

Санкт–Петербургский государственный университет

Какорин Никита Сергеевич

Выпускная квалификационная работа

*Разработка и анализ программного обеспечения
для численного моделирования автоэмиссионных
систем*

Уровень образования: магистратура

Направление 01.04.02 «Прикладная математика и информатика»

Основная образовательная программа ВМ.5718.2018 «Прикладные
информационные технологии. Информационно-экспертные системы»

Научный руководитель:

доцент, кафедра моделирования
электромеханических и компьютерных систем,
к.ф.-м.н. Никифоров Константин Аркадьевич

Рецензент:

доцент, кафедра радиофизики и электронных систем,
ФГАОУ ВО «СВФУ имени М.К. Аммосова»
Физико-технический институт,
к.ф.-м.н. Антонов Степан Романович

Санкт-Петербург

2020 г.

Содержание

1	Введение	4
2	Постановка задачи	7
2.1	Физическая модель	8
2.2	Модельные упрощения и их обоснование	12
3	Обзор Литературы	15
3.1	Полевая эмиссия электронов	15
3.2	Динамика пучка заряженных частиц	16
3.3	Методы частиц	17
3.4	Вычислительный пакет	19
4	Математическая модель	20
4.1	Метод частицы в сетке	20
4.1.1	Расщепление на физические процессы	20
4.1.2	Модель макрочастицы	20
4.1.3	Интерполяция частицы-сетка	22
4.1.4	Интерполяция сетка-частицы	23
4.2	Расчётная область	24
4.3	Уравнения поля	25
4.4	Траектория пучка частиц	25
4.5	Численные схемы метода частицы в ячейке	27
4.5.1	Ядро макрочастицы	27
4.5.2	Решение граничной задачи для уравнения Пуассона	28
4.5.3	Вычисление напряженности поля	31
4.5.4	Интегрирование уравнений движения	32
4.5.5	Вычисление плотности тока	34

4.6	Моделирование начальной скорости	36
5	Программная реализация и численный эксперимент	39
5.1	Вычислительный пакет DAISI	39
5.2	Реализация модели автоэмиссии	41
5.3	Моделирование начальной скорости	43
5.4	Консольный клиент для библиотеки вычислителя	44
5.5	Построение вычислительной сетки	48
5.6	Оценка эффективного коэффициента усиления поля	50
6	Результаты вычислений	53
7	Заключение и Выводы	58
	Список литературы	60

1. Введение

Вакуумная наноэлектроника (ВНЭ) - новая область микро и наноэлектроники, получившая развитие в последние десятилетия. ВНЭ основана на использовании электронов в вакууме при размере активных элементов в десятые и сотые доли микрона. Практическим активным элементом в системах ВНЭ является автоэлектронный эмиттер. ВНЭ включает в себя микроскопические устройства и активные компоненты систем, соизмеримые с нанометровым масштабом. ВНЭ является своего рода альтернативной электроникой по отношению к твердотельной и использует управляемое баллистическое движение электронов в вакууме, в отличие от переноса носителей (электронов и дырок) в полупроводниках. Малость автоэмиттера позволяет миниатюризировать активные элементы вплоть до $10^{-8} \dots 10^{-9}$ м. В настоящее время есть экспериментальные результаты, показывающие,

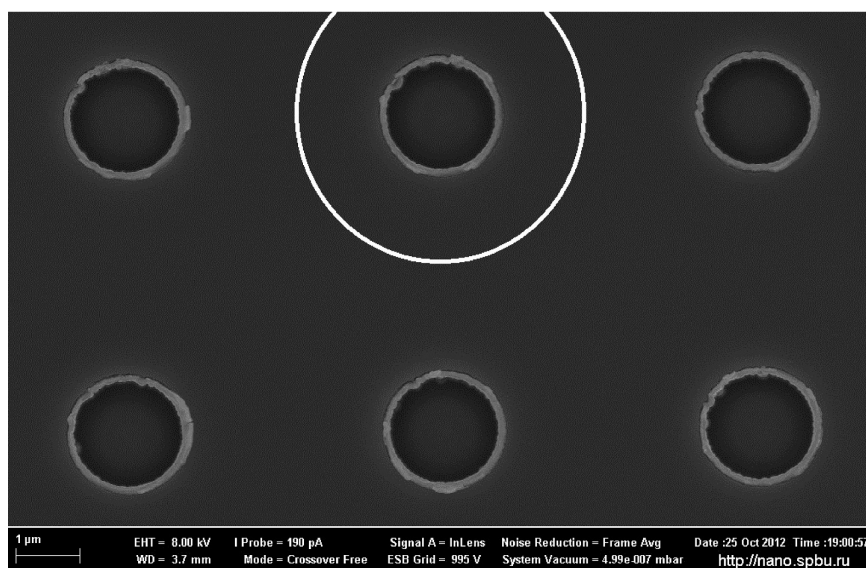


Рис. 1: Изображение участка поверхности массива эмиттеров в растровом электронном микроскопе; выделена граница ячейки моделирования (вид сверху)

что для особых материалов (в частности, нанотрубок углерода и т.д.) размер активных элементов может составлять десятки атомных размеров. Малые размеры автокатода позволяют реализовать плотность элементов до $10^8 \dots 10^{10}$ см $^{-2}$, а с использованием самоорганизующихся систем (фуллере-

нов, нанотрубок т. д.) до 10^{12} см⁻².

Полевая эмиссия характеризуется следующими преимуществами [1]:

- 1) отсутствие рассеяния энергии при переносе электронов в вакууме, которое обеспечивает преимущество при создании целого класса мощных, в том числе СВЧ приборов;
- 2) безынерционность автоэмиссионного процесса и короткий период переноса электронов в вакуумном зазоре, позволяющие создавать быстродействующие высокочастотные устройства;
- 3) резкая нелинейность вольт-амперных характеристик автоэмиссии и возможность создания за счет этого преобразователей и умножителей частоты;
- 4) отсутствие энергетических затрат на эмиссионный акт вследствие квантовой природы туннелирования;
- 5) радиационная и термическая стойкость эмиттера.

Однако, полевая эмиссия также обладает и своими недостатками:

- 1) требуется высокая глубина вакуума, так как при сорбировании остаточных газов на поверхности автокатода увеличивается работа выхода материала эмиттера, что может значительно уменьшать эмиссионный ток;
- 2) сложность изготовления наноразмерных эмиттеров, а также их деформация в ходе работы, которая влечет приход всего устройства в негодность;
- 3) область высоких напряжений, где электроны приобретают наибольшую энергию, лежит в зоне острия эмиттера. В результате электрон получает вектор скорости, далеко не всегда совпадающий с вектором на-

пряженности поля в приборе. Электронный пучок расширяется, но поскольку используется многоострийная или многолезвийная система, то общий поток электронов получается пересекающимся, из-за чего требуется прибегать к различным технологическим приемам для сужения и выпрямления пучка;

В настоящее время перспективными источниками электронов в вакуумных приборах на основе автоэлектронной эмиссии являются эмиссионные катоды в виде многоэмиттерных массивов [2]. В данной работе рассматривается ячейка тонкопленочного многоэмиттерного автокатода с лезвийной структурой эмиттеров вертикального типа [3] в триодной конфигурации (Рис. 1).

2. Постановка задачи

Целью работы является разработка и анализ программного обеспечения для численного моделирования таких характеристик ячейки нанотриода, как распределения электрического поля и плотности объемного заряда в межэлектродном пространстве, величины тока эмиссии ячейки, вольт-амперных характеристик ячейки.

В соответствии с целью данной работы необходимо выполнить следующие этапы исследования:

- 1) Построение математической модели объекта исследования.
- 2) Изучение методов численного решения поставленной задачи.
- 3) Подготовка вычислительного пакета для проведения компьютерного моделирования.
- 4) Проведение вычислительного эксперимента, анализ и интерпретация полученных результатов.

В рамках построения математической модели были поставлены следующие задачи:

- 1) В электростатическом приближении записать уравнение поля в осесимметричной постановке задачи для выбранной аппроксимации формы эмиттера.
- 2) Сформулировать уравнения движения системы эмиттированных электронов.
- 3) Сформулировать граничные и начально-краевые условия.

В рамках программной реализации поставлена задача модифицировать программное средство для расчета динамики интенсивных пучков заря-

женных частиц с открытым исходным кодом DAISI (Design of Accelerators, optimizations and Simulations) [4, 5]. Модификация заключается в:

- 1) добавлении возможности проведения симуляции работы устройства в режиме полевой эмиссии согласно модели Фаулера-Нордгейма.
- 2) добавлении возможности задавать начальное распределение скоростей частиц.
- 3) адаптации пакета для запуска серий экспериментов в высокопроизводительном окружении.

Вычислительный эксперимент заключается в:

- 1) Построении вычислительной сетки.
- 2) Эмпирической оценке коэффициента локального усиления поля [6] на основе экспериментальных данных для диодной конфигурации.
- 3) Определении вольт-амперных характеристик нанотриода и таких свойств ячейки как потенциал в межэлектродном пространстве, напряженность электрического поля с учетом распределения заряда автоэлектронов в межэлектродном пространстве, плотность заряда и общий ток эмиссии.
- 4) Исследование влияния начального распределения скоростей эмиттируемых частиц на эмиссионную картину.

2.1. Физическая модель

На рисунке 2 схематически изображен полевой эмиссионный вакуумный нанотриод. На подложке находится лезвийный эмиттер, выполняющий роль катода. Его вершина располагается близко к пленке управляющего электрода, выполняющего роль затвора. Также в схеме присутствует удаленный электрод, являющийся непосредственно коллектором электронов.

Геометрические параметры, обозначенные на рисунке буквами h, r, H, d, D, L , могут изменяться в зависимости от технологического процесса. Величины

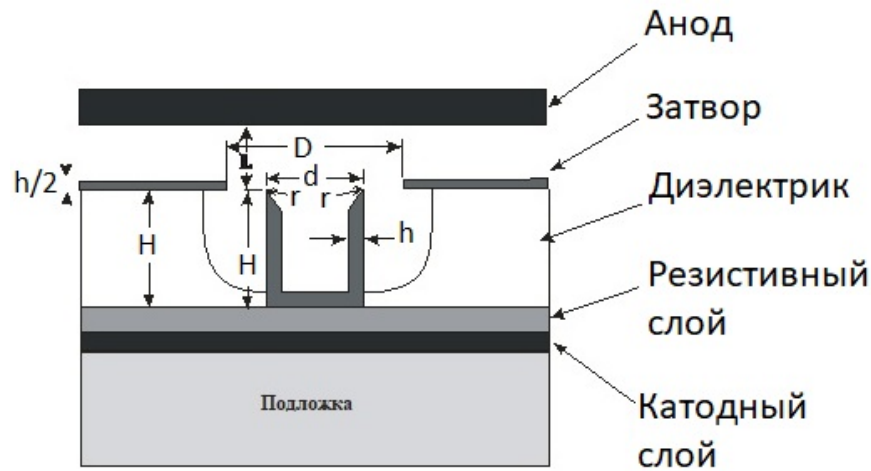


Рис. 2: Схема ячейки многоэмиттерного автокатода в триодной конфигурации

соответствующих параметров, использованных в данной работе, приведены в таблице 1. Ввиду осевой симметрии ячейки нанотриода при построении геометрической модели можно рассмотреть только половину сечения всего устройства относительно вертикальной оси симметрии, перпендикулярной к линии анода. Поверхность эмиттера моделируется как идеальный проводник без диэлектрического покрытия, связанного с наличием адсорбатов, край лезвия аппроксимируется поверхностью тороида с эллиптическим сечением (полуоси эллипса 120 и 50 нм соответственно).

