

Ченкирова Дара Сергеевна

Выпускная квалификационная работа бакалавра

Математическое моделирование
электронно-оптической системы с полевым
эмиттером

Направление 01.03.02

"Прикладная математика и информатика"

Научный руководитель

доктор физ.-мат. наук, профессор

Виноградова Е.М.

Рецензент

кандидат физ.-мат. наук, доцент

Владимирова Л.В.

Оглавление

Введение	3
1 Моделирование трехмерной диодной системы	4
1.1 Физическая модель диодной системы с полевым катодом сферической формы	4
1.2 Математическая модель диодной системы с полевым катодом сферической формы	5
1.3 Решение трехмерной граничной задачи	6
1.4 Заключение к главе 1	12
2 Моделирование осесимметричной диодной системы	13
2.1 Физическая постановка осесимметричной задачи с диодной системой в виде сферы-на-конусе	13
2.2 Математическая постановка осесимметричной задачи с диодной системой в виде сферы-на-конусе	13
2.3 Решение осесимметричной граничной задачи	14
2.4 Численные расчеты диодной системы	17
2.5 Заключение к главе 2	22
Результаты и выводы	23
Литература	24
Приложение	26

Введение

Бурное развитие науки и техники приводит к созданию все новых инструментов для удовлетворения потребностей общества. Сейчас явление полевой эмиссии переживает второе рождение в связи с его замечательными применениями в микро- и нанoeлектронике [1] – [5]. Полевые источники электронов широко используются в вакуумных приборах, электронно-лучевых трубках, высокочастотных генераторах, плоских дисплеях и т.д. Интерес к полевой электронной эмиссии связан и с исследованиями структуры поверхностей на молекулярном уровне с помощью электронной микроскопии, в частности, с полевым электронным микроскопом, сканирующим туннельным микроскопом и атомным силовым микроскопом.

Под полевой эмиссией понимается испускание электронов проводящими жидкими и твердыми телами под действием внешнего электрического поля без предварительного возбуждения этих электронов, то есть без дополнительных затрат энергии, что свойственно другим видам электронной эмиссии. Тело, из которого испускаются электроны, называется катодом. Математическое моделирование позволяет прогнозировать важные характеристики исследуемых полевых катодов [6] – [9].

На рис.1 изображено изготовление нанокристаллических алмазных конусов с помощью FIB [10].

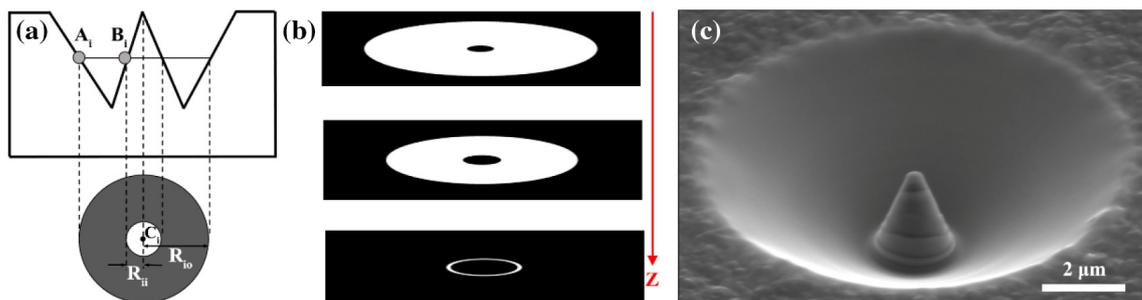


Рис. 1: (а) Схема поперечного сечения конуса; (б) Иллюстрация выбранной серии шаблонов растровых изображений; (с) SEM-изображение изготовленных конусов.

Глава 1

Моделирование трехмерной диодной системы

1.1 Физическая модель диодной системы с полевым катодом сферической формы

В данной работе моделируется полевая эмиссионная диодная система. В качестве полевой пушки рассматривается диодная система с катодом в виде сферы на конусе и анодом сферической формы. Исходная задача сводится к поиску распределения потенциала U в предложенной системе. Рис. 1.1 показывает схематическое изображение диодной системы с полевым катодом в сферической системе координат:

$$x_1 = r,$$

$$x_2 = \alpha,$$

$$x_3 = \phi.$$

Данные координаты связаны с декартовыми следующими соотношениями:

$$x = r \sin \alpha \cos \phi,$$

$$y = r \sin \alpha \sin \phi,$$

$$z = r \cos \alpha.$$

В силу неоднородности геометрии катода, возможных микро- и нановыступов на его поверхности ставится задача в общем трехмерном случае, то есть $U = U(r, \alpha, \phi)$.

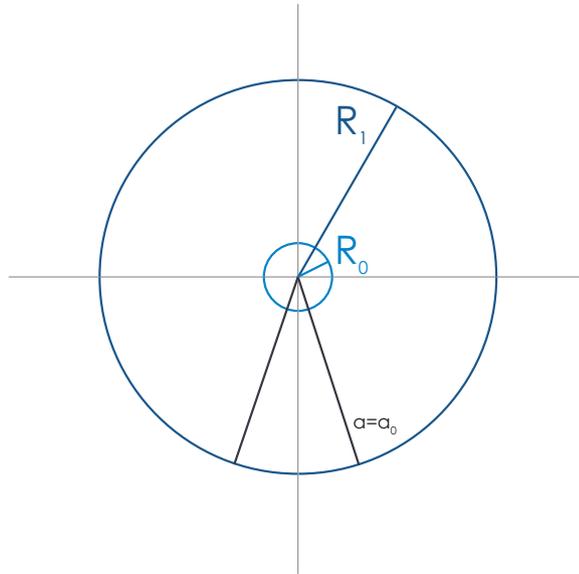


Рис. 1.1: Схематическое изображение диодной системы с полевым катодом.

Параметры системы:

$\alpha = \alpha_0, R_0 \leq r \leq R_1$ — поверхность «тела» острия (конус);

$r = R_0, 0 \leq \alpha \leq \alpha_0$ — поверхность вершины острия (часть сферы);

$r = R_1, 0 \leq \alpha \leq \alpha_0$ — поверхность анода (часть сферы);

$U(R_0, \alpha, \phi) = f_1(\alpha, \phi), 0 \leq \alpha \leq \alpha_0$ — граничное условие на вершине острия;

$U(R_1, \alpha, \phi) = f_2(\alpha, \phi), 0 \leq \alpha \leq \alpha_0$ — граничное условие на аноде;

$U(r, \alpha_0, \phi) = f_3(r, \phi), R_0 \leq r \leq R_1$ — граничное условие на конусе.

1.2 Математическая модель диодной системы с полевым катодом сферической формы

Распределение электростатического потенциала $U(r, \alpha, \phi)$ является решением граничной задачи для уравнения Лапласа с неосесимметричными граничными условиями первого рода:

$$\begin{cases} \Delta U(r, \alpha, \phi) = 0; & R_0 \leq r \leq R_1, 0 \leq \alpha \leq \alpha_0, 0 \leq \phi \leq 2\pi; \\ U(R_0, \alpha, \phi) = f_1(\alpha, \phi), & 0 \leq \alpha \leq \alpha_0; \\ U(R_1, \alpha, \phi) = f_2(\alpha, \phi), & 0 \leq \alpha \leq \alpha_0; \\ U(r, \alpha_0, \phi) = f_3(r, \phi), & R_0 \leq r \leq R_1. \end{cases} \quad (1.1)$$

Оператор Лапласа для сферических координат записывается в следующем виде:

$$\Delta U = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial U}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \alpha} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sin \alpha \frac{\partial U}{\partial \alpha} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \alpha} \frac{\partial^2 U}{\partial \phi^2}.$$

1.3 Решение трехмерной граничной задачи

Решение задачи ищется методом разделения переменных, известного также как метод Фурье. Данный метод является одним из самых известных методов решения дифференциальных уравнений в частных производных и состоит в преобразовании исходного уравнения к сумме двух выражений, зависящих от разных переменных.

