3 en Lepetit B.). [36] Otro aspecto a tener en cuenta es cuando se consideran las 3 dimensiones del modelo. Tal como puede apreciarse en la figura 5(B), la emisión ocurre para diferentes valores de campo según la ubicación considerada en la superficie. En todos los casos, los resultados de DFT se encuentran entre los FN, que son los más pequeños, y los MG, que son los más grandes.

Nuestros resultados se extienden hasta campos extremadamente altos (50 V/nm), mientras los experimentales solo están disponibles para campos relativamente superiores a 10 V/nm (la mayoría de ellos se realizaron por debajo de este límite). Las referencias recientes sobre estos estudios experimentales son proporcionadas por Fursey G. N. (2003) y Fursey G. N (2016), [37,38] Por tanto, es concebible que los fenómenos físicos descritos en la presente investigación puedan ser observados experimentalmente. Además, empleando diferentes materiales con trabajos de extracción inferiores, pueden volverse observables para campos más pequeños. Por otro lado, la transferencia de energía entre un campo suficientemente alto y un material induce efectos térmicos en el electrodo que, en última instancia, pueden conducir a su evaporación. Un modelo de emisión electrónica de campo que relacione la corriente con el campo a cada paso de tiempo para diferentes posicionamientos de los núcleos, sigue siendo un ingrediente necesario para tales simulaciones de dinámica molecular. [39,40] La presente investigación puede considerarse como un intento de mejorar la precisión de este ingrediente del modelo completo.

Conclusiones

Es posible realizar estudios amplios de la emisión electrónica de campo empleando modelos a base de cálculos

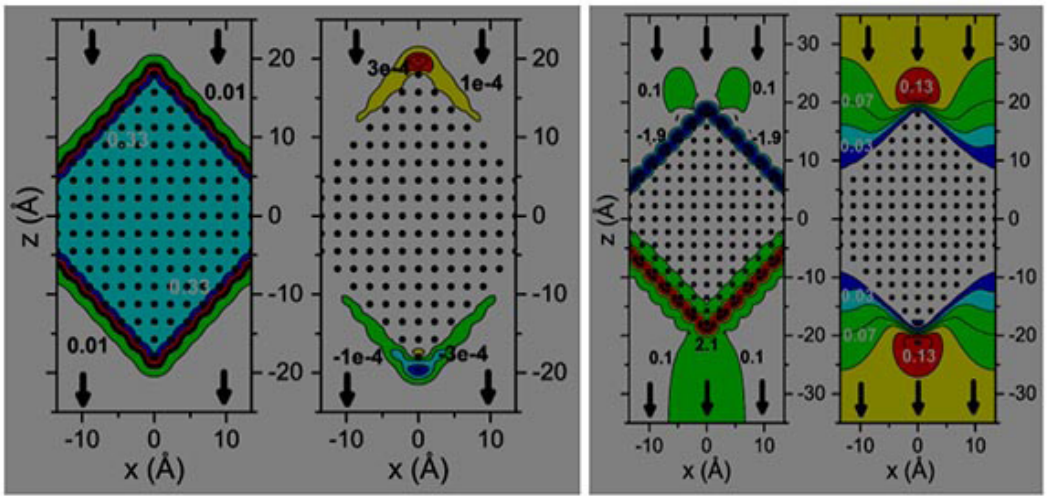

Fig. 4. La parte superior de las figuras representa al cátodo y la parte inferior al ánodo. Las flechas indican la dirección del campo eléctrico externo y los puntos la posición de los átomos de W en el metal. (A)-izquierda: Promedio local de la densidad de carga electrónica $\rho(E_\infty = 0{,}1$ V/Å) dado en e/Å^3. Las líneas de contorno corresponden a valores de 0,01 a 0,33; espaciado por 0,08 ([0,01;0,33;0,08]). (A)-derecha: Promedio local de la carga electrónica inducida $\rho(E_\infty=0{,}1$ V/Å)$-\rho(E_\infty=0{,}0$ V/Å) resultado de la aplicación del campo externo. Las líneas de contorno corresponden con $[-7;7;2]\times10^{-4}$. (B)-izquierda: Promedio del campo electrostático $|E(E_\infty=0{,}1$ V/Å)| multiplicada por el signo de la componente de z. Las líneas de contorno corresponden con [−5,9;6,1;2]. (B)-derecha: Campo eléctrico inducido, obtenido como diferencia del campo electrostático con y sin campo asintótico $|E(E_\infty= 0{,}1$ V/Å)$-E(E_\infty=0{,}0$ V/Å)|. Las líneas de contorno corresponden con [−0,01;1,5;0,02].