Анодный ток в триодной структуре есть функция двух переменных: затворного напряжения U_g и напряжения анод–катод U_a , таким образом $I_a = F(U_g, U_a)$. Для изучения и расчета режимов работы триода данные зависимости изображают в виде семейства характеристик, с принятием за параметр одной из переменных. Если в качестве параметра выбрать U_a , то получаются анодно-сеточные характеристики, если же в качестве параметра выбрано U_g , то получаются анодные характеристики. То же применимо и относительно затворного тока I_g . В этом случае при использовании в качестве параметров U_a и U_g получаются сеточные и сеточно-анодные характеристики соответственно.

Таблица 1: Величины геометрических параметров ячейки нанотриода в мкм

Величина	Описание	Значение (мкм)
d	диаметр цилиндрического эмиттера	2,0
h	толщина лезвийного эмиттера	0,1
H	расстояние от затвора до основания ячейки	0,7
r	радиус кривизны вершины эмиттера	0,02
$(D-d)/2$	D — диаметр диафрагмы затвора	0,05
L	расстояние от вершины эмиттера до анода	0,5

На рисунке 3 приведено схематическое изображение нанодиода. На подложке также находится лезвийный эмиттер, выполняющий роль катода. Также в схеме присутствует удаленный электрод, являющийся коллектором электронов. Геометрические параметры, обозначенные на рисунке буквами h, r, H, d , приведены в таблице 3. Поверхность эмиттера моделируется аналогичным нанотриоду образом. Характеристики диодной матрицы, для

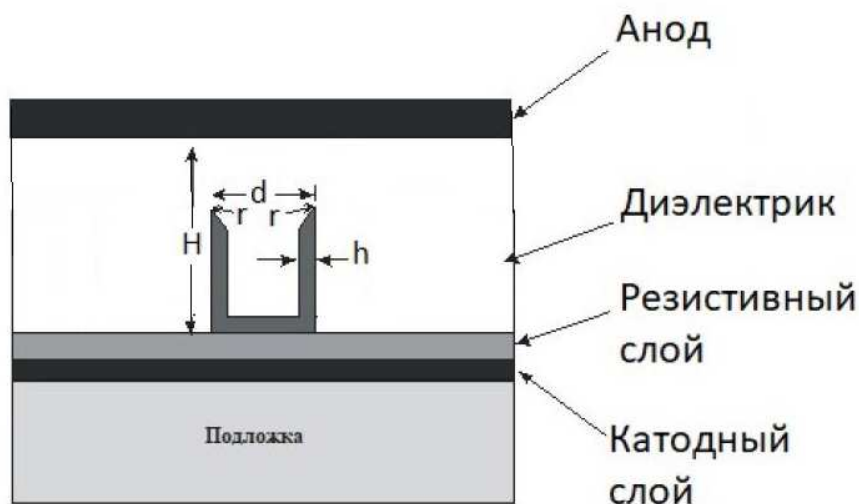


Рис. 3: Схема ячейки многоэмиттерного автокатаода в диодной конфигурации

которой имеются экспериментальные данные, приведены в таблице 2. Площадь приставного анода составляет 0.09мм^2 , соответственно среднее число эмиттеров в пластине равно 160000.

Таблица 2: Величины геометрических характеристик нанодиодной матрицы в мкм

Величина	Значение		
	Мин.	Тип.	Макс.
Шаг катодов	4,7	5	5,3
Диаметр	2,2	2,5	2,8
Высота катода	0,6	0,7	0,8
Высота спейсера	1	1,2	1,4
Радиус кривизны вершины эмиттера	0,015	0,020	0,025

Измерения характеристик проводились в воздухе. Приставной анод устанавливался рабочей стороной вверх, куда помещался зонд-токосъёмник. Режим измерений импульсный, длина импульсов — 300 мкс. Материал, из которого изготовлен катод, может быть различным, например, нитрид ниобия или карбид кремния. Работа выхода катода в данной содели оценивается в 4 эВ. Результаты измерений в виде зависимости анодного тока от подаваемого на анод напряжения приведены в таблице 4.

Таблица 3: Величины геометрических параметров ячейки нанодиода в мкм

Величина	Описание	Значение
d	диаметр цилиндрического эмиттера	2,0
h	толщина лезвийного эмиттера	0,1
H	расстояние от затвора до основания ячейки	0,7
r	радиус кривизны вершины эмиттера	0,02

Таблица 4: Зависимость анодного тока $I(A)$ от анодного напряжения $U(B)$

$U(B)$	$I(A)$
3,41	0,05
4,88	0,33
6,44	1,49
7,54	3,25
9,12	4,88
11,19	11,63
18,75	13,1

Автоэмиссионные наноструктуры предполагают процесс испускания электронов проводящими телами под действием внешнего электрического поля без предварительного возбуждения этих электронов, то есть отсутствуют дополнительные затраты энергии, что в свою очередь несвойственно другим видам электронной эмиссии. Данное явление объясняется с помощью туннельного эффекта электронов — преодоления электроном потенциального барьера вблизи поверхности тела. Туннелирование становится возможным за счёт искривления потенциального барьера при приложении внешнего электрического поля. При этом появляется область пространства вне тела, в которой электрон может существовать с той же энергией, которой он обладает, находясь в теле [2].

2.2. Модельные упрощения и их обоснование

При построении моделей триода и диода сделаны упрощающие предположения: аксиальная симметрия процессов и квазиэлектростатическое приближение. Последнее означает, что величина тока мала настолько, что можно пренебречь индуцированным собственным магнитным полем. Кроме того, плотность заряда меняется медленно по сравнению со скоростью распространения электромагнитных волн.

Таким образом, рассматривается квази-электростатическая задача в,

так называемой, 2.5-мерной постановке. Суть такой постановки задачи заключается в том, что в силу осевой симметрии ячейки нанотриода $\partial/\partial\varphi = 0$, где φ — угловая координата, соответственно поле рассматривается на плоскости (r, z) , положение эмиттируемых частиц также рассматривается на плоскости (r, z) , но скорости частиц рассматриваются в пространстве (r, φ, z) .

Изготовленные по микротехнологии полевые эмиттеры являются поликристаллическими. Структура получаемых катодов имеет столбцовый характер, наблюдаемый у всех тонких пленок, причем кристаллическая структура поверхности на вершине эмиттера изменяется от образца к образцу, в зависимости от ориентации кристаллитов и геометрической формы, а также состава вещества. Как следствие, физические условия на эмиссионной поверхности катода очень неоднородны: шероховатость, изменения работы выхода (вызываемые также адсорбатами) и пр. Это приводит к тому, что эмиссия идет не со всей поверхности вершины катода (для рассматриваемой структуры это поверхность эллиптического тороида с одним из радиусов, равным радиусу кривизны вершины эмиттера), а небольшого количества малых областей атомарного размера. Однако, и в случае сглаженных поверхностей эмиттера происходит развитие нестабильности в следствии разрушения эмиттирующей поверхности. Это разрушение может иметь локальный характер при образовании на эмиттере отдельных микронеоднородностей, формируемых в результате ионной бомбардировки катода [1]. При этом для возникновения тока требуется гораздо меньшее напряжение, чем может ожидаться для эмиттера с физически и геометрически однородной поверхностью. Неоднородность физических условий на эмиссионной поверхности (шероховатость на атомарном масштабе, изменения работы выхода и пр.) учитывается в коэффициенте усиления локального электрического поля β . Поэтому относительно физических условий на поверхности эмиссии принимаются следующие упрощающие предполо-

жения:

- 1) Работа выхода постоянна и равна $\Phi = 4.0$ эВ.
- 2) Поверхность является геометрически гладкой, на кромке вершины вписан эллиптический тороид.

3. Обзор Литературы

3.1. Полевая эмиссия электронов

Полевая эмиссия осуществляется под воздействием высоких электрических полей порядка $10^8 \dots 10^9$ В/м. Для создания таких полей в реальных условиях с помощью разности потенциалов вершине эмиттера придаётся форма острия или лезвия с радиусом кривизны от нескольких десятых микрона до десятков ангстрем. Приложение сильного электрического поля истончает потенциальный барьер на границе "металл — вакуум". В результате электроны из твердого тела начинают проникать в вакуум [1].

Описание формальной теории процесса автоэлектронной эмиссии получено в рамках теории Фаулера — Нордгейма. Теория сводится к построению зависимости плотности тока от электрического поля. Данная зависимость получена, опираясь на квантовомеханический туннельный эффект [7]. Однако, в теории Фаулера — Нордгейма допускается предположение о положении потенциала простейшим — фактически учитываются только силы зеркального изображения. С развитием нановакуумной техники появляется всё больше фактов, демонстрирующих отклонения от теории при приложении сильных полей, при наличии пространственного заряда и др. [1].

В связи со значительным смещением интересов вакуумной микроэлектроники в область наноэлектроники в последние десятилетия, появилась необходимость в изучении физических свойств автоэмиссионного процесса для наноразмерных эмиттеров, размеры которых не превышают ширины поверхностного потенциального барьера [1, 2].

Соответственно, целью работы является моделирование и анализ характеристик ячейки многоэмиттерного автокатода. Эффективность работы матричного автоэлектронного триода определяется величиной плотно-

сти эмиссионного тока и равномерностью ее распределения по площади матрицы. Плотность тока эмиссии зависит от величины напряженности электрического поля, поэтому важнейшие факторы, влияющие на эффективность работы катода, — это однородность макромасштабного распределения поля по площади матрицы и максимальное его усиление на эмиссионной поверхности в микромасштабе [1].

3.2. Динамика пучка заряженных частиц

При построении математической модели возникает необходимость в решении задачи динамики пучка заряженных частиц, взаимодействующих между собой, с учётом кулоновских сил. Дальнодействующий характер кулоновских сил приводит к взаимодействию каждой из частиц с совокупностью других частиц. В этом случае дальноедействие означает, что радиус влияния этой силы больше чем среднее расстояние между частицами. Теорию, формулирующую описание этой задачи, разработал выдающийся советский учёный А.А. Власов. Учитывая модельные упрощения, теорию Власова можно ограничить описанием динамики пучка заряженных частиц в самосогласованном квази-электростатическом поле [8]. Математическим описанием является функция распределения частиц в пучке частиц:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{x}} + \frac{q_\alpha \vec{E}}{m_\alpha} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} = 0, \quad (1)$$

где α — номер пучка частиц, f_α — функция распределения, \vec{x} — вектор пространства координат X , \vec{v} — скорость частиц, \vec{E} — вектор напряженности электрического поля, q_α, m_α — заряд и масса частиц пучка α , t — момент времени.

Вектор напряженности электрического поля определяется из квазиста-

тической системы уравнений Максвелла (системы Пуассона):

$$\begin{cases} \Delta U(\vec{x}, t) = -\frac{\rho(\vec{x}, t)}{\varepsilon}, \\ \vec{E}(\vec{x}, t) = -\nabla U(\vec{x}, t), \end{cases} \quad (2)$$

где $U(\vec{x}, t)$ — потенциал самосогласованного электрического поля, $\rho(\vec{x}, t)$ — объёмная плотность пространственного заряда.

Вектор плотности тока $\vec{j}(t, \vec{x})$ и объёмная плотность пространственного заряда определяются как моменты функций распределения по пространству скоростей:

$$\begin{aligned} \rho(t, \vec{x}) &= \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} dv, \\ \vec{j}(t, \vec{x}) &= \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int \vec{v} \cdot f_{\alpha} dv \end{aligned} \quad (3)$$

Полное аналитическое исследование уравнения Власова невозможно, в связи с этим, начиная с середины прошлого века, стремительно развиваются численные методы, решающие уравнение Власова. Эти методы включают методы частиц, конечно-разностные методы, методы конечных элементов. В рамках данной работы, внимание фокусируется на методах частиц.