Таким образом, имеет место представление:

$$U(r, \alpha, \phi) = R(r)A(\alpha)\Phi(\phi).$$

Подстановка данного разложения в уравнение Лапласа (1.1) дает:

$$\frac{\sin^2 \alpha \frac{d}{dr}(r^2 R'(r))}{R(r)} + \frac{\sin \alpha \frac{d}{d\alpha}(\sin \alpha A'(\alpha))}{A(\alpha)} = -\frac{\Phi''(\phi)}{\Phi(\phi)}. \quad (1.2)$$

Так как правая и левая части уравнения (1.2) зависят от разных независимых переменных, то тождество справедливо тогда и только тогда, когда обе части равны некоторой постоянной $\pm m^2$. Следовательно,

$$\Phi''(\phi) \pm m^2 \Phi(\phi) = 0.$$

Это дифференциальное уравнение второго порядка в данном случае имеет два типа решений для разных знаков постоянной:

$$\Phi(\phi) = C e^{im\phi};$$

$$\Phi(\phi) = C_1 e^{m\phi} + C_2 e^{-m\phi}.$$

В силу периодичности системы, то есть

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi),$$

подходит лишь первое решение, соответствующее положительной целой константе $+m^2$.

Соответственно, левая часть уравнения (1.2) преобразуется к виду:

$$\frac{d}{dr}(r^2 R'(r))}{R(r)} = -\left(\frac{1}{\sin(\alpha)} \frac{d}{d\alpha}(\sin \alpha A'(\alpha))}{A(\alpha)} - \frac{m^2}{\sin^2(\alpha)} \right) = \pm \lambda^2.$$

и дальше разбивается на две системы в зависимости от знака постоянной:

$$\begin{cases} r^2 R'' + 2r R' - \lambda^2 R = 0, \\ \frac{1}{\sin(\alpha)} \frac{d}{d\alpha}(\sin \alpha A') - \left(\frac{m^2}{\sin^2(\alpha)} - \lambda^2 \right) A = 0, \end{cases} \quad (1.3)$$

и

$$\begin{cases} r^2 R'' + 2r R' + \lambda^2 R = 0, \\ \frac{1}{\sin(\alpha)} \frac{d}{d\alpha} (\sin \alpha A') - \left(\frac{m^2}{\sin^2(\alpha)} + \lambda^2 \right) A = 0. \end{cases} \quad (1.4)$$

Подстановка $t = \cos(\alpha)$ во второе уравнение системы (1.3) дает уравнение Лежандра для определения функции $A(\alpha)$:

$$(1 - t^2) \frac{d^2 A}{dt^2} - 2t \frac{dA}{dt} - \left(\frac{m^2}{1 - t^2} - \lambda^2 \right) A = 0,$$

где $-1 \leq t \leq 1$. Данное уравнение имеет ограниченные, непрерывные и конечные решения лишь при $\lambda^2 = \nu(\nu + 1)$, $\nu = 0, 1, 2, \dots$. Общим решением уравнения Лежандра является линейная комбинация двух частных решений: присоединенных функций Лежандра первого P_ν^m и второго Q_ν^m родов. Так как полиномы Q_ν^m не ограничены при $t \rightarrow \pm 1$, что соответствует входящим в исследуемую область углам $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$, то коэффициенты при полиномах Лежандра второго рода обнуляют, и представляют интерес только полиномы Лежандра первого рода: $A(\alpha) = P_\nu^m(\cos \alpha)$.

Первое уравнение системы (1.3) называется уравнением Эйлера. Функция $R(r)$ ищется подстановкой $R = r^\sigma$ в исходное уравнение:

$$2\sigma r^\sigma + \sigma(\sigma - 1)r^\sigma - \lambda^2 r^\sigma = 0 \Rightarrow$$

$$\sigma^2 + \sigma - \nu(\nu + 1) = 0,$$

откуда можно найти:

$$\sigma = \nu$$

и

$$\sigma = -(\nu + 1).$$

Следовательно, решением уравнения Эйлера является линейная комбинация линейно независимых функций r^ν и $r^{-(\nu+1)}$:

$$R(r) = \tilde{a}_\nu r^\nu + \tilde{b}_\nu r^{-(\nu+1)}.$$

Таким образом, общее решение уравнения Лапласа (1.1) выписывается в следующем виде:

$$U(r, \alpha, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{\nu=0}^{+\infty} (\tilde{a}_{m\nu} r^{m\nu} + \tilde{b}_{m\nu} r^{-(m\nu+1)}) P_{m\nu}^m(\cos \alpha). \quad (1.5)$$

В силу того, что краевая задача имеет неоднородные граничные условия по переменным r и α , а $U(r, \alpha, \phi)$ - гармоническая функция, и имеет место суперпозиция полей, необходимо исходную задачу разбить на две задачи с однородными граничными условиями по одной из переменных:

$$U(r, \alpha, \phi) = U_1(r, \alpha, \phi) + U_2(r, \alpha, \phi),$$

при этом U_1 и U_2 являются решениями следующих краевых задач:

$$\begin{cases} \Delta U_1(r, \alpha, \phi) = 0; & R_0 \leq r \leq R_1, 0 \leq \alpha \leq \alpha_0, 0 \leq \phi \leq 2\pi; \\ U(R_0, \alpha, \phi) = f_1(\alpha, \phi), & 0 \leq \alpha \leq \alpha_0; \\ U(R_1, \alpha, \phi) = f_2(\alpha, \phi), & 0 \leq \alpha \leq \alpha_0; \\ U(r, \alpha_0, \phi) = 0, & R_0 \leq r \leq R_1. \end{cases} \quad (1.6)$$

и

$$\begin{cases} \Delta U_2(r, \alpha, \phi) = 0; & R_0 \leq r \leq R_1, 0 \leq \alpha \leq \alpha_0, 0 \leq \phi \leq 2\pi; \\ U(R_0, \alpha, \phi) = 0, & 0 \leq \alpha \leq \alpha_0; \\ U(R_1, \alpha, \phi) = 0, & 0 \leq \alpha \leq \alpha_0; \\ U(r, \alpha_0, \phi) = f_3(r, \phi), & R_0 \leq r \leq R_1. \end{cases} \quad (1.7)$$

В задаче (1.6) собственными функциями являются полиномы Лежандра первого рода:

$$A(\alpha) = P_\nu^m(\cos \alpha).$$

Для удовлетворения граничных условий необходимо:

$$P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha_0) = 0. \quad (1.8)$$

Уравнение (1.8) имеет счетное множество нулей: μ_{mn} , где n - номер соответствующего корня. С помощью разложения в ряд Лагранжа было получено выражение для нулей полиномов [11] - [13]:

$$\begin{aligned} \mu_{mn} = \epsilon_n + \frac{1}{\alpha_0} \left(-\frac{(m^2 - \frac{1}{4}) \operatorname{ctg} \alpha_0}{2\epsilon} + (m^2 - \frac{1}{2})(m^2 - \frac{1}{4}) \operatorname{ctg} \alpha_0 - 3C_2' + \right. \\ \left. + \frac{3(m^2 - \frac{1}{4})C_2' \operatorname{ctg} \alpha_0}{(2\epsilon)^3} + \frac{(m^2 - \frac{1}{4})^3 \operatorname{ctg}^3 \alpha_0}{3(2\epsilon)^3} + \dots \right) + \\ + \frac{1}{\alpha_0^2} \left(-\frac{(m^2 - \frac{1}{4})^2 \operatorname{ctg}^2 \alpha_0}{2^2 \epsilon^3} - \frac{2((m^2 - \frac{1}{2})(m^2 - \frac{1}{4}) \operatorname{ctg} \alpha_0 - 3C_2')^2}{2^4 \epsilon^5} - \dots \right), \end{aligned}$$