DFT. Los mismos, aportan un marco teórico para estudiar el origen de las "corrientes parásitas" en las cámaras de aceleración de los inyectores de partículas neutras a los reactores de fusión nuclear, cuando los materiales utilizados presentan irregularidades superficiales. La adsorción de contaminantes como el carbono, productos de la deshidrogenación de los hidrocarburos de las bombas de vacío, provocan un aumento del trabajo de extracción macroscópico y, por tanto, una disminución de la emisión electrónica. [25-27] Sin embargo, la adsorción de carbono produce regiones de incremento de la emisión, originando un comportamiento similar o idéntico del flujo electrónico para campos extremadamente altos. [27] Las pequeñas protuberancias a escalas nanométricas de las superficies provocan un incremento considerable en la emisión de campo. [28,29] Se hace recomendable, por lo tanto, la revisión de los procedimientos de pulido de los materiales a emplear en los aceleradores de alta potencia. Además, se arribó a resultados aún no descritos en estudios experimentales y que pueden ser de gran interés para la fabricación de los materiales a emplear en los aceleradores de partículas, [27] aunque deben incorporarse a la simulación otros fenómenos que se ponen de manifiesto a potenciales muy elevados. De forma general, se generaron nuevos conocimientos sobre el origen de las "corrientes parásitas" y su relación con diferentes irregularidades de las superficies de los cátodos. [25-29]

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Fowler RH., Nordheim L. Electron emission in intense electric fields. Proc. R. Soc. Lond. A. 1928; 119:173.
2. Latham RV. High Voltage Vacuum Insulation: Basic Concepts and Technological Practice. New York: Elsevier; 1995.
3. Latham R. V. High Voltage Vacuum Insulation: A New Perspective. AuthorHouse; 2006.
4. Forbes RG., Deane JH. B., Fischer A., Mousa MS. Fowler-Nordheim Plot Analysis: A Progress Report. Jordan J. Phys. 2015;8:125.
5. Forbes RG. Development of a simple quantitative test for lack of field emission orthodoxy. Proc. R. Soc. Lond. A. 2013;469:20130271.
6. Halbritter J. On conditioning: Reduction of secondary and rf-field emission by electron, photon, or helium impact. J. Appl. Phys. 1982;53:6475.
7. Halbritter J. Enhanced Electron Emission and Its Reduction by Electron and Ion Impact. IEEE Trans. Electr. Insul. 1983;EI-18:253.
8. Halbritter J. On Contamination on Electrode Surfaces and Electric Field Limitations. IEEE Trans. Electr. Insul. 1985;EI-20:671.
9. Alpert D., Lee D., Lyman EM., Tomaschke HE. Effect of Gas Pressure on Electrical Breakdown and Field Emission. J. Appl. Phys. 1967;38:880.
10. Bloomer R. N., Cox B. M. Some effects of gases upon vacuum breakdown initiated by field emission of electrons. Vacuum. 1968;18:379.
11. Beukema G. P. Conditioning of a vacuum gap by sparks and ion bombardment. Physica. 1972; 61:259.