3.3. Методы частиц

Метод частиц представляет из себя семейство вычислительных моделей частиц, варьирующихся в зависимости от специфики задачи. Выделяется три основных типа вычислительной модели частиц: модель частица-частица, модель частицы-сетка и модель частицы-частица-частица-сетка.

В первой модели используется формулировка закона силы дальнего действия, во второй модели сила рассматривается как полевая характеристика и аппроксимируется на сетке, третья, соответственно, является гибридом

первой и второй моделей.

В методе частица-сетка заряженная среда моделируется усредненными по некоторым правилам значениями плотностей заряда и тока в узлах сетки, построенной в Эйлеровых координатах, получаемых в результате интегрирования траекторий макрочастиц. Распределение электрических полей вычисляются в сеточных узлах решением уравнения Пуассона (уравнений Максвелла в случае электромагнитного поля) [9].

Выбор модели диктуется спецификой физического явления и соображениями вычислительных затрат. При больших количествах частиц применяются модели частицы-сетка и частицы-частица-частица-сетка, что вытекает, в свою очередь, из того, что число узлов сетки выходит гораздо меньшим чем число частиц, а учет взаимодействия всех частиц модели частицы-частица влечет квадратичную сложность $O(N^2)$, где N — число частиц.

Движение заряженных частиц в электромагнитных полях, учитывая влияние частиц друг на друга, вполне естественно описывается методом из группы частицы-сетка частица в ячейке (англ. particle-in-cell, PIC) [10], основанном на расщеплении задачи на физические процессы и смешанном подходе, Лагранжевом и Эйлеровом. Макрочастицы перемещаются в непрерывном фазовом пространстве в Лагранжевой системе координат, в то время как полевые характеристики и ток вычисляются на стационарных узлах вычислительной сетки в Эйлеровой системе координат. Метод частиц в ячейке формируется из двух основных этапов:

- 1) Эйлеров этап, в рамках которого происходит вычисление полей в узлах сетки в Эйлеровых координатах и интерполяция поля на местоположение частиц в Лагранжевых координатах.
- 2) Лагранжев этап, включающий в себя интегрирование уравнений движения (вычисление новых координат и импульсов частиц), расчет тока

эмиссии на новом временном шаге.

3.4. Вычислительный пакет

В рамках программной реализации используется программное средство для расчета динамики интенсивных пучков заряженных частиц с открытым исходным кодом DAISI (Design of Accelerators, optImizations and Simulations) [4, 5], а также результаты об эффективности вычислительных методик, зафиксированные в процессе разработки DAISI [11, 12].

Остальные литературные источники, результаты которых используются для решения поставленной задачи, упоминаются последовательно по ходу изложения работы.

4. Математическая модель

4.1. Метод частицы в сетке

4.1.1. Расщепление на физические процессы

Факторизация на шаге k эволюционной переменной t сводится к последовательному решению двух задач. Первая:

$$\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial t} = 0, f_\alpha^{(1)}(kt) = f_\alpha(kt), \quad (4)$$

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho(\vec{x}, kt)}{\varepsilon}. \quad (5)$$

Причём уравнение (5) эквивалентно (2).

Вторая задача:

$$\frac{\partial f_\alpha^{(2)}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_\alpha^{(2)}}{\partial \vec{x}} + \frac{q_\alpha \vec{E}}{m_\alpha} \cdot \frac{\partial f_\alpha^{(2)}}{\partial \vec{v}} = 0, f_\alpha^{(2)}(kt) = f_\alpha(kt). \quad (6)$$

Система (4)–(5) описывает формирование квази-электростатического поля, согласованного с пространственным зарядом. Система (6) в дальнейшем сводится к интегрированию динамической системы частиц.

Указанным способом осуществляется расщепление на физические процессы системы Власова-Пуассона, где (4)–(5) отвечает Эйлерову этапу, а (6) — Лагранжеву [10].

4.1.2. Модель макрочастицы

Математическая формулировка методов частиц даётся на основе предположения, что функция распределения, фигурирующая в (1), есть сумма распределений [10]:

$$f_\alpha(t, \vec{x}, \vec{v}) = \sum_i f_{\alpha_i}(t, \vec{x}, \vec{v}), \quad (7)$$

где f_{α_i} — функция распределения плотности частиц в макрочастице, состоящей из совокупности частиц, близких друг к другу в координатном пространстве.

Функция распределения плотности в макрочастице в общем для методов частиц представляется в виде следующего уравнения:

$$f_{\alpha_i}(t, \vec{x}, \vec{v}) = N_{\alpha_i} \cdot R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) \cdot P(\vec{v}, \vec{v}_{\alpha_i}(t)), \quad (8)$$

где $R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t))P(\vec{v}, \vec{v}_{\alpha_i}(t))$ — функции распределения плотности координат и скоростей в макрочастице, N_{α_i} — число физических частиц в макрочастице, оно полагается постоянным числом, то есть не зависящим от времени. Функцию распределения координат называют ядром модельной частицы. Ядро макрочастицы задаёт форму частицы. В классических подходах метода частица в ячейке скорость частиц внутри одной и той же макрочастицы полагают равной, то есть распределение по импульсам есть дельта-функция Дирака. Ядро макрочастицы обладает свойствами неотрицательности, симметричности и нормированности [10]:

$$\begin{aligned} R(x_1, x_2) &= R(x_2, x_1) \geq 0, \\ \frac{\partial R(x_1, x_2)}{\partial x_1} &= -\frac{\partial R(x_1, x_2)}{\partial x_2}, \\ \int_X R(x_1, x_2) dx_1 &= 1, \end{aligned} \quad (9)$$

Таким образом, (8), записывается в виде:

$$f_{\alpha_i}(t, \vec{x}, \vec{v}) = N_{\alpha_i} \cdot R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) \cdot \delta(\vec{v} - \vec{v}_{\alpha_i}(t)), \quad (10)$$

Подставив (10) в (3), пользуясь фильтрующим свойством дельта-функции Дирака, получаем связь вектора плотности тока и объёмной плотности про-

странственного заряда с ядром макрочастицы:

$$\begin{aligned}\rho(t, \vec{x}) &= \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} dv = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i N_{\alpha_i} \cdot R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)), \\ \vec{j}(t, \vec{x}) &= \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int \vec{v} \cdot f_{\alpha} dv = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i N_{\alpha_i} \cdot \vec{v}_{\alpha_i} \cdot R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)).\end{aligned}\quad (11)$$

Действующее на макрочастицу поле:

$$E_{\alpha_i}(t, \vec{x}) = \int_X E(\vec{x}, t) \cdot R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) d\vec{x}.\quad (12)$$

4.1.3. Интерполяция частицы-сетка

По окончании расчетов согласно Лагранжеву этапу необходимо распространить решение (10) в пространство сеточных функций. Пусть, ω_g — ячейка расчетной области, а $|\omega_g|$ — объёмная мера ячейки. Тогда в силу закона сохранения [10]:

$$f_{\omega_g} = \frac{1}{|\omega_g|} \cdot \int_{\omega_g} f_{\alpha} d\vec{x} = \frac{1}{|\omega_g|} \cdot \sum_i N_{\alpha_i} \delta(\vec{v} - \vec{v}_{\alpha_i}(t)) \cdot \int_{\omega_g} R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) d\vec{x}.\quad (13)$$

Проекция на пространство сеточных функций моментов функции плотности распределения (13) в пространстве скоростей:

$$\begin{aligned}\rho_{\omega_g}(t) &= \frac{1}{|\omega_g|} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i N_{\alpha_i} \cdot \int_{\omega_g} R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) d\vec{x}, \\ \vec{j}_{\omega_g}(t) &= \frac{1}{|\omega_g|} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i N_{\alpha_i} \cdot \vec{v}_{\alpha_i} \cdot \int_{\omega_g} R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) d\vec{x}.\end{aligned}\quad (14)$$

Введём сеточное ядро макрочастицы $R_g(\vec{x}_g, \vec{x}(t))$:

$$R_g(\vec{x}_g, \vec{x}(t)) = \frac{1}{|\omega_g|} \cdot \int_{\omega_g} R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) d\vec{x}.\quad (15)$$

Тогда сеточные моменты можно записать в виде:

$$\begin{aligned}\rho_{\omega_g}(t) &= \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i N_{\alpha_i} \cdot R_g(\vec{x}_g, \vec{x}(t)), \\ \vec{j}_{\omega_g}(t) &= \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i N_{\alpha_i} \cdot v_{\alpha_i} \cdot R_g(\vec{x}_g, \vec{x}(t)).\end{aligned}\quad (16)$$

Основное отличие (16) от (11) заключается в том, что величины, представленные в первом из соотношений, представляют из себя плотностные характеристики, рассчитанные на единицу объёма ячейки. Однако по структуре оба представления аналогичны, с различием в ядре макрочастицы.

4.1.4. Интерполяция сетка-частицы

Перед выполнением Лагранжева этапа необходимо интерполировать вычисленные значения поля в сеточных узлах в местоположение частиц. Это осуществляется с помощью интерполирующей функции:

$$E(\vec{x}, t) = \sum_g E(\vec{x}_g, t) S(\vec{x}_g, \vec{x}), \quad (17)$$

где $S(\vec{x}_g, \vec{x})$ — интерполяционная функция, удовлетворяющая условию:

$$\sum_g S(\vec{x}_g, \vec{x}) = 1, \forall \vec{x} \in X. \quad (18)$$

Выбрав интерполирующую функцию в виде ближайшего сеточного узла в геометрическом смысле:

$$\sum_g S(\vec{x}_g, \vec{x}) = \sum_g \delta(\vec{x}_g - \arg \min_g (\vec{x}_g^2 - \vec{x}^2)) = 1, \quad (19)$$

Что эквивалентно выбору интерполяции ближайшим сеточным узлом, т.е.:

$$E(\vec{x}, t) = E(\vec{x}_g, t), \vec{x} \in \omega_g. \quad (20)$$

Согласно [10] действующее на макрочастицу поле (12) примет вид:

$$\begin{aligned}
 E_{\alpha_i}(t) &= \int_X E(\vec{x}_g, t) \cdot R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) d\vec{x} = \sum_g E(\vec{x}_g, t) \int_{\omega_g} R(\vec{x}, \vec{x}_{\alpha_i}(t)) d\vec{x} = \\
 &= \sum_g E(\vec{x}_g, t) \cdot |\omega_g| \cdot R_g(\vec{x}_g, \vec{x}(t)). \quad (21)
 \end{aligned}$$

4.2. Расчётная область

Пусть задана расчётная область \overline{G} :

$$\overline{G} = G \cup \partial G,$$

$$\partial G = \Gamma_1 \cup \Gamma_2,$$

где ∂G — граница вычислительной области, $\Gamma_1 = \{b_2, b_3, b_4, b_5, b_6, b_9, b_{10}\}$, $\Gamma_2 = \{b_1, b_7, b_8\}$ — границы, где заданы граничные условия первого и второго рода соответственно, границы $b_i, i = 1..10$ — границы вычислительной области (Рис. 4). Под потоком заряженных частиц полагается множество частиц одного типа, эмиттируемых в расчётную область \overline{G} с одной непрерывной поверхности или кривой старта (эмиттера). Массу, массу покоя и

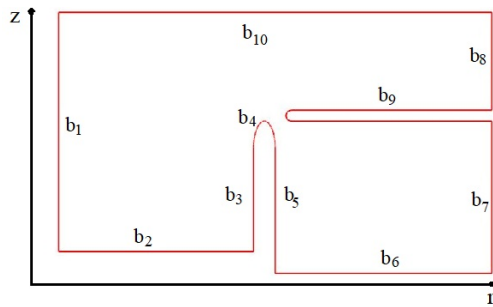


Рис. 4: Геометрическая модель ячейки эмиттера согласно схеме (Рис. 2) и осесимметричной 2.5-мерной постановке задачи; под b_9 полагается вся поверхность затвора

заряд частиц в потоке заряженных частиц будем обозначать далее как m , m_0 и q соответственно.