где

$$C_2' = \frac{1}{3}(m^2 - \frac{3}{2})(m^2 - \frac{1}{4}) \operatorname{ctg} \alpha_0,$$

$$\epsilon_n = \frac{\pi}{2\alpha_0} \left(2n - m + \frac{3}{2} - \frac{\alpha_0}{\pi} \right).$$

Следовательно, собственными значениями являются:

$$\lambda_{mn} = \mu_{mn}(\mu_{mn} + 1).$$

Согласно граничным условиям (1.6):

$$\begin{cases} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{n=1}^{+\infty} (\tilde{a}_{mn} R_0^{\mu_{mn}} + \tilde{b}_{mn} R_0^{-(\mu_{mn}+1)}) P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha) = f_1(\alpha, \phi), \\ \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{n=1}^{+\infty} (\tilde{a}_{mn} R_1^{\mu_{mn}} + \tilde{b}_{mn} R_1^{-(\mu_{mn}+1)}) P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha) = f_2(\alpha, \phi). \end{cases} \quad (1.9)$$

Пусть функции $f_1(\alpha, \phi)$ и $f_2(\alpha, \phi)$ можно представить в виде рядов:

$$\begin{cases} f_1(\alpha, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{mn} P_{\mu_{mn}}^m, \\ f_2(\alpha, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{n=1}^{+\infty} B_{mn} P_{\mu_{mn}}^m. \end{cases} \quad (1.10)$$

Из выражений (1.9) и (1.10) видно:

$$\begin{cases} \tilde{a}_{mn} R_0^{\mu_{mn}} + \tilde{b}_{mn} R_0^{-(\mu_{mn}+1)} = A_{mn}, \\ \tilde{a}_{mn} R_1^{\mu_{mn}} + \tilde{b}_{mn} R_1^{-(\mu_{mn}+1)} = B_{mn}. \end{cases}$$

Решение данной системы относительно неизвестных \tilde{a}_{mn} и \tilde{b}_{mn} дает:

$$\begin{cases} \tilde{a}_{mn} = A_{mn} \frac{R_1^{-\mu_{mn}}}{\left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{\mu_{mn}} - \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{\mu_{mn}+1}} - B_{mn} \frac{R_0^{-\mu_{mn}}}{\left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{\mu_{mn}+1} - \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{\mu_{mn}}}, \\ \tilde{b}_{mn} = -A_{mn} \frac{R_1^{\mu_{mn}+1}}{\left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{\mu_{mn}} - \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{\mu_{mn}+1}} + B_{mn} \frac{R_0^{\mu_{mn}+1}}{\left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{\mu_{mn}+1} - \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{\mu_{mn}}}. \end{cases}$$

В итоге, распределение потенциала как общее решение уравнения Лапласа для задачи (1.6) выписывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} U_1(r, \alpha, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{n=1}^{+\infty} \left(A_{mn} \frac{\left(\frac{r}{R_1}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{r}{R_1}\right)^{-\mu_{mn}-1}}{\left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{-\mu_{mn}-1}} + \right. \\ \left. + B_{mn} \frac{\left(\frac{r}{R_0}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{r}{R_0}\right)^{-\mu_{mn}-1}}{\left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{-\mu_{mn}-1}} \right) P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha). \quad (1.11) \end{aligned}$$

Коэффициенты A_{mn} и B_{mn} данного разложения находятся из свойств ортогональности полиномов Лежандра:

$$\int_{-1}^1 P_h^m(x) P_s^m(x) dx = \begin{cases} 0, & h \neq s, \\ N_h, & h = s, \end{cases}$$

где $N_h = \frac{2h - (h+m)!}{2h+1 (h-m)!}$ - нормировочный множитель собственных функций.

При умножении обеих частей уравнения (1.10) на $P_s(x)$, интегрировании в промежутке $[-1; +1]$ и переходе к искомым переменным можно найти:

$$\begin{cases} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} A_{mn} = \frac{1}{N_{1,mn}} \int_0^{\alpha_0} f_1(\alpha, \phi) \sin \alpha P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha) d\alpha, \\ \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} B_{mn} = \frac{1}{N_{2,mn}} \int_0^{\alpha_0} f_2(\alpha, \phi) \sin \alpha P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha) d\alpha. \end{cases}$$

Окончательно, для определения желаемых коэффициентов необходимо воспользоваться дискретным преобразованием Фурье:

$$\begin{cases} A_{mn} = \frac{1}{2\pi N_{1,mn}} \int_0^{2\pi} e^{-im\phi} \int_0^{\alpha_0} f_1(\alpha, \phi) \sin \alpha P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha) d\alpha d\phi, \\ B_{mn} = \frac{1}{2\pi N_{1,mn}} \int_0^{2\pi} e^{-im\phi} \int_0^{\alpha_0} f_2(\alpha, \phi) \sin \alpha P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha) d\alpha d\phi. \end{cases} \quad (1.12)$$

Задача (1.7) соответствует системе (1.4), решениями которой являются:

$$R(r) = \tilde{a}_{m\nu} r^{m\nu} + \tilde{b}_{m\nu} r^{-(m\nu+1)} \quad (1.13)$$

и

$$A(\alpha) = P_{m\nu}^m(\cos \alpha),$$

где значения $m\nu$ считаются комплексными.

Нулевые граничные условия по переменной r задачи (1.7) представляются следующей системой:

$$\begin{cases} \tilde{a}_{m\nu} R_0^{m\nu} + \tilde{b}_{m\nu} R_0^{-(m\nu+1)} = 0, \\ \tilde{a}_{m\nu} R_1^{m\nu} + \tilde{b}_{m\nu} R_1^{-(m\nu+1)} = 0. \end{cases} \quad (1.14)$$

Для существования нетривиального решения данной однородной системы уравнений необходимо, чтобы определитель системы был равен нулю:

$$R_0^{m\nu} R_1^{-(m\nu+1)} - R_0^{-(m\nu+1)} R_1^{m\nu} = 0 \Rightarrow$$

$$\left(\frac{R_0}{R_1} \right) = \sqrt[2m\nu+1]{1}.$$

С использованием формулы для вычисления корней n -й степени из ненулевого комплексного числа

$$e^{\ln \frac{R_0}{R_1}} = e^{i \frac{2\pi k}{2m\nu+1}}$$

выводится степень решений:

$$m\nu = -\frac{1}{2} + ip_k,$$

где $p_k = \frac{\pi k}{\ln \frac{R_0}{R_1}}$, $k = 0, 1, 2, \dots$

Для поиска собственных функций по переменной r необходимо в системе (1.14) выразить $\tilde{a}_{m\nu}$ из первого уравнения и подставить в решение уравнения (1.13) по r :

$$-\tilde{b}_{m\nu} r^{m\nu} R_0^{-(2m\nu+1)} + \tilde{b}_{m\nu} r^{-m\nu+1} = \tilde{B} r^{-\frac{1}{2}} (e^{ip_k \ln \frac{r}{R_0}} - e^{-ip_k \ln \frac{r}{R_0}}),$$