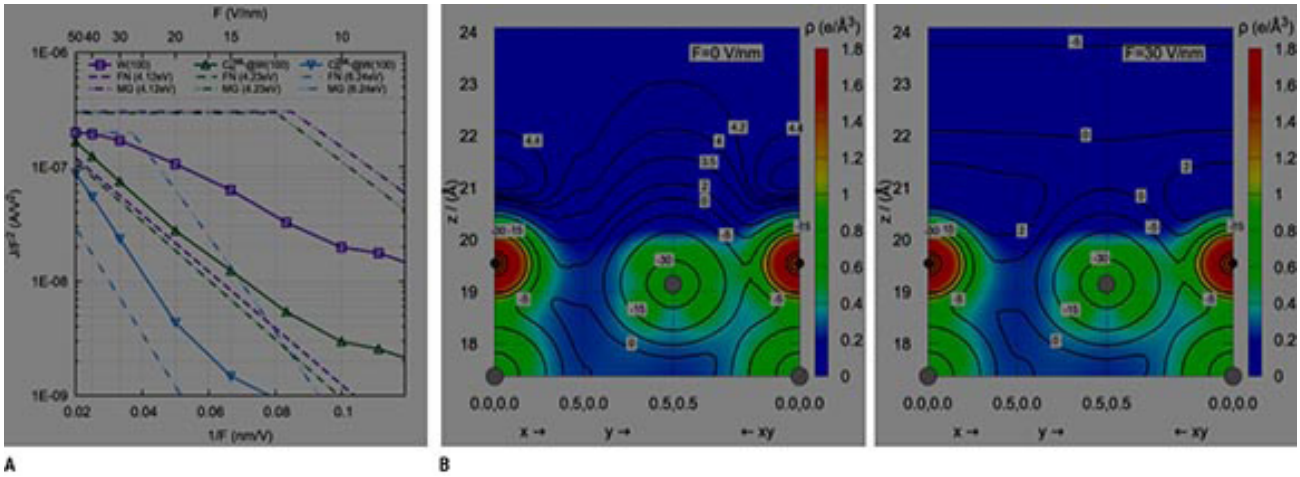

Fig. 5. (A) Gráfica tipo Fowler-Nordheim del promedio de la densidad de corriente total emitido por nuestro modelo en DFT para 0 ML (cuadrados), 1 ML (triángulos arriba), y 2 ML (triángulo abajo). También son mostrados los resultados analíticos de los modelos FN y MG para los trabajos de extracción calculados por nuestro modelo. (B) Potencial Hartree (línea de contorno, en eV) y la densidad electrónica (escala de colores de la derecha $e^-/Å^3$) en porciones de planos que tienen en común el eje z (las coordenadas x e y están coordenadas fraccionarias de la celda unidad empleada en los cálculos DFT, las flechas indican el incremento de una u otra coordenada). Los discos gris y marrón corresponden a las posiciones de los átomos W y C, respectivamente. La energía 0 corresponde con el nivel de Fermi, tal que el potencial indica también el trabajo de extracción local. El potencial (contorno) fue obtenido para F=0 (izquierda) y F=30 V/nm (derecha), para las configuraciones de 0 ML, 1 ML, y 2 ML (en la parte superior de la superficie). La densidad electrónica es la misma para ambos gráficos, correspondientes a F=0 V/nm.