4.3. Уравнения поля

Согласно предположению о квази-электростатическом приближении, потенциал и напряженность электрического поля описывается уравнением Пуассона и связью между напряженностью поля и потенциалом в дифференциальной форме (2). С граничными условиями:

$$\begin{cases} U(\vec{r}, t) = g(\vec{r}), \vec{r} \in \Gamma_1, \\ \frac{\partial U(\vec{r}, t)}{\partial \vec{n}} = 0, \vec{r} \in \Gamma_2, \end{cases} \quad (22)$$

где \vec{r} — вектор координат точки в межэлектродном пространстве, \vec{n} — векторы нормали к границам из множества Γ_2 соответственно, $g(\vec{r})$ — некоторая функция, описывающая потенциалы электродов в рамках рассматриваемой задачи. В цилиндрических координатах (2) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U(r, z)}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 U(r, z)}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U(r, z)}{\partial r} &= -\frac{\rho(r, z)}{\varepsilon_0}, \quad (r, z) \in G, \\ E_r(r, z) &= -\frac{\partial U(r, z)}{\partial r}, \quad E_z(r, z) = -\frac{\partial U(r, z)}{\partial z}, \quad (r, z) \in G. \end{aligned} \quad (23)$$

А граничные условия (22):

$$\begin{cases} U = g(r, z), \quad (r, z) \in \Gamma_1, \\ \frac{\partial U}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (r, z) \in \Gamma_2. \end{cases} \quad (24)$$

4.4. Траектория пучка частиц

При подстановке (10) в (6) и последующем интегрировании с произвольной весовой функцией, можно получить, что для удовлетворения полученного равенства в силу произвола весовой функции и симметричности

ядра макрочастицы необходимо выполнение условий:

$$\begin{cases} \frac{dx_{\alpha_i}^{\vec{}}}{dt} = v_{\alpha_i}^{\vec{}}, \\ \frac{dv_{\alpha_i}^{\vec{}}}{dt} = \frac{q_{\alpha} \cdot \vec{E}_{\alpha_i}}{m_{\alpha}}. \end{cases} \quad (25)$$

В цилиндрической системе координат и в обобщённых импульсах:

$$\vec{p} = \vec{v}/c, \quad (26)$$

Система (25) может быть записана в виде:

$$\begin{cases} \frac{dr}{d\tau} = \frac{p_r}{\gamma}, & \frac{dp_r}{d\tau} = \frac{eE_r}{m_0c^2} + \frac{p_{\varphi}^2}{r^3\gamma}, \\ \frac{dz}{d\tau} = \frac{p_z}{\gamma}, & \frac{dp_z}{d\tau} = \frac{eE_z}{m_0c^2}, \\ & \frac{dp_{\varphi}}{d\tau} = 0, \end{cases} \quad (27)$$

где $\gamma = \sqrt{1 + \vec{p} \cdot \vec{p}}$ — фактор Лоренца, $\vec{p} = (p_r, p_z, p_{\varphi})$ — вектор обобщённых импульсов, c — скорость света, $\tau = c \cdot t$ — независимая переменная.

Таким образом, уравнения (23–24) и (27) являются математической формализацией поставленной задачи. В соответствии с описанным подходом к моделированию пучков заряженных частиц, предлагается рассмотреть задачу математического моделирования автоэмиссионных наноструктур вакуумной наноэлектроники на основе расчета самосогласованных стационарных электрических полей и динамики стационарных потоков макрочастиц.

4.5. Численные схемы метода частицы в ячейке

4.5.1. Ядро макрочастицы

Выбор ядра макрочастицы характеризует метод частицы в сетке. С помощью выбора того или иного вида функции ядра решают ряд проблем, связанных с неудовлетворительными погрешностями при решении, которые могут быть вызваны малым, по сравнению с реальными данными, числом модельных частиц, влиянием конечности размера частиц на дисперсионные свойства пучка, наличием пространственной сетки и шага по временной переменной [9, 10].

Остановимся на модели облако в ячейке (англ. CIC — cloud in cell) [9, 10, 13]. Рассмотрим одномерное ядро:

$$R_x(x, x_{\alpha_i}) = \begin{cases} \frac{1}{h_x}, & |x - x_{\alpha_i}| \leq \frac{h_x}{2}, \\ 0, & |x - x_{\alpha_i}| > \frac{h_x}{2}, \end{cases} \quad (28)$$

где h_x — размер макрочастицы. Положим размер макрочастицы равным шагу по эйлеровой сетке. Используя (15) и очевидные равенства для одномерного случая $\omega_g = [x_g, x_{g+1}]$, $|\omega_g| = h_x = x_{g+1} - x_g$, получим сеточное ядро:

$$R_x(x_g, x_{\alpha_i}) = \begin{cases} \frac{h_x - |x_g - x_{\alpha_i}|}{h_x}, & |x_g - x_{\alpha_i}| \leq \frac{h_x}{2}, \\ 0, & |x_g - x_{\alpha_i}| > \frac{h_x}{2}, \end{cases} \quad (29)$$

Для сохранения свойств и требований, накладываемых на ядро макрочастицы (9) выберем многомерное ядро в виде произведения одномерных:

$$R(\vec{x}_g, \vec{x}_{\alpha_i}) = R_x(x_g, x_{\alpha_i}) \cdot R_y(y_g, y_{\alpha_i}) \cdot R_z(z_g, z_{\alpha_i}). \quad (30)$$

В свою очередь в цилиндрической системе координат в 2.5 мерной поста-

новке:

$$R(\vec{r}_g, \vec{r}_{\alpha_i}) = R(r_g, z_g, r_{\alpha_i}, z_{\alpha_i}) = R_r(r_g, r_{\alpha_i}) \cdot R_z(z_g, z_{\alpha_i}). \quad (31)$$

Используя выражения (29, 31) и равенство $|\omega_g| = \pi((r_g + h_r)^2 - (r_g - h_r)^2)h_z$ выпишем интерполяции частицы-сетка и сетка-частицы (16, 21) в цилиндрических координатах:

$$\rho_{\omega_g}(t) = \frac{\sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i N_{\alpha_i} \cdot R_r(r_g, r_{\alpha_i}) \cdot R_z(z_g, z_{\alpha_i})}{\pi((r_g + h_r)^2 - (r_g - h_r)^2)h_z}, \quad (32)$$

$$E_{\alpha_i}(t) = \sum_g E(\vec{r}_g, t) \cdot (\pi((r_g + h_r)^2 - (r_g - h_r)^2)h_z) \cdot R_r(r_g, r_{\alpha_i}) \cdot R_z(z_g, z_{\alpha_i}). \quad (33)$$

4.5.2. Решение граничной задачи для уравнения Пуассона

Для вычисления электрического поля в квазистатическом приближении и осесимметричной постановке на узлах сетки в Эйлеровых координатах численно решается двумерная граничная задача для уравнения Пуассона. Рассматривается вычислительная область (22) и уравнение Пуассона в цилиндрических координатах (23) с граничными условиями (24).

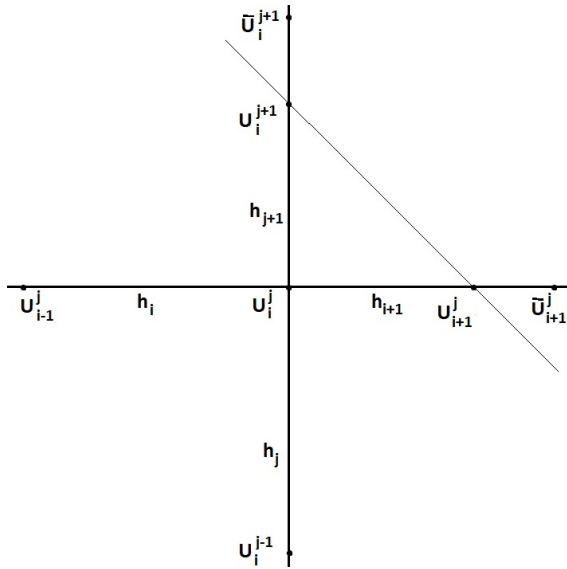


Рис. 5: Метод отсечения границ

Для получения решения используется метод конечных разностей на пятиточечном шаблоне «крест», обеспечивающий второй порядок аппроксимации по обеим из координат. Для более точной аппроксимации граничных условий эйлерова сетка строится таким образом, что ее ячейки полностью покрывают расчетную область, а для приграничных узлов шаблон разностной схемы модифицируется с учетом реального

расстояния от узла до границы. После дискретизации задачи по указан-

ному шаблону задача сводится к поиску решения системы алгебраических линейных уравнений (СЛАУ). Конечно-разностное уравнение для любого внутреннего узла принимает вид:

$$\frac{U_{i+1}^j - U_i^j}{r \cdot h} + \frac{U_{i-1}^j + U_{i+1}^j - 2U_i^j}{h^2} + \frac{U_i^{j+1} + U_i^{j-1} - 2U_i^j}{h^2} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (34)$$

где i -ый нижний индекс означает шаг по координате r , а j -ый верхний — по z , пусть i, j меняются соответственно от 0 до N_{grid_r} и от 0 до N_{grid_z} . Модификация сетки на приграничных узлах происходит следующим образом: при попадании границы внутрь ячейки вычислительной сетки применяется метод отсечения границ, суть которого заключается в том, что используется расстояние от узла сетки до границы вместо расстояния до следующего узла (шага по сетке). При достаточно малых размерах шагов $h_{i+1}, h_i, h_j, h_{j+1}$ (i, j индексы используются в том же смысле, как и в (34), и далее в этом параграфе используются в этом же смысле) имеет место рост погрешности при численном нахождении потенциала (это происходит из-за снижения обусловленности матрицы системы), а в силу экспоненциальной зависимости плотности тока от электрического поля (43), необходимо обеспечивать надежную аппроксимацию напряженности электрического поля на границе. В таком случае применяется экстраполяция потенциала за границу вычислительной области, используя линейные соотношения:

$$\begin{aligned} \bar{U}_{i+1}^j &= U_i^j + \frac{h}{h_{i+1}} \cdot (U_{i+1}^j - U_i^j), \\ \bar{U}_i^{j+1} &= U_i^j + \frac{h}{h_{j+1}} \cdot (U_i^{j+1} - U_i^j), \end{aligned} \quad (35)$$

где h — полный шаг по сетке без отсечения в соответствующем направлении. Впоследствии напряженность также вычисляется в узлах, находящихся за границей и граничная напряженность находится с помощью аналогичных линейных соотношений. Применение описанных модификаций

позволяет существенно повысить точность решения задачи [4].