где \tilde{B} - некоторая постоянная. Следовательно, собственными функциями по переменной r будут являться:

$$R(r) = r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}).$$

Таким образом, общее решение задачи (1.7) представимо в виде:

$$U_2(r, \alpha, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{k=0}^{+\infty} \tilde{c}_{mk} P_{-\frac{1}{2}+ip_k}^m(\cos \alpha) r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}).$$

Согласно граничным условиям (1.7):

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{k=0}^{\infty} P_{-\frac{1}{2}+ip_k}^m(\cos \alpha_0) r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}) = f_3(r, \phi).$$

В свою очередь, функция $f_3(r, \phi)$ разложима в виде рядов:

$$f_3(r, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{k=0}^{\infty} C_{mk} r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}). \quad (1.15)$$

Из двух последних выражений можно выразить неизвестный коэффициент \tilde{c}_{mk} :

$$\tilde{c}_{mk} = \frac{C_{mk}}{P_{-\frac{1}{2}+ip_k}^m(\cos \alpha_0)}.$$

Следовательно, имеет место общее решение задачи (1.7):

$$U_2(r, \alpha, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \sum_{k=0}^{+\infty} C_{mk} \frac{P_{-\frac{1}{2}+ip_k}^m(\cos \alpha)}{P_{-\frac{1}{2}+ip_k}^m(\cos \alpha_0)} r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}). \quad (1.16)$$

Коэффициент C_{mk} находится из граничных условий с использованием ортогональности функций:

$$\int_{R_0}^{R_1} r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}) \sin(p_l \ln \frac{r}{R_0}) dr = \begin{cases} 0, & k \neq l, \\ N_{2,mk}, & k = l, \end{cases}$$

где $N_{2,mk} = \ln \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{-\frac{1}{2}}$. Умножение обеих частей уравнения (1.15) на $\sin(p_l \ln \frac{r}{R_0})$ и интегри-

рование по отрезку $[R_0, R_1]$ дает:

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} C_{mk} = \frac{1}{N_{2,mk}} \int_{R_0}^{R_1} f_3(r, \phi) r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}) dr.$$

С помощью дискретного преобразования Фурье можно получить окончательный вид желаемого коэффициента:

$$C_{mk} = \frac{1}{2\pi N_{2,mk}} \int_0^{2\pi} e^{-im\phi} \int_{R_0}^{R_1} f_3(r, \phi) r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}) dr d\phi. \quad (1.17)$$

В конечном счете, распределение электростатического потенциала искомой задачи (1.1) как общее решение уравнения Лапласа представляется в виде суммы решений задач (1.6) и (1.7) и выписывается в следующем виде:

$$U(r, \alpha, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\phi} \left[\sum_{n=1}^{+\infty} \left(A_{mn} \frac{\left(\frac{r}{R_1}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{r}{R_1}\right)^{-\mu_{mn}-1}}{\left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{R_0}{R_1}\right)^{-\mu_{mn}-1}} + \right. \right. \\ \left. \left. + B_{mn} \frac{\left(\frac{r}{R_0}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{r}{R_0}\right)^{-\mu_{mn}-1}}{\left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{\mu_{mn}} + \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^{-\mu_{mn}-1}} \right) P_{\mu_{mn}}^m(\cos \alpha) + \sum_{k=0}^{+\infty} C_{mk} \frac{P_{-\frac{1}{2}+ip_k}^m(\cos \alpha)}{P_{-\frac{1}{2}+ip_k}^m(\cos \alpha_0)} r^{-\frac{1}{2}} \sin(p_k \ln \frac{r}{R_0}) \right]. \quad (1.18)$$

1.4 Заключение к главе 1

В данной главе представлена математическая модель полевой эмиссионной диодной системы с острым катодом в виде сферы-на-конусе. Поверхность анода – часть сферы. На катоде и аноде заданы не осесимметричные граничные условия первого рода. Трехмерная граничная задача для уравнения Лапласа (1.1) решена во всей области исследуемой системы. Распределение электростатического потенциала найдено в аналитическом виде (1.18). Коэффициенты разложений вычислены в явном виде и представлены формулами (1.12) и (1.17).

Глава 2

Моделирование осесимметричной диодной системы

2.1 Физическая постановка осесимметричной задачи с диодной системой в виде сферы-на-конусе

Исходная задача состоит в поиске распределения потенциала u между двумя сферами радиусов r_1 и r_2 в сферической системе координат (Рис. 2.1):

$$x_1 = r,$$

$$x_2 = \theta,$$

$$x_3 = \phi.$$

В настоящей главе рассматривается осесимметричный случай при $\frac{\partial u}{\partial \phi} = 0$, потенциал u не зависит от угла ϕ : $u = u(r, \theta)$.

Поверхность катода - внутренняя сфера радиуса r_1 ;
 $r = r_2$ - поверхность анода.

2.2 Математическая постановка осесимметричной задачи с диодной системой в виде сферы-на-конусе

Необходимо найти функцию $u(r, \theta)$, удовлетворяющую уравнению Лапласа и граничным условиям:

$$\Delta u = 0; \quad r_1 \leq r \leq r_2, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad (2.1)$$

$$\begin{cases} u(r_1, \theta) = f_1(\theta), \\ u(r_2, \theta) = f_2(\theta), \end{cases} \quad (2.2)$$

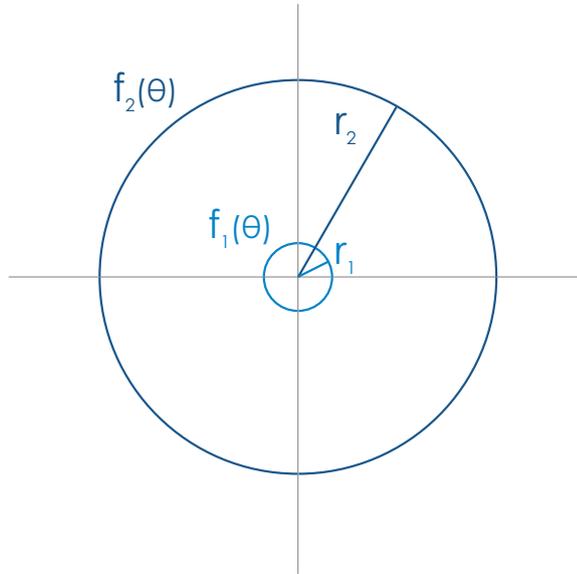


Рис. 2.1: Схематическое изображение диодной системы

где

$$f_1(\theta) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \theta \leq \theta_0, \\ -u_2, & \theta_0 < \theta \leq \pi, \end{cases} \quad (2.3)$$

$$f_2(\theta) = \begin{cases} u_0, & 0 \leq \theta \leq \theta_0, \\ -u_1, & \theta_0 < \theta \leq \pi. \end{cases} \quad (2.4)$$

2.3 Решение осесимметричной граничной задачи

С учетом осесимметричности задачи оператор Лапласа записывается в следующем виде:

$$\Delta u = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right).$$

Решение находится методом разделения переменных, предполагается: $u(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$.

Подстановка в уравнение (2.1) дает:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 R' \Theta) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta R' \Theta) = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{r^2 R'' + 2r R'}{R} = - \frac{\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \Theta')}{\Theta} = \lambda^2.$$

Функция $\Theta(\theta)$ определяется из уравнения

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \Theta') + \lambda^2 \Theta = 0.$$

Пусть $t = \cos \theta$. Соответственно, $X(t)|_{t=\cos \theta} = X(\cos \theta) = \Theta(\theta)$ и

$$\frac{d}{dt} \left[(1-t^2) \frac{dX}{dt} \right] + \lambda^2 X = 0,$$

где $-1 \leq t \leq 1$. Непрерывными и ограниченными решениями данного уравнения в исследуемой области являются полиномы Лежандра первого рода при $\lambda^2 = n(n+1)$, $n = 0, 1, 2, \dots$: $\Theta(\theta) = P_n(\cos \theta)$.