12. Bonin B. Field emission and surface conditioning. Vacuum. 1995;46:907.
13. Latham R. The origin of prebreakdown electron emission from vacuum-insulated high voltage electrodes. Vacuum. 1982;32:137.
14. Bajic S., Latham R. V. A new perspective on the gas conditioning of high-voltage vacuum-insulated electrodes. J. Phys. D: Appl. Phys. 1988;21:943.
15. Gomer R., Hulm J. K. Adsorption and Diffusion of Oxygen on Tungsten. J. Chem. Phys. 1957;27:1363.
16. Zeitoun-Fakiris A., Juttner B. The effect of gases on the emission currents from metallic micropoints in ultra-high vacuum. J. Phys. D: Appl. Phys. 1988;21:960.
17. BastaniNejad M. *et al*. Improving the performance of stainless-steel DC high voltage photoelectron gun cathode electrodes via gas conditioning with helium or krypton. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2014;762:135.
18. Cox B. M., Williams W. T. Field-emission sites on unpolished stainless steel. J. Phys. D: Appl. Phys. 1977;10:L5.
19. Suzuki C., Nakanishi T., Okumi S., Gotou T., Togawa K., Furuta F., *et al*. Fabrication of ultra-clean copper surface to minimize field emission dark currents. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2001;462:337.
20. Furuta F., Nakanishi T., Okumi S., Gotou T., Yamamoto M., Miyamoto M., *et al*. Reduction of field emission dark current for high-field gradient electron gun by using a molybdenum cathode and titanium anode. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2005;538:33.
21. Pandey AG., Reschke D., Singer X. Field emission from crystalline niobium. Phys. Rev. Spec. Top. Accel. Beams. 2009;12:023501.
22. Bastani Nejad M., Mohamed MA., Elmustafa AA., Adderley P., Clark J., Covert S., *et al.* Evaluation of niobium as candidate electrode material for dc high voltage photoelectron guns. Phys. Rev. Spec. Top. Accel. Beams. 2012;15:083502.
23. Almaksour K., Kirkpatrick MJ., Dessante P., Odic E., Simonin A., de Esch H.P.L., *et al.* Experimental study of the reduction of field emission by gas injection in vacuum for accelerator applications. Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2014;17:103502.
24. Simonin A., de Esch H., Doceul L., Christin L., Faisse F., Villecroze F. Conceptual design of a high-voltage compact bushing for application to future N-NBI systems of fusion reactors. Fusion Eng. Des. 2013;88:1.
25. Márquez Mijares M., Lepetit B., Lemoine D., Almaksour K., Kirkpatrick MJ., Dessante Ph., *et al.* Influence of ambient gas pressure and carbon adsorption on dark current emission from a cathode. J. Vac. Sci. Tech. B. 2016;34:061208.
26. Márquez Mijares M., Lepetit B., Lemoine D. Carbon adsorption on tungsten and electronic field emission. Surf. Sci. 2016; 645:56.
27. Márquez Mijares M., Lepetit B. A three dimensional numerical quantum mechanical model of field electron emission from metallic surfaces covered with carbon adsorbates. J. Appl. Phys. 2019; 126:065107.
28. de Esch H.P.L., Simonin A., Grand C., Lepetit B., Lemoine D., Márquez-Mijares M., *et al.* Development of a Compact Bushing for NBI. Fifth International Symposium on Negative Ions, Beams ans Sources (NIBS 2016), AIP Conf. Proc. 2017; 1869:060003.
29. Lepetit B., Lemoine D., Márquez Mijares M. Static electric field enhancement in nanoscale structures. J. App. Phys. 2016;120:085105.
30. Murphy E. L., Good Jr. R. H. Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region. Phys. Rev. 1956; 102:1464.
31. Gohda Y., Nakamura Y., Watanabe K., Watanabe S. Self-consistent density functional calculation of field emission currents from metals. Phys. Rev. Lett. 2000;85:1750.
32. Bardeen J. Tunnelling from a many-particle point of view. Phys. Rev. Lett. 1961;6:57.
33. Tersoff J., Hamann D. R. Theory of the scanning tunneling microscope. Phys. Rev. B. 1985;31:805.
34. Koh WS., Ang LK. Quantum model of space-charge-limited field emission in a nanogap. Nanotechnology. 2008;19:235402.
35. Sun S., Ang LK. Onset of space charge limited current for field emission from a single sharp tip. Phys. Plasmas. 2012;19:033107.
36. Lepetit B. Electronic field emission models beyond the Fowler-Nordheim one. J. Appl. Phys. 2017;122:215105.
37. Fursey G. N. Field emission in vacuum micro-electronics. Appl. Surf. Sci. 2003;15:113.
38. Fursey G. N. Intensive emission processes in the high and ultra-high electric fields. Proceedings Conference of the Young Researchers in Vacuum Micro/Nano Electronics (VMNE-YR) (see https://ieeexplore.ieee.org/document/7880404/) IEEE; 2016.
39. Kyritsakis A., Veske M., Eimre K., ZadinV., Djurabekova F. Thermal runaway of metal nano-tips during intense electron emission. J. Phys. D Appl. Phys. 2018;51:225203.
40. Kyritsakis A., Djurabekova F. A general computational method for electron emission and thermal effects in field emitting nanotips. Comput. Mater. Sci. 2017;128:15.

Recibido: 15/07/2021
Aprobado: 23/11/2021

Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses en relación a las investigaciones presentadas en la propuesta.

Contribuciones de los autores

Conceptualización: Bruno Lepetit, Maykel Márquez Mijares
Curación de datos: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit
Análisis formal: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit
Adquisición de fondos: Bruno Lepetit, Maykel Márquez Mijares
Investigación: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit
Metodología: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit
Administración del proyecto: Bruno Lepetit, Maykel Márquez Mijares
Recursos: Bruno Lepetit, Didier Lemoine, Maykel Márquez Mijares
Software: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit
Supervisión: Bruno Lepetit, Didier Lemoine, Maykel Márquez Mijares
Validación: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit, Didier Lemoine
Visualización: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit, Didier Lemoine

Redacción-borrador original: Maykel Márquez Mijares, Bruno Lepetit, Didier Lemoine

Redacción-revisión y edición: Bruno Lepetit, Maykel Márquez Mijares, Didier Lemoine

Financiación

La presente investigación ha sido parcialmente financiada por el Programa Nacional de Ciencias Básicas de Cuba a través del proyecto No. P223LH001-108; por el Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CNRS) de Francia a través de la subvención No. ANR-12-BS09-0013-02 y por los fondos de apoyo a la movilidad del servicio de cooperación y acción cultural (SCAC) de la Embajada Francesa en Cuba en el 2018.

Cómo citar este artículo

Márquez Mijares M, Lepetit B, Lemoine D *et al*. Influencia de las condiciones de la superficie del cátodo en la emisión de corriente parásitas. Anales de la Academia de Ciencias de Cuba [internet] 2022[citado en día, mes y año];12(1): e1123. Disponible en: http://www.revistaccuba.cu/index.php/revacc/article/view/1123