В результате применения метода отсечения границ (Рис. 5) и согласно лемме о конечно-разностной аппроксимации высокого порядка точности дифференциального оператора на неравномерной сетке [14], конечно-разностное уравнение для произвольного узла сетки принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{U_{i+1}^j - U_i^j}{r \cdot h_{i+1}} + \frac{2U_{i+1}^j}{h_{i+1} \cdot (h_{i+1} + h_i)} + \frac{2U_{i-1}^j}{h_i \cdot (h_{i+1} + h_i)} - \frac{2U_i^j}{h_{i+1} \cdot h_i} + \\ + \frac{2U_i^{j+1}}{h_{j+1} \cdot (h_{j+1} + h_j)} + \frac{2U_i^{j-1}}{h_j \cdot (h_{j+1} + h_j)} - \frac{2U_i^j}{h_{j+1} \cdot h_j} = \frac{\rho}{\epsilon_0}. \end{aligned} \quad (36)$$

Решение системы, составленной из уравнений (36) предлагается находить с помощью итерационных методов. Использование итерационного метода объясняется тем, что при построении сеточных систем для эллиптических уравнений в частных производных (а уравнение Пуассона является эллиптическим) со сложной криволинейной формой границы, при построении прямых алгоритмов исключения с минимальным заполнением (что делается для уменьшения числа арифметических операций и экономии оперативной памяти машины) порождаются проблемы с учетом структуры матрицы коэффициентов СЛАУ, в то время как для итерационных методов структура матрицы не оказывает подобного влияния на сложность реализации метода. Также при достаточно больших размерностях сеточных систем итерационные методы имеют преимущество в меньшем объеме вычислений и используемой памяти по сравнению с прямыми методами решения СЛАУ. В силу специфики решаемой задачи (необходима высокая точность аппроксимации из-за экспоненциальной зависимости (43), вследствие чего шаг сетки очень мал по обеим координатам) данный факт однозначно определяет метод решения сеточной СЛАУ [15].

В силу затруднительной или неудовлетворительной оценки сходимости методов простых итераций Якоби и его модификации (Зейделя) в общем

случае для сеточных систем (данная проблема возникает ввиду того, что норма матрицы системы в нормальном виде в смысле методов простых итераций либо больше единицы, либо ее оценка очень трудоемка [15]), используется метод последовательной верхней релаксации (ПВР). Схема метода ПВР имеет следующий вид:

$$x_s^{(k+1)} = (1 - \omega)x_s^k + \frac{\omega}{a_{ss}} \left(b_s - \sum_{l < s} a_{sl}x_l^{(k+1)} - \sum_{l > s} a_{sl}x_l^k \right), \quad (37)$$

где $\omega \in (1, 2)$ — коэффициент релаксации, a_{sl} — элемент матрицы системы, b_s — компонента вектора из соответствующего линейного пространства, k — номер итераций. Для простейших случаев ω обратно пропорционален корню квадратному из нормы матрицы системы. Сходимость метода доказана для любого ω из указанного выше промежутка, но скорость сходимости варьируется. Для данной задачи и ряда других оптимальный коэффициент релаксации подбирается [15].

4.5.3. Вычисление напряженности поля

После вычисления напряженности электрического поля в узлах сетки, построенной в Эйлеровых координатах, возникает задача интерполяции напряженности в узлы сетки Лагранжевых координат для расчета сил, действующих на частицы. Используется метод интерполяции по четырем ближайшим точкам. Существует два способа провести эту процедуру: первый заключается в том, что сначала проводится интерполяция значений потенциала, а после, используя связь потенциала с напряженностью, вычисляется напряженность; второй — сначала вычислить значения напряженности, после чего интерполировать их. Первый способ считается более устойчивым [11].

Для нахождения напряженности из связи напряженности электрического поля и потенциала в дифференциальной форме (23) используется

конечно-разностная схема второго порядка, уравнения которой были выведены Тейлором [16]:

$$\begin{aligned}
 E_{i-1}^j &= \frac{1}{h_i + h_{i+1}} \left(-3U_{i-1}^j + 4U_i^j - U_{i+1}^j \right), \\
 E_i^j &= \frac{1}{h_i + h_{i+1}} \left(-U_{i-1}^j + U_{i+1}^j \right), \\
 E_{i+1}^j &= \frac{1}{h_i + h_{i+1}} \left(U_{i-1}^j - 4U_i^j + 3U_{i+1}^j \right),
 \end{aligned} \tag{38}$$

где $j = 0..N_{grid_z}$ — индекс пробегает по всем слоям сетки, E_i^j — сеточные значения напряженности, $h_i, h_{i+1}, h_j, h_{j+1}$ — шаги по сетке в соответствующих направлениях.

4.5.4. Интегрирование уравнений движения

Интегрирование траекторий движения макрочастиц является самым ресурсоемким этапом в методе частица-сетка, поскольку число макрочастиц может превышать 10^5 , при этом каждую траекторию необходимо рассчитывать отдельно от остальных. Среди явных методов интегрирования при решении задач моделирования динамики пучков и плазмы принято использовать схему Бориса [17, 18], которая с учетом отсутствия магнитной компоненты поля вырождается в метод с перешагиванием. Преимущества данного метода заключаются в том, что обеспечивается второй порядок точности при только одном вычислении правой части на каждом шаге, также метод обратим по времени, то есть ошибки аппроксимации законов сохранения полной энергии и момента импульса, возникающие при численном интегрировании данным методом, ограничены. Исходя из этого следует, что метод с перешагиванием устойчив при расчете длинных траекторий. Согласно методу с перешагиванием уравнения движения (27) в векторном

виде записываются:

$$\begin{cases} \frac{\vec{p}^{k+1/2} - \vec{p}^{k-1/2}}{\Delta\tau} = \frac{q_\alpha E^k}{m_0 c^2} \\ \frac{\vec{r}^{k+1} - \vec{r}^k}{\Delta\tau} = \frac{\vec{p}^{k+1/2}}{\gamma^{k+1/2}}, \end{cases} \quad (39)$$

где k — номер шага интегрирования, $\Delta\tau$ — шаг по времени, E^k — напряженность поля в \vec{r}_k узле. Более подробно (39) согласно [18] и осесимметричной постановке задачи имеет вид:

$$\begin{cases} r^{k+1} = r^k + \Delta\tau \frac{p_r^{k+1/2}}{\gamma^{k+1/2}}, & p_r^{k+1/2} = p_r^{k-1/2} + \Delta\tau \frac{q E_r^k}{m_0 c^2} + \frac{(p_\varphi^{k+1/2} + p_\varphi^{k-1/2})^2}{4(r^k)^3 \gamma^k}, \\ z^{k+1} = z^k + \Delta\tau \frac{p_z^{k+1/2}}{\gamma^{k+1/2}}, & p_z^{k+1/2} = p_z^{k-1/2} + \Delta\tau \frac{q E_z^k}{m_0 c^2}, \\ & p_\varphi^{k+1/2} = p_\varphi^{k-1/2}, \end{cases} \quad (40)$$

Шаг по переменной интегрирования выбирается из условия устойчивости Куранта–Фридрихса–Леви с помощью тестовой процедуры, в рамках которой рассчитываются траектории макрочастиц, вылетающих в начальный момент времени без учета их взаимодействия. Вне зависимости от системы координат на каждом шаге интегрирования k для каждого потока и для каждой макрочастицы выбирается свой шаг $\Delta\tau_i^k$ интегрирования. Физический смысл критерия Куранта–Фридрихса–Леви заключается в том, что частица за один шаг по времени не должна продвинуться больше, чем на одну пространственную ячейку [19].

$$\Delta\tau_i^k = \min_{s=1\dots N} (h_{s_i}^k / K \beta_{s_i}^k), \quad (41)$$

где s — номер компоненты вектора скорости, i — номер частица потока, h_{s_i} — шаг по сетке, построенной в Эйлеровых координатах, в направлении координаты s , β_{s_i} — s компонента вектора скорости, $K > 1$ — задаваемое

мый коэффициент. Шаг основной процедуры интегрирования уравнений движения выбирается следующим образом [4]:

$$\Delta\tau = \min_i \min_k (\Delta\tau_i^k). \quad (42)$$

Таким образом, происходит выбор постоянного шага интегрирования по времени. Существуют также и возможности снижения объема вычислений, используя переменный шаг. Однако, область применения такого способа ограничивается задачами с сильно сгущающейся сеткой в небольшой области, характеризующейся особенностью геометрии, которую необходимо учитывать при расчетах. В остальных же случаях выбор переменного шага интегрирования снижает устойчивость метода с перешагиванием [20].

4.5.5. Вычисление плотности тока

Плотность тока автоэлектронной эмиссии описывается по модели Фаулера–Нордгейма. Также принимается во внимание локальное усиление электрического поля в силу геометрической негладкости поверхности эмиссии. Данный эффект связан с тем, что при изготовлении реальных наноразмерных эмиттеров идеального соответствия геометрической форме добиться не удается, в частности, лезвие эмиттера, достигающее порой десятых долей нанометра, представляет из себя на деле некоторую кривую сложной формы. Как известно, участки резкой смены кривизны поверхности влекут к появлению областей экстремальных полей. Таким образом, выражение для плотности тока принимает вид [2]:

$$j(E) = \frac{A \cdot (\beta_e \cdot E(s))^2}{t^2(y) \cdot \Phi} \exp\left(\frac{-B\Phi^{3/2}}{\beta_e \cdot E(s)} \cdot \nu(y)\right), \quad (43)$$

где $j(E)$ — плотность тока при модуле вектора напряженности E (в единицах $\text{А}/\text{м}^2$, если E измеряется в $\text{В}/\text{м}$), Φ — работа выхода материала эмит-

тера (эВ), β_e — эффективный коэффициент усиления поля, $E(s)$ — модуль вектора напряженности в точке s , $A = 1,54141 \cdot 10^{-6}$, $B = 6,8309 \cdot 10^9$ — константы, переменная y :

$$y = \frac{\sqrt{e^3 \beta_e \cdot E}}{\Phi} = 0,3795 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{\sqrt{\beta_e \cdot E}}{\Phi}, \quad (44)$$

$\nu(y), t(y)$ — аппроксимации эллиптических функций Нордгейма, найденные Форбсом и Дином, точность которых превосходит классические аппроксимации Шпиндта [13, 21]:

$$\nu(y) = 1 - \frac{y^2}{3} \cdot (3 - \ln y), \quad (45)$$

$$t(y) = 1 + \frac{y^2}{9} \cdot (1 - \ln y). \quad (46)$$

Коэффициент локального усиления поля β вводится в уравнение Фаулера–Нордгейма для моделирования геометрических особенностей поверхности катода. Чаще всего β определяется, как:

$$\beta = \frac{E_n(s)}{E_0(s)}, \quad (47)$$

где $E_n(s)$ — величина нормальной составляющей локальной напряженности поля на наноструктурной поверхности в точке s , $E_0(s)$ — напряженность электрического поля без учета нанорельефа. Величина силы тока, эмиттированного нанорельефной поверхностью S при известной плотности тока j в области S и величина силы тока, эмиттированного гладкой в микромасштабе поверхностью S_0 , задаются соотношениями:

$$I = \int_S j(\beta(s)E_0(s))ds, \quad (48)$$

$$I = \int_{S_0} j(\beta_e E_0(s))ds, \quad (49)$$

где для упрощения вычисления эмиссионного тока используется эффективное значение коэффициента усиления поля β_e , при котором гладкая в микромасштабе поверхность соответствует нанорельефной поверхности.

Эффективный коэффициент усиления поля характеризуется тем, что при увеличении напряженности поля, он уменьшается. Это объясняется тем фактом, что площадь эмиссии занимает всё большую часть нанорельефной поверхности, в то время как площадь эмиссии на гладкой поверхности не изменяется [22].