Для определения $R(r)$ имеет место уравнение Эйлера:

$$r^2 R'' + 2r R' - \lambda^2 R = 0.$$

Функция $R(r)$ ищется в виде $R = r^\sigma$. Подстановка искомой формы решения в уравнение Эйлера дает характеристическое уравнение для σ :

$$\sigma(\sigma + 1) - n(n + 1) = 0,$$

откуда $\sigma = n$ и $\sigma = -(n + 1)$. Из этого следует, что частными решениями уравнения Лапласа будут являться функции $r^n \Theta(\theta)$ и $r^{-(n+1)} \Theta(\theta)$.

Таким образом, искомое решение представляется в виде:

$$u(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} (\widetilde{C}_n r^n + \widetilde{D}_n r^{-(n+1)}) P_n(\cos \theta),$$

где коэффициенты \widetilde{C}_n и \widetilde{D}_n находятся с помощью граничных условий (2.2):

$$\begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} (\widetilde{C}_n r_1^n + \widetilde{D}_n r_1^{-(n+1)}) P_n(\cos \theta) = f_1(\theta), \\ \sum_{n=0}^{\infty} (\widetilde{C}_n r_2^n + \widetilde{D}_n r_2^{-(n+1)}) P_n(\cos \theta) = f_2(\theta), \end{cases}$$

причем считается, что функции $f_1(\theta)$ и $f_2(\theta)$ можно представить в виде рядов:

$$\begin{aligned} f_1(\theta) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n P_n(\cos \theta), \\ f_2(\theta) &= \sum_{n=0}^{\infty} d_n P_n(\cos \theta). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{cases} \widetilde{C}_n r_1^n + \widetilde{D}_n r_1^{-(n+1)} = c_n, \\ \widetilde{C}_n r_2^n + \widetilde{D}_n r_2^{-(n+1)} = d_n. \end{cases}$$

Решение данной системы относительно неизвестных \widetilde{C}_n и \widetilde{D}_n представляется в виде:

$$\begin{cases} \widetilde{C}_n = c_n \frac{r_2^{-n}}{\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^n - \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^{n+1}} - d_n \frac{r_1^{-n}}{\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{n+1} - \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^n}, \\ \widetilde{D}_n = -c_n \frac{r_2^{n+1}}{\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^n - \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^{n+1}} + d_n \frac{r_1^{n+1}}{\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{n+1} - \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^n}. \end{cases}$$

В итоге, общее решение краевой задачи для уравнения Лапласа можно выписать через коэффициенты разложения c_n и d_n :

$$u(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(c_n \frac{\left(\frac{r}{r_2}\right)^n - \left(\frac{r_2}{r}\right)^{n+1}}{\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^n - \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^{n+1}} + d_n \frac{\left(\frac{r_1}{r}\right)^{n+1} - \left(\frac{r}{r_1}\right)^n}{\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{n+1} - \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^n} \right) P_n(\cos \theta). \quad (2.5)$$

Необходимо найти коэффициенты c_n и d_n с помощью граничных условий (2.2)-(2.4). Очевидно, когда $f_1(\theta)$ принимает нулевое значение, то, соответственно, $c_n = 0$. В ином случае,

$$f_1(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n P_n(\cos \theta) = -u_2.$$

После замены $x = \cos \theta$, $dx = -\sin \theta d\theta$ и домножения обеих частей уравнения на $\int_{-1}^{\cos \theta_0} P_m(x) dx$ выводится следующее выражение:

$$c_n \int_{-1}^{\cos \theta_0} P_n(x) P_m(x) dx = -u_2 \int_{-1}^{\cos \theta_0} P_m(x) dx.$$

Из ортогональности полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \frac{2}{2n+1}, & m = n, \end{cases}$$

следует $c_n = -u_2 \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^{\cos \theta_0} P_n(x) dx$.

Справедлива формула [14]:

$$\int_{-1}^u P_n(u) du = \frac{P_{n+1}(u) - P_{n-1}(u)}{2n+1},$$

откуда можно выписать выражение для коэффициента c_n :

$$c_n = -\frac{u_2}{2} (P_{n+1}(\cos \theta_0) - P_{n-1}(\cos \theta_0)). \quad (2.6)$$

Аналогично,

$$d_n = u_0 \frac{2n+1}{2} \int_{\cos \theta_0}^1 P_n(x) dx - u_1 \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^{\cos \theta_0} P_n(x) dx.$$

Из выписанных первых пяти полиномов Лежандра

$$P_0(x) = 1,$$

$$P_1(x) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2},$$

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x,$$

$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8},$$

видно, что $P_n(1) = 1$ и

$$\int_{-1}^1 P_n(x) dx = \frac{P_{n+1}(1) - P_{n-1}(1)}{2n+1} = 0 \Rightarrow$$

$$\int_{-1}^{\cos \theta_0} P_n(x) dx = - \int_{\cos \theta_0}^1 P_n(x) dx,$$

и, окончательно, искомый коэффициент выписывается в виде:

$$d_n = -\frac{u_0 + u_1}{2} (P_{n+1}(\cos \theta_0) - P_{n-1}(\cos \theta_0)). \quad (2.7)$$

2.4 Численные расчеты диодной системы

Для численного представления распределения потенциала (2.5) в области $X = [r_1; r_2] \times [0; \pi]$ исследуемой задачи использовались язык программирования *C++*, среда разработки *Microsoft Visual Studio* и пакет *Matlab* для построения графиков.

Параметры системы:

$r_1 = 1$ - радиус внутренней окружности;

$r_2 = 2$ - радиус внешней окружности;

$$\theta_0 = \frac{5\pi}{6};$$

$u_0 = 100, \quad r = r_2, \quad 0 \leq \theta \leq \theta_0;$

$u_1 = 10, \quad r = r_2, \quad \theta_0 \leq \theta \leq \pi;$

$u_2 = 10, \quad r = r_1, \quad \theta_0 \leq \theta \leq \pi.$

Параметры программы:

$l = 30$ - количество отрезков разбиения;

$hR = \frac{r_2 - r_1}{l}$ - шаг для радиуса;

$hT = \frac{\pi}{l}$ - шаг для угла θ ;

$eps = 10^{-6}$ - точность суммирования.

Для ускорения программы использовалось одно из наиболее популярных средств параллельного программирования для компьютеров с общей памятью - технология *OpenMP*.