Предлагается использовать аналитическое решение (43), полученное Фаулером и Нордгеймом для одномерной задачи. Для расчета плотности тока эмиссии в двумерном случае поверхность эмиссии разбивается на элементарные отрезки, плотность тока на которых полагается постоянной. Интегральный ток вдоль поверхности эмиссии полагается равным сумме интегральных токов с каждого элементарного отрезка.

4.6. Моделирование начальной скорости

Начальное распределение скоростей макрочастиц играет важную роль при рассмотрении всей картины эмиссии. Упрощенные модели, использующие нулевое начальное распределение или же распределение Максвелла, зачастую не соотносятся с реальными экспериментами [1]. Поэтому представляет интерес моделирование распределений, близким к реальным.

В данной работе при моделировании начального распределения скоростей частиц использованы экспериментальные энергетические спектры (Рис. 6).

После нормировки спектра, получим функцию плотности вероятности некоторой бимодальной случайной величины. Функция задана в численном виде, соответственно можно воспользоваться методом обратных функций для моделирования случайной величины на основе равномерных случай-

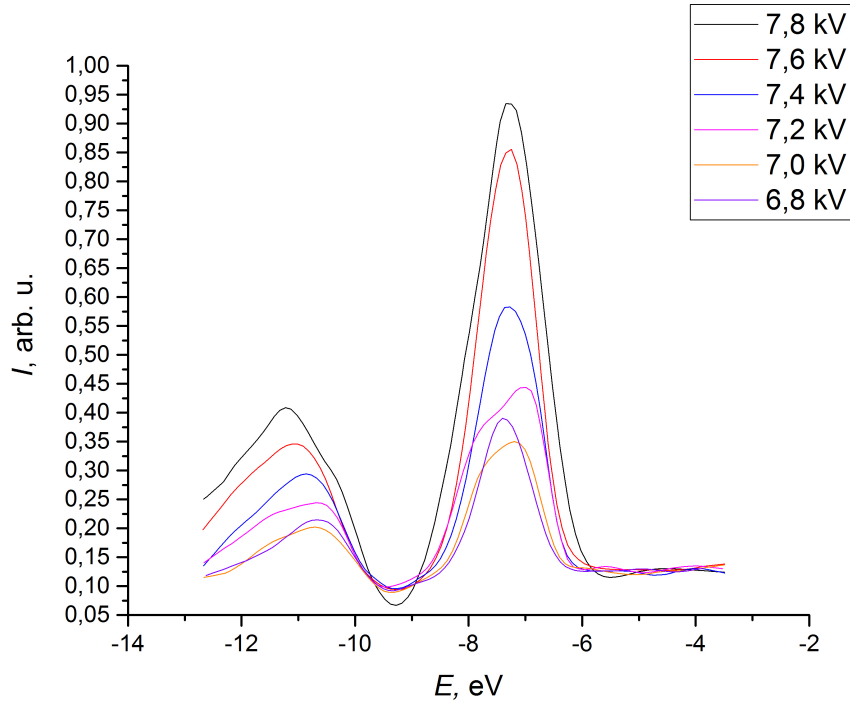


Рис. 6: Экспериментальные спектры распределения энергии электронов

ных чисел [23]. После чего, можно определить величину вектора скорости из уравнения кинетической энергии частицы.

В силу численной репрезентации функции распределения равномерные случайные числа рассмотрим на некотором вложенном отрезке $0 < a < b < 1$, $\gamma \sim R(a, b)$, а энергии на отрезке $c < KE < d$:

$$\gamma = \int_{-\infty}^{KE} f(x)dx = \int_c^{KE} f(x)dx \quad (50)$$

Пусть, $c = x_1 < x_2 < \dots < x_Q = d$, где Q — число точек в численном представлении распределения плотности вероятности. Тогда с помощью численного интегрирования по правилу трапеции [15], получим:

$$\gamma = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m (f(x_{k-1}) + f(x_k)) \cdot (x_k - x_{k-1}), \quad (51)$$

Разрешив (51) с некоторой точностью относительно m , положим $KE = x_m$.

Таким образом, получен алгоритм моделирования бимодальной случай-

ной величины, заданной численным представлением функции распределения плотности вероятности.

5. Программная реализация и численный эксперимент

5.1. Вычислительный пакет DAISI

В качестве реализации описанной модели и вычислительных техник предлагается использовать вычислительный пакет DAISI [5], разработанный для численного моделирования электронных и ионных источников методом частицы в ячейке в Санкт-Петербургском государственном университете [4]. В данном пакете реализована симуляция работы устройств в режиме термоэмиссии по модели Чайлда–Ленгмюра методом частиц в ячейках. Вычислительный процесс на каждом временном шаге организован так, как изображено на иллюстрации (Рис. 7).

Поле в программе задается с магнитной компонентой, но также есть возможность указать отсутствие магнитной компоненты. В первом случае, для вычисления траекторий частиц используется схема Бориса [17, 4], в случае отсутствия магнитной компоненты организация вычислений проводится согласно схеме с перешагиванием (39). Решение уравнений поля в двумерном случае происходит аналогично описанному методу (36). Осесимметричная постановка задачи также доступна как один из вариантов задания геометрической конфигурации в DAISI, в силу чего постановка задачи возможна и апробирована авторами пакета [4].

Настоящая версия пакета не предусматривает возможностей проведения симуляции устройства в режиме полевой эмиссии по модели Фаулера–Нордгейма. Программная реализация метода частиц в ячейке представлена на фрагменте UML-диаграммы классов, связанной непосредственно с вычислительным процессом метода частиц в ячейке, (Рис. 8). Каждому из этапов метода соответствует C++ класс: Лагранжеву — `ParticlesMover`,

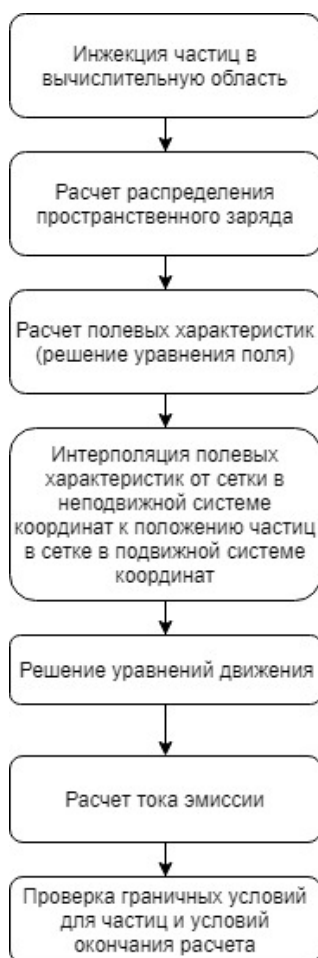


Рис. 7: На каждом временном шаге вычислительный цикл DAISI строится из указанных процедур

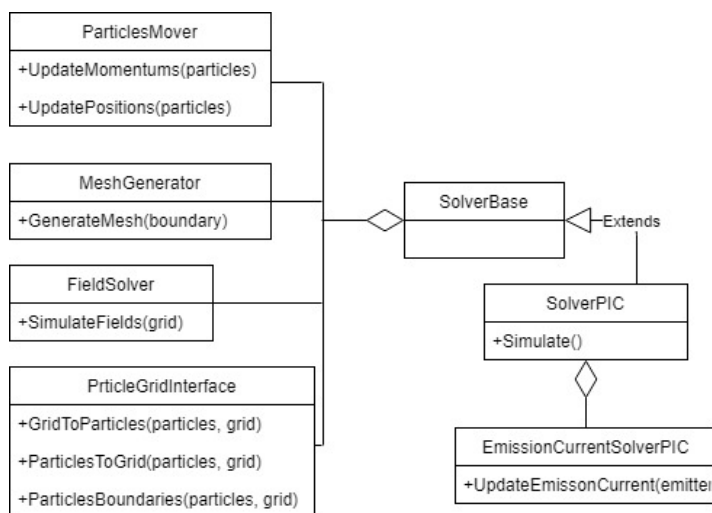


Рис. 8: Фрагмент UML-диаграммы классов DAISI, связанных с реализацией вычислений по методу частиц в ячейке

в рамках которого происходит интегрирование уравнений движения (39), Эйлеру — FieldSolver, в рамках которого происходит численное решение уравнений поля (36). ParticleGridInterface отвечает за вспомогательные про-

цедуры этапов, как вычислительные, так и методические. MeshGenerator генерирует пространственную сетку по заданным входным параметрам сетки.

Вычисление плотности эмиссионного тока реализовано с помощью класса EmissionCurrentSolverPIC методом UpdateEmissionCurrent(emitter), который принимает на вход характеристики работы устройства, вычисленные на предыдущих этапах. В зависимости от типа выбранной модели эмиссии в интерфейсе программы происходит подбор соответствующего метода класса, которым осуществляются вычисления в рамках заданной модели.

5.2. Реализация модели автоэмиссии

В ходе работы реализован метод класса EmissionCurrentSolverPIC, который соответствует модели полевой эмиссии Фаулера – Нордгейма. В силу того, что реализации всех этапов метода частиц в ячейке изолированы друг от друга на программном уровне (Рис. 8), а результаты работы программы были не раз представлены авторами [4] внесение изменений в один из классов, реализующий один из этапов, никак не сказывается на работоспособности других классов, реализующих другие этапы вычислительного цикла.

Организация вычислений плотности тока представляется в виде блок-схемы (Рис. 9).

В первом блоке происходит запуск цикла с перебором точек вдоль поверхности эмиттера, точек вылета частиц. Число таких точек эмиссии зависит от размерности Эйлеровой сетки, положим его равным N . При построении сетки происходит разбиение криволинейного эмиттера на элементарные отрезки, в которых выбирается срединная точка. Плотность тока на элементарном отрезке полагается постоянной и равной плотности тока в центре отрезка (43).



Рис. 9: Блок-схема вычисления плотности эмиссионного тока по модели Фаулера – Нордгейма на одном временном шаге

Следующим блоком по телу цикла является интерполяция напряженности центре элементарного отрезка. После этого требуется оценить: является ли поле ускоряющим. Эта оценка проводится согласно следующему принципу: если заряд эмиттируемой частицы (в данной работе рассматривается эмиссия электронов) и скалярное произведение нормали на вектор напряженности одного знака, то поле не является ускоряющим. При умножении вектора напряженности на нормаль определяется, направлен ли вектор к катоду или от него. Этому будет соответствовать скалярное произведение большее нуля и меньшее нуля соответственно.

После чего следует блок с условным оператором: если поле является ускоряющим, то частицы эмиттируются и соответственно плотность эмиссионного тока ненулевая и определяется согласно (43), в обратном же случае плотность тока полагается нулевой, так как эмиссии частиц как таковой не будет. После чего начинается следующая итерация цикла первого блока.

После применения описанной процедуры ко всем заданным точкам эмиссии, расчет плотности эмиссионного тока считается законченным, и вычислительная процедура переходит к следующему этапу, реализованному в DAISI, согласно схеме (Рис. 7).

5.3. Моделирование начальной скорости

Результаты моделирования бимодального распределения начальных энергий частиц представлены в виде гистограммы (Рис. 10).

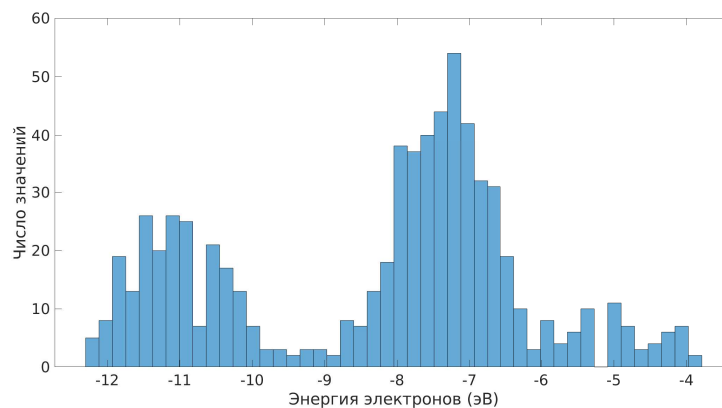


Рис. 10: Распределение начальных энергий электронов согласно (51)

С помощью описанного правила моделируется величина вектора скорости, однако, как видно из системы (40), для задания начальных скоростей (импульсов) частиц, требуется задание покомпонентного вектора скорости.

Положим направление вектора скорости, совпадающим, с единичным вектором нормали в точке вылета частицы, упомянутой в алгоритме вычисления плотности тока (9). Соответствующее распределение начальных

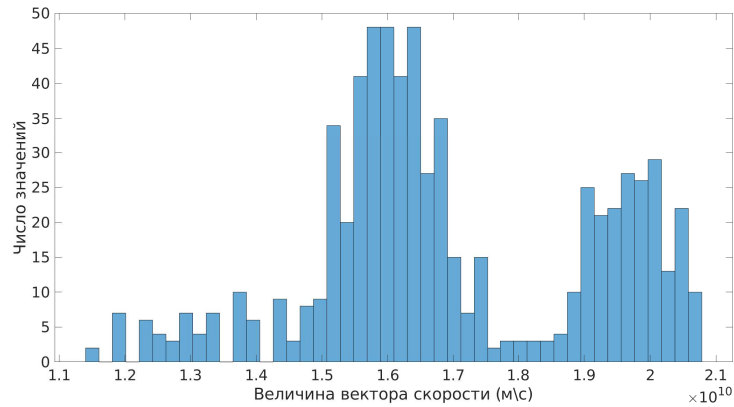


Рис. 11: Распределение величины вектора скорости, соответствующее распределению энергии (Рис. 10)

скоростей, полученное из уравнения кинетической энергии, также представлено в виде гистограммы (Рис. 11).

Таким образом, пакет DAISI модифицирован описанной процедурой, моделирующей начальную скорость согласно гистограмме (Рис. 11) на основе моделирования начальных энергий частиц как бимодальной случайной величины (Рис. 10). Выбор равномерно распределенного случайного числа γ (51) осуществляется с помощью библиотеки `random`, являющейся частью стандартной библиотеки C++, начиная с 11 стандарта языка.

5.4. Консольный клиент для библиотеки вычислителя

Для вычисления вольт-амперных характеристик триода, в частности для вычисления зависимости анодного тока от затворного напряжения при различных фиксированных анодных напряжениях, необходимо выполнить целую серию расчётов. Настоящий графический клиент DAISI не предусматривает функционала по запуску серийных расчётов в автоматическом режиме. Поэтому в качестве модификации пакета рассматривается дополнение возможности запуска серии экспериментов.

Для этого вместо графического клиента для библиотеки вычислителя в ходе данной работы написан консольный клиент на языке C++, осуществляющий приём входных файлов в виде сконфигурированного DAISI

проекта (конфигурацию можно осуществить с помощью графического клиента), а также специального файла, описывающего серию вычислительных экспериментов в формате json. Данный файл имеет следующую структуру:

```
{
    "type": <string>,
    "emission_type": <string>,
    "potentials": {
        "emitter": [<float>],
        "anode": [<float>],
        "gateway": [<float>]
    },
    "project_path": <string>,
    "timeout_ns": <float>,
    "num_cores": <integer>
}
```

Поле `type` задаёт тип устройства — триодная или диодная конфигурация. С помощью поля `emission_type` осуществляется выбор модели эмиссии в пакете DAISI. Для задания граничных условий первого рода на электродах используется поле `potentials`. Задание граничных условий второго и третьего рода осуществляется в графическом клиенте. В серийных экспериментах в данной работе подразумевается задание нулевых условий второго порядка, что эквивалентно осесимметричной постановке задачи. Однако, в планах по развитию данной работы есть перенос всего устройства в конфигурационный json файл.

Абсолютный Unix путь к DAISI проекту указывается в `project_path`. При отсутствии долгой сходимости по току, задаётся таймаут в наносекундах для PIC цикла, как критерий остановки вычислений, в поле `timeout_ns`.

Суть входного файла заключается в том, что он позволяет описать на-

чальные потенциалы на электродах, и будет запланирована серия экспериментов, учитывающая все комбинации начальных условий. То есть, если, для триодной конфигурации задано N_1 различных значений потенциалов для эмиттера, N_2, N_3 — для анода и затвора соответственно, то общее число вычислительных задач будет равно $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$, каждая из которых является независимой подпрограммой. Один вычислительный эксперимент из числа $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ будем называть далее вычислительная задача. Результаты каждой из вычислительных задач сохраняются в файловую систему в `csv` формате.

Число параллельно выполняющихся вычислительных задач задаётся параметром `num_cores`. В пакете DAISI реализованы многопоточные вычисления с помощью разделения эмиссионной поверхности на области, каждая из которых обрабатывается отдельным потоком. Таким образом, используется комбинированный подход крупнозернистого и мелкозернистого параллелизма.

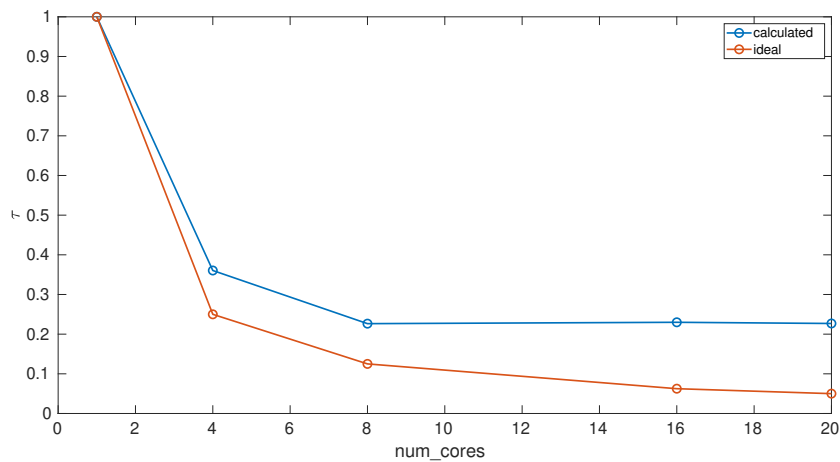


Рис. 12: Зависимость времени вычисления τ от параметра `num_cores` для диодной конфигурации с 7-ю вычислительными задачами.

Для параллельного исполнения вычислительных задач применяется программное средство для построения параллельных вычислений `spp-taskflow`. Выбор обоснован тем, что исходный код распространяется в открытом виде, а также в ряде публикаций описаны его преимущества по сравне-

нию с аналогичными технологиями, но на основе классических подходов: openMP, pthread, std::thread [24].

Для визуализации выходных файлов написаны Matlab скрипты, принимающие в качестве входного параметра папку с результатами серии экспериментов.

Для оценки времени вычисления серии экспериментов в зависимости от параметра `num_cores` проведены измерения времени для диодной и триодной конфигурации. Серия экспериментов для диодной конфигурации содержит 7 вычислительных задач, для триодной — 76. Время полагается в относительных величинах, за единицу принято $\tau = 1$ — время выполнения всех вычислительных задач последовательно. Эксперименты со сравнением времени работы проводились на 40 ядерном процессоре Intel(R) Xeon(R) Silver 4114 CPU @ 2.20GHz. Разделение эмиссионной поверхности на равные области фиксированно и равно 20-ти. Каждая из этих областей поверхности обрабатывается разными программными потоками в параллельном режиме.

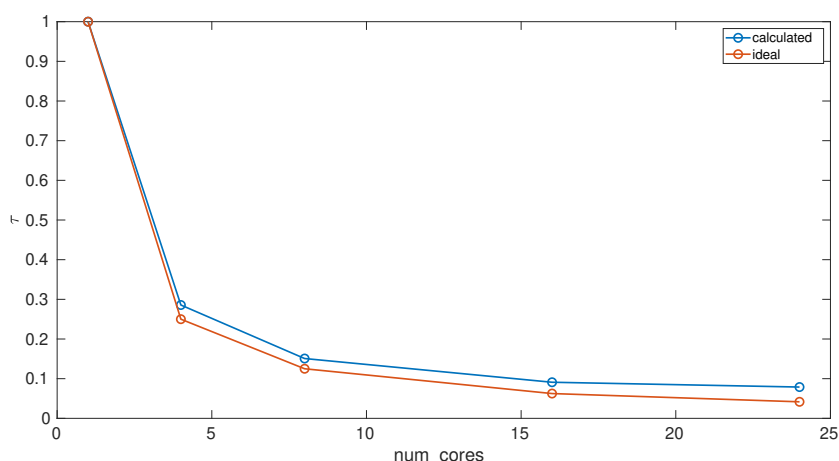


Рис. 13: Зависимость времени вычисления τ от параметра `num_cores` для триодной конфигурации с 76-ю вычислительными задачами.

Результаты для диодной конфигурации представлены на Рис. 12. На графике изображена вычисленная кривая снижения времени вычисления и кривая, соответствующая идеальному масштабированию. Результаты для

триодной конфигурации представлены на Рис. 13. Наблюдается снижение времени расчёта всей серии экспериментов более чем в 12 раз при задании параметра `num_cores` равным 24 для триодной конфигурации и в 4 раза для диодной конфигурации при значении параметра равным 8. Для диодной конфигурации это связано с тем, что число ядер стало больше числа вычислительных задач, поэтому никакой существенной роли увеличение параметра `num_cores` сверх числа вычислительных задач не играет. То есть логичным выбором параметра `num_cores` является число $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$. Однако, прирост эффективности замедляется с увеличением числа ядер и для триодной конфигурации, где число вычислительных задач больше чем параметр `num_cores`. Это связано с тем, что часть ресурсов центрального процессора требуется для утилизации мелкозернистого параллелизма, заложенного авторами DAISI в данный пакет. А также с тем, что идеальная масштабируемость в реальных вычислительных системах недостижима.

Таким образом, написанный консольный клиент позволяет, во-первых, автоматизировать расчёт серии экспериментов, используя пакет DAISI, при этом применён подход крупнозернистого параллелизма для ускорения расчётов, во-вторых, за счёт исключения графического клиента, нагрузка на ЦПУ и объёмы ОЗУ, потребляемые для расчёта одной и той же вычислительной задачи, снизились в 1,25 и 2,75, соответственно, раз.

5.5. Построение вычислительной сетки

Дискретизация непрерывных задач (23)–(27) согласно численным методам (36), (40) производится на структурированной прямоугольной сетке с неравномерным пространственным шагом и постоянным временным шагом (42).

Как правило эмиссионные процессы требуют высокой точности вычисления в области, где происходит непосредственно эмиссия. Это связано с

тем, что в данных областях вычисляется плотность тока, экспоненциально зависящая от напряженности поля (43), то есть погрешности вычисления напряженности экспоненциально распространяются на вычисленную плотность тока. В этих областях требуется обеспечение максимально возможного точного вычисления (38), а следовательно и (36).

Еще одной особенностью является то, что для снижения погрешности интегрирования траекторий частиц частям вычислительной области, в которых движутся макрочастицы, должны соответствовать области достаточно мелкого разбиения на сетку, достаточно в смысле для обеспечения устойчивости схемы (40).