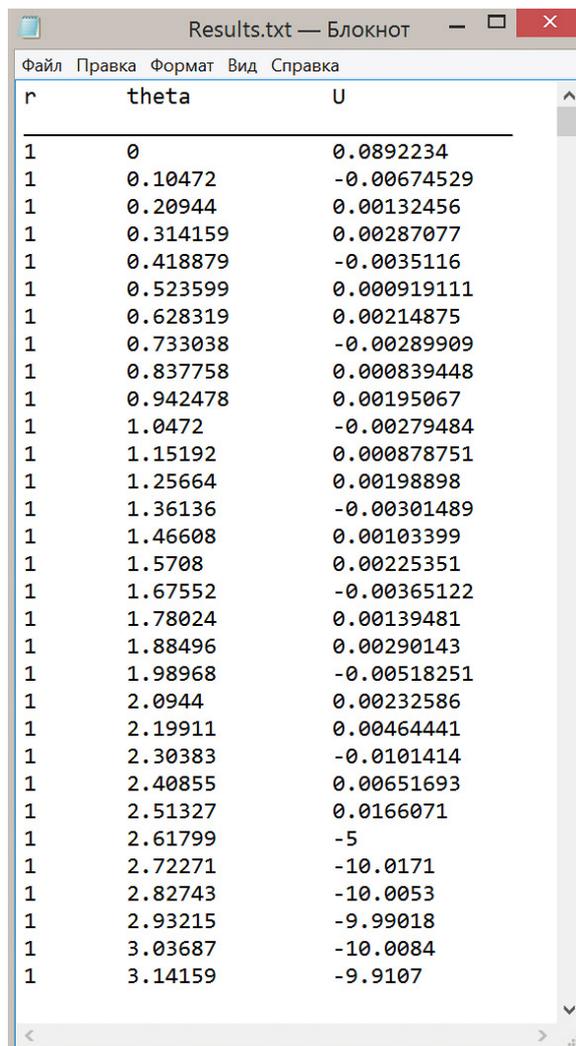
Краткое описание функций:

В функции *main()* реализуется двойной цикл по r и θ для поиска значений потенциала u по точкам (r, θ) ;

Функция *Sum_U* вычисляет коэффициенты разложения (2.6) и (2.7), а также возвращает значение потенциала в конкретной точке (r, θ) ;

Для вычисления полиномов Лежандра заданной степени использовался заголовочный файл [15].

Результаты программы записываются в файл (Рис.2.2), и строится контурный график (Рис. 2.3).



r	theta	U
1	0	0.0892234
1	0.10472	-0.00674529
1	0.20944	0.00132456
1	0.314159	0.00287077
1	0.418879	-0.0035116
1	0.523599	0.000919111
1	0.628319	0.00214875
1	0.733038	-0.00289909
1	0.837758	0.000839448
1	0.942478	0.00195067
1	1.0472	-0.00279484
1	1.15192	0.000878751
1	1.25664	0.00198898
1	1.36136	-0.00301489
1	1.46608	0.00103399
1	1.5708	0.00225351
1	1.67552	-0.00365122
1	1.78024	0.00139481
1	1.88496	0.00290143
1	1.98968	-0.00518251
1	2.0944	0.00232586
1	2.19911	0.00464441
1	2.30383	-0.0101414
1	2.40855	0.00651693
1	2.51327	0.0166071
1	2.61799	-5
1	2.72271	-10.0171
1	2.82743	-10.0053
1	2.93215	-9.99018
1	3.03687	-10.0084
1	3.14159	-9.9107

Рис. 2.2: Файл результатов работы программы

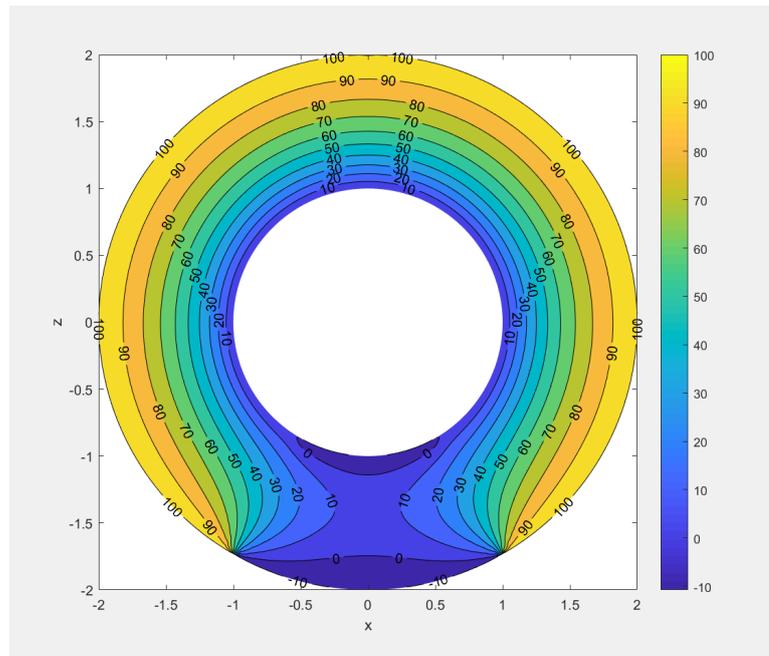


Рис. 2.3: Контурный график диодной системы

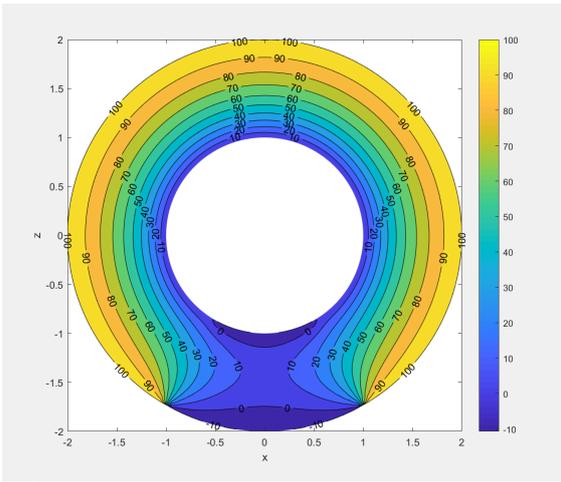
Исходный код программы прикреплен в приложении.

В зависимости от изменений параметров системы получаются разные контурные графики.

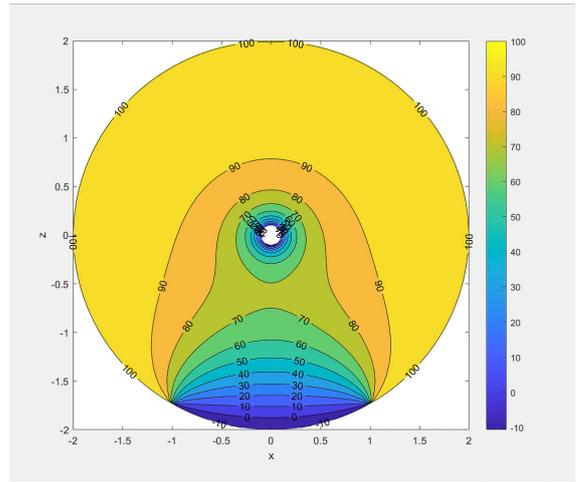
На рисунке 2.4 показаны изменения в виде графиков при разных значениях внутреннего радиуса r_1 .

Рисунок 2.5 показывает расчет системы при разных значениях потенциала u_2 на внутренней границе.

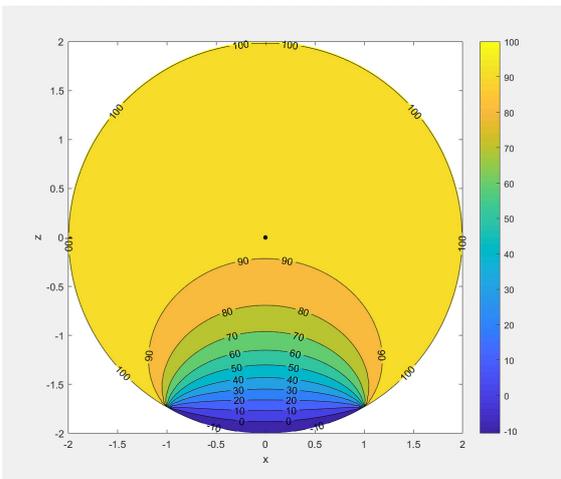
Изменение вида графиков в зависимости от угла θ_0 представлено на рисунке 2.6.



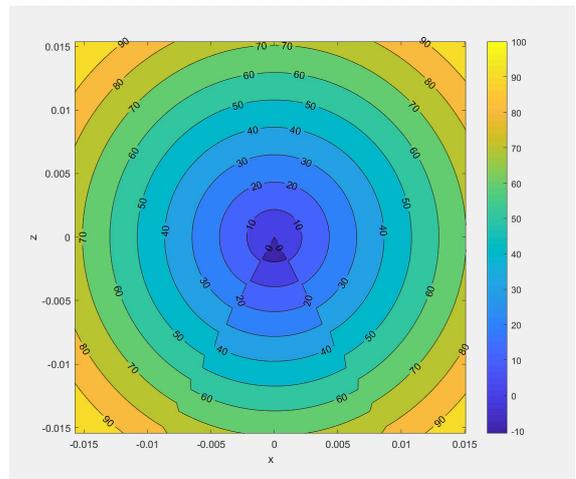
(a) $r_1 = 1$



(b) $r_1 = 10^{-1}$

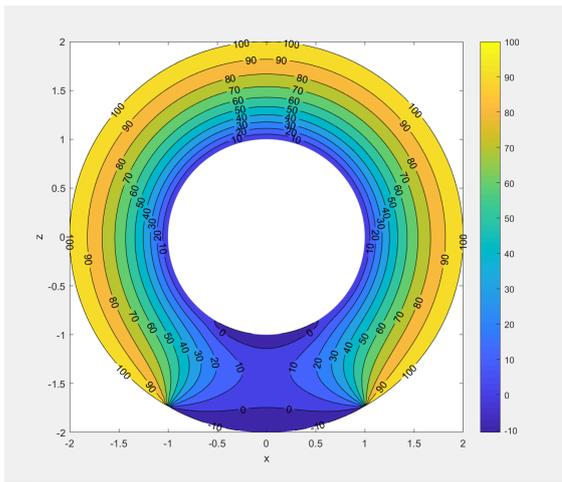


(c) $r_1 = 10^{-5}$

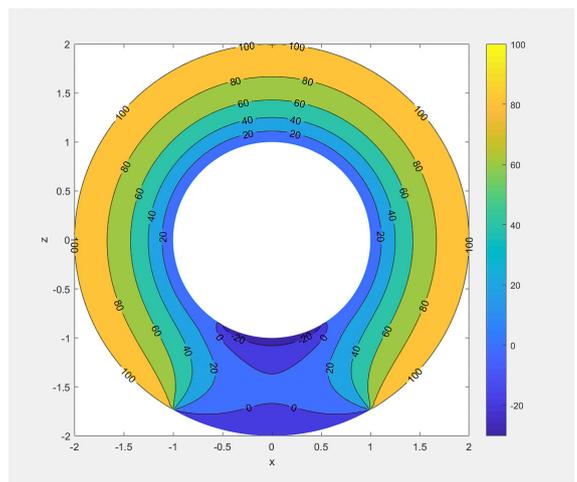


(d) $r_1 = 10^{-5}$

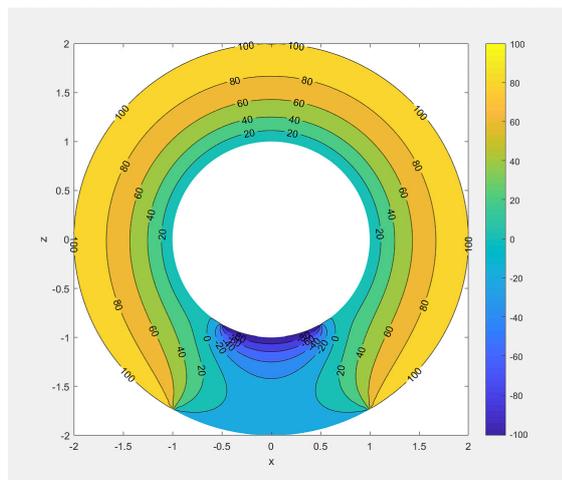
Рис. 2.4: Изменения в зависимости от внутреннего радиуса r_1



(a) $u_2 = 10$

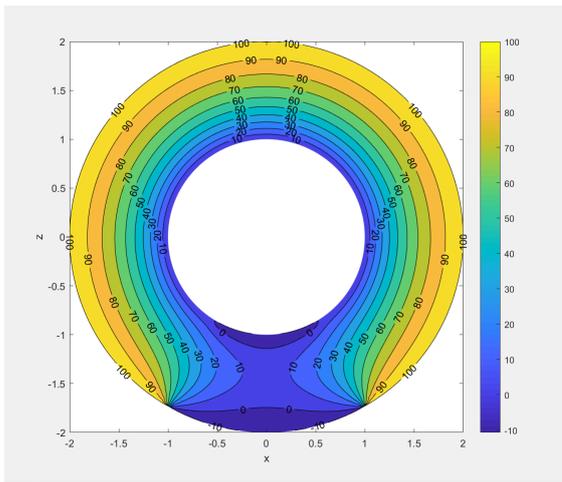


(b) $u_2 = 30$

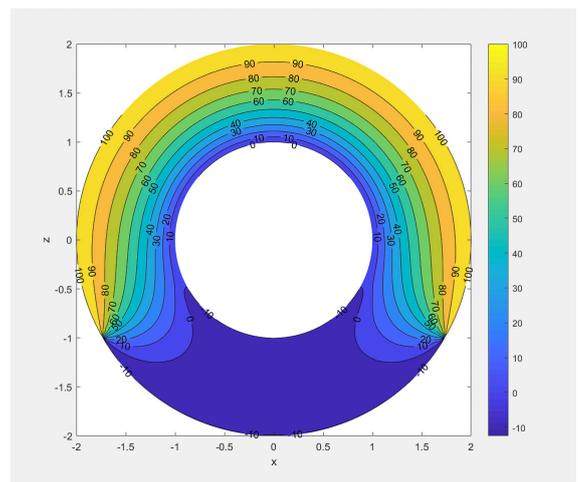


(c) $u_2 = 100$

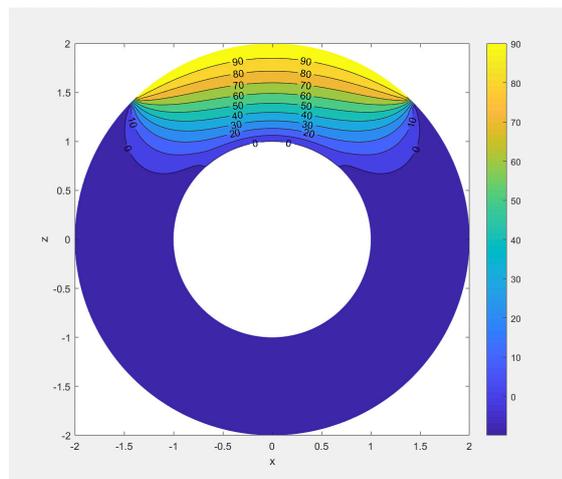
Рис. 2.5: Изменения в граничном значении u_2



$$(a) \theta_0 = \frac{5\pi}{6}$$



$$(b) \theta_0 = \frac{2\pi}{3}$$



$$(c) \theta_0 = \frac{\pi}{4}$$

Рис. 2.6: Изменения угла α_0

2.5 Заключение к главе 2

В настоящей главе рассматривается математическая модель полевой эмиссионной диодной системы для осесимметричного случая. Распределение электростатического потенциала найдено в аналитическом виде (2.5) как разложение по полиномам или функциям Лежандра с коэффициентами, выписанными в явном виде формулами (2.6) и (2.7), а также представлены численные расчеты и графики распределения потенциала исследуемой задачи.

Результаты и выводы

В настоящей работе рассматривается математическая модель диодной системы с полевым эмиттером.

В заключение можно сформулировать следующие результаты и выводы:

- Представлены математические модели осесимметричной и трехмерной диодной систем;
- Получены решения задач во всей области системы. Распределение электростатического потенциала найдено в аналитическом виде как разложение по полиномам или функциям Лежандра;
- Коэффициенты разложений вычислены в явном виде;
- Написана программа на языке C++ для реализации полученного аналитического решения и представлены графики распределения потенциала для осесимметричной диодной системы;
- Варьированием параметров диодной системы можно получить катод с заданной формой острия.

Литература

1. Forbes R.G. Progress in establishing field electron emission science // 10th International Vacuum Electron Sources Conf., IVESC 2014 and 2nd International Conf. on Emission Electronics, ICEE 2014 – Proc. 6891979, Saint Petersburg, Russian Federation, July 2014.
2. Forbes R.G. Development of an integrated theory of field emitter optics // 2014 20th International Workshop on Beam Dynamics and Optimization, BDO 2014 – Proc. 6890017, Saint Petersburg, Russian Federation, July 2014.
3. Izrael'yants K.R., Orlov A.P., Ormont A.B., Chirkova E.G. Effect of the cesium and potassium doping of multiwalled carbon nanotubes grown in an electrical arc on their emission characteristics // Phys. of the Solid State, 2017, vol. 59, no. 4, pp. 838–844.
4. Куковицкий Е. Ф., Львов С. Г. Углеродные нанотрубные автокатоды на никелевых ядрах // Нано- и микросистемная техника, 2010, № 6, с. 2-5.
5. Hao T., Li W., Liu Z., et. al. Low turn-on field nanodiamond conic field emitter // Diamond and Related Materials, 2017, vol. 75, pp. 91–95.
6. Nikiforov K.A., Sayfullin M.F. Modelling of field emitter array characteristics in diode system // J. of Phys.: Conf. Series, 2015, vol. 643, no. 1, Article number 012122.
7. Lifantova E.E., Varayun M.I., Antonov A.Y. A linear regression model for the field emission signal // 2016 Young Researchers in Vacuum Micro/Nano Electronics, VMNE-YR 2016 - Proc. 16 March 2017, Saint-Petersburg, Russian Federation, October 2016, Article number 7880407.
8. Карташев В. А., Карташев В. В. Определение формы и размера острия иглы туннельного микроскопа // Нано- и микросистемная техника, 2010, № 10, с. 7-10.
9. Vinogradova E.M., Egorov N.V., The generation and control system of the electron beam modeling and optimization // 2015 International Conference on "Stability and Control Processes" in Memory of V.I. Zubov, SCP 2015 - 30 November 2015, Saint-Petersburg, Russian Federation, Article number 7342096, pp. 211–213.
10. Tingting Hao, Wuxia Li, Zhe Liu, Yu Suna, Ling Jina, Junjie Li, Changzhi Gu. Low turn-on field nanodiamond conic field emitter // Diamond Related Materials, 75 (2017), P.92.
11. Гобсон Е.В. Теория сферических и эллипсоидальных функций. М.: ИЛ, 1952. 393 с.

12. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.
13. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1963. 1100 с.
14. Alfred Clark, Jr. ME201/MTH281/ME400/CHE400 Legendre Polynomials, 2011.
15. GitHub <https://github.com/jachappell/Legendre-polynomials>

Приложение

```
1 #include <iostream>
2 #include "legendre.h"
3 #include <cmath>
4 #include <omp.h>
5 #include <iomanip>
6 #include <fstream>
7
8 using namespace std;
9 using namespace Legendre;
10
11 const int num = 4; //количество потоков
12 double r1 = 1;
13 double r2 = 2;
14 const double PI = 2 * acos(0.0);
15 double Theta_0 = 5 * PI / 6;
16 const double eps = 10e-6;
17
18 int u0 = 100;
19 int u1 = 10;
20 int u2 = 10;
21
22 double Sum_U(double r, double Theta)
23 {
24
25     double Sum = 0;
26     double c_n, d_n;
27     double P_n, P_p1_1, P_min_1;
28
29     double Ui[501];
30     Ui[0] = 0;
31
32     int i = 0;
33
34     while (i <= 500) {
35         if (i == 0) {
36             c_n = -u2 / 2 * (cos(Theta_0) + 1);
37             d_n = -u1 / 2 * (cos(Theta_0) + 1) + u0 / 2 * (1 - cos(Theta_0));
38
39             Sum = Sum + (c_n*(1 - (r2 / r)) / (1 - (r2 / r1)) + d_n*((r1 / r) - 1) / ((r1 / r2) - 1));
40             Ui[i + 1] = Sum;
41         }
42         else {
43
44             P_n = Pn<double>(i, cos(Theta));
45             P_p1_1 = Pn<double>(i + 1, cos(Theta_0));
46             P_min_1 = Pn<double>(i - 1, cos(Theta_0));
47
48
49             c_n = -u2 / 2 * (P_p1_1 - P_min_1);
50             d_n = -(u0 + u1) / 2 * (P_p1_1 - P_min_1);
51
52             Sum = Sum + (c_n*pow(r1 / r, i + 1)*pow((r / r2), 2 * i + 1) - 1) / (pow((r1 / r2), 2 * i + 1) - 1)
53                 + d_n*pow(r / r2, i)*(1 - pow((r1 / r), 2 * i + 1)) / (1 - pow((r1 / r2), 2 * i + 1)) * P_n;
54             Ui[i + 1] = Sum;
55         }
56
57         if (abs(Ui[i + 1] - Ui[i]) <= eps) {
58             break;
59         }
60
61         i++;
62     } //конец цикла по i
63
64     return Sum;
65 }
```

```

66
67
68 int main()
69 {
70     const int l = 30; //количество отрезков разбиения
71     double hR = (r2 - r1) / l; //шаг для радиуса
72     int T1 = 0;
73     double T2 = PI;
74     double hT = (T2 - T1) / l; //шаг для угла Theta
75     double U[l + 1][l + 1];
76     double R[l + 1];
77     double T[l + 1];
78
79     ofstream fout;
80     fout.open("Results.txt");
81
82     R[0] = r1;
83     T[0] = 0;
84
85     for (int i = 0; i < l; i++) {
86         R[i + 1] = R[i] + hR;
87         T[i + 1] = T[i] + hT;
88     }
89
90     omp_set_num_threads(num); //количество потоков
91
92     #pragma omp parallel for
93
94     for (int k = 0; k < l + 1; k++) {
95         double r = R[k];
96
97         for (int j = 0; j < l + 1; j++) {
98             double Theta = T[j];
99
100             U[k][j] = Sum_U(r, Theta);
101
102             } //конец цикла по Theta
103
104         } // конец цикла по r
105
106         fout << "r" << " " << "theta" << " " << "U" << endl;
107         fout << "_____ " << endl;
108         for (int k = 0; k < l + 1; k++) {
109             for (int j = 0; j < l + 1; j++) {
110                 fout << R[k] << " " << T[j] << " " << U[k][j] << endl;
111             }
112             fout << "\n" << endl;
113         }
114         fout.close();
115
116     cout << "THE END" << endl;
117     system("pause");
118     return 0;
119 }
120

```