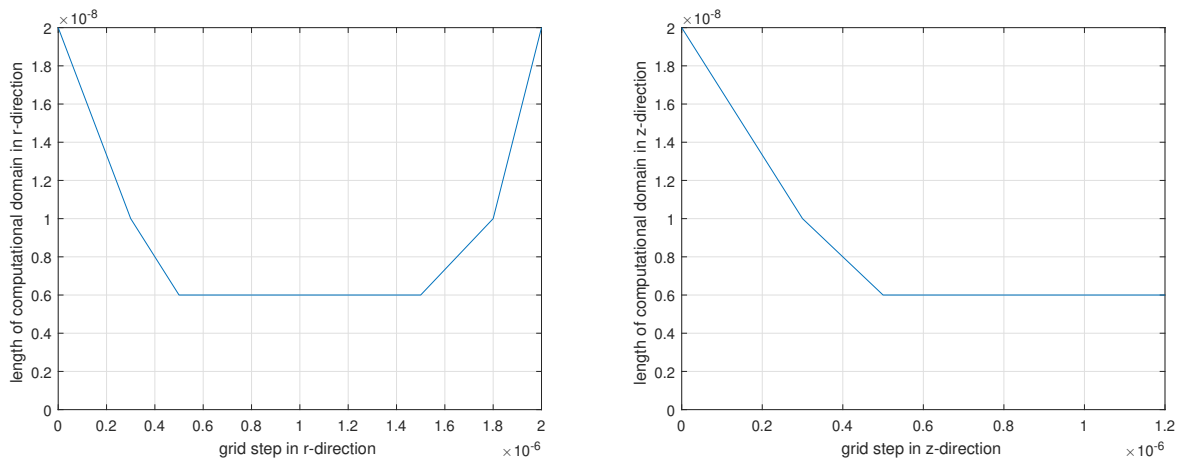


Рис. 14: Шаги по пространственной сетке (м) по координатам r (слева) и z (справа) в зависимости от длины вычислительной области (полагая ее прямоугольником) по соответствующей координате

Вычислительная сетка, построенная следующим образом (Рис. 14) удовлетворяет описанным выше особенностям. Области наименьшего шага на обоих графиках соответствуют поверхности эмиттера и затвора (области с геометрическими особенностями), областям требующим повышенной точности решения. На областях, куда в ходе симуляции работы устройства не попадают частицы, размеры ячеек сетки крупнее, так как это снижает объем вычислений, при этом не влияя на точность решения. На рис. 14 наименьший шаг по обеим из координат $h_{min} = 0,6 \cdot 10^{-8}$ м.

Проведено исследование изменения величины эмиссионного тока в за-

висимости от размера шага в области с геометрическими особенностями. Начиная с $h_{min} = 0,6 \cdot 10^{-8}$ с шагом $0,1 \cdot 10^{-8}$ построены аналогичные сетки с меньшим h_{min} . Результаты проиллюстрирует табл. 5.

Таблица 5: Изменения величины эмиссионного тока в зависимости от размера шага в области с геометрическими особенностями

Шаг(м)	Изменение величины тока эмиссии(А)
$0,5 \cdot 10^{-8}$	$7,09 \cdot 10^{-9}$
$0,4 \cdot 10^{-8}$	$3,035 \cdot 10^{-8}$
$0,3 \cdot 10^{-8}$	$6,53 \cdot 10^{-8}$
$0,2 \cdot 10^{-8}$	$6 \cdot 10^{-10}$
$0,1 \cdot 10^{-8}$	$7,34 \cdot 10^{-11}$

При дальнейшем измельчении сетки вычисление становятся слишком затруднительными. Однако, этих результатов достаточно, чтобы заметить, что имеет место сходимость по эмиссионному току при измельчении сетки.

5.6. Оценка эффективного коэффициента усиления поля

С помощью пакета DAISI и Matlab был осуществлен подбор такого вида функции напряженности в точке на поверхности эмиттера, чтобы она удовлетворяла следующим условиям:

- 1) С ростом напряженности коэффициент должен уменьшаться [22].
- 2) Относительная погрешность рассчитанного тока ячейки матричного диода не должна превышать 20% от экспериментальных значений.

Аппроксимация эффективного коэффициента усиления поля как функции от напряженности поля осуществлена с помощью ручного подбора вида функции на основе серии вычислительных экспериментов. При выборе формы функции необходимо учитывать, что функция монотонно убывает,

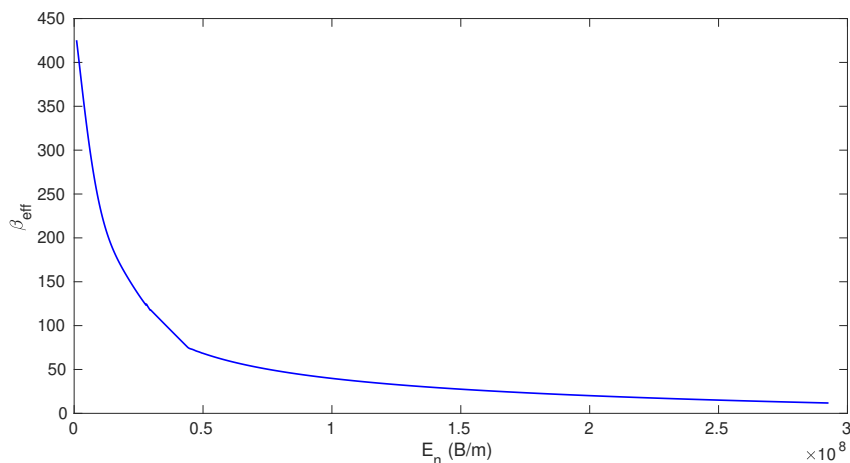


Рис. 15: Аппроксимация эффективного коэффициента усиления поля как функции от напряженности поля

имеет горизонтальную асимптоту $y = 1$ (т.к. коэффициент локального усиления поля не должен уменьшать поле).

Коэффициент усиления поля задаётся в виде таблицы. В данной работе, он рассчитан для полей в диапазоне $9 \cdot 10^5 \dots 3 \cdot 10^8$ В/м. Коэффициент рассчитан в соответствующих полях, т.к. этот отрезок покрывает поля из всех вычислительных экспериментов, проведённых в этой работе, и диодной конфигурации и триодной. Кроме того, для более общезначимого результата необходимо больше экспериментальных данных.

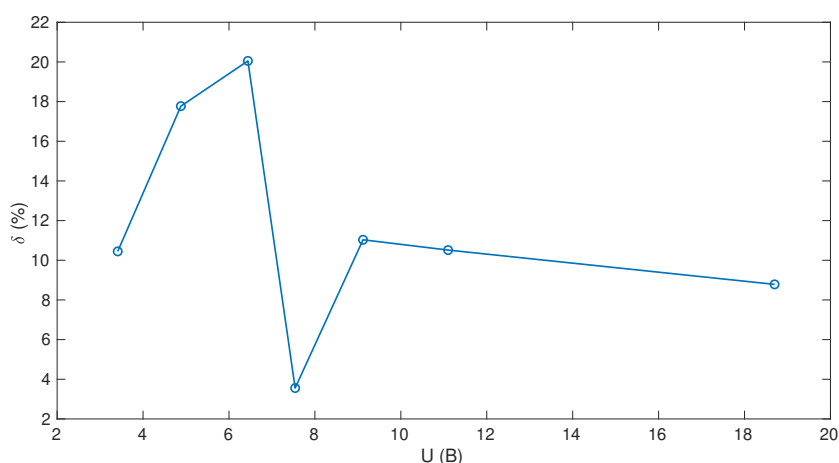


Рис. 16: Относительная погрешность (%) вычисленного тока в сравнении с экспериментальным

Графический вид функции представлен на Рис. 15. Относительная погрешность вычисленного тока в сравнении с экспериментальным (4), вы-

раженная в процентах, представлена на Рис.16.

6. Результаты вычислений

В данной главе представлены результаты вычислений характеристик нанотриода и таких свойств ячейки, как потенциал в межэлектродном пространстве, напряженность электрического поля с учетом распределения заряда автоэлектронов в межэлектродном пространстве, плотность заряда и общий эмиссии, вольт-амперные характеристики. Потенциал в межэлектродном пространстве (Рис. 17) иллюстрирует граничные условия первого рода для уравнения Пуассона (24).

Напряженность электрического поля (Рис. 18) достигает максимальных значений на вершине катода, что в целом соответствует электрофизике протекающего процесса, так как области экстремальных полей соответствуют границам с наибольшей кривизной. Плотность тока (Рис. 19) также максимальна в области экстремальных полей в соответствии с использованной моделью расчета плотности тока [2].

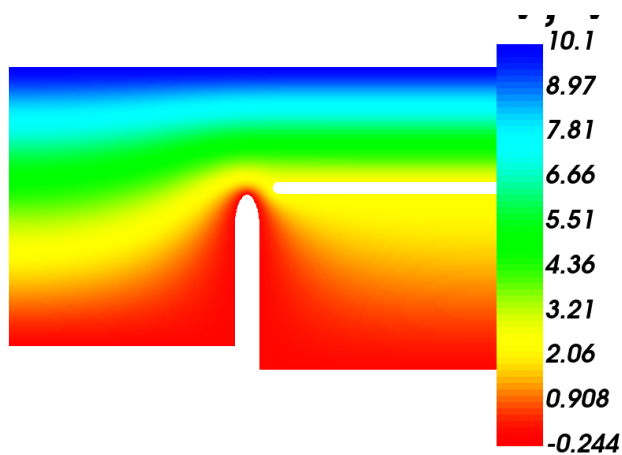


Рис. 17: Потенциал в межэлектродной области (В)

В ходе исследования зависимости анодного тока от затворного напряжения при постоянном анодном напряжении установлено, что при повышении затворного напряжения анодный ток растет нелинейно и скорость роста постепенно снижается. Также интересным результатом является полученная разница (Рис. 20) между анодным (Рис. 21) и катодным (Рис. 22)

ТОКАМИ.

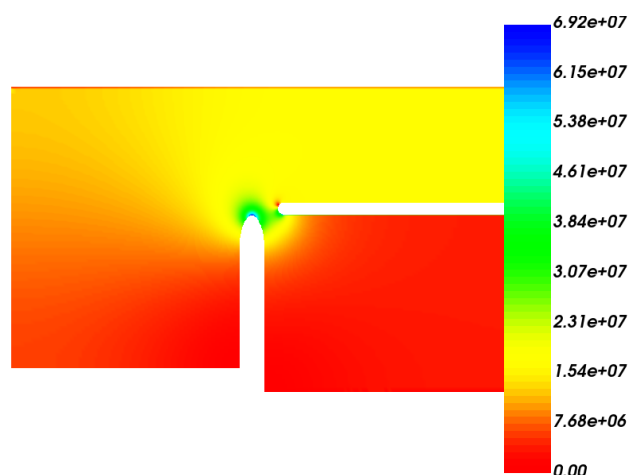


Рис. 18: Напряженность поля в межэлектродной области (В/м)

Данные результаты не могут быть получены, руководствуясь одномерной теорией Фаулера – Нордгейма, что объясняется тем, что классическая теория не учитывает возникновение пространственного заряда, оказывающего экранирующий эффект, то есть пространственный заряд начинает играть роль виртуального катода. В реальной триодной конфигурации возникает перераспределение напряженности и плотности заряда в силу влияния пространственного заряда. Вследствие этого полученные результаты отличаются от теоретического экспоненциального роста эмиссионного тока при увеличении величины напряженности. Это имеет большое зна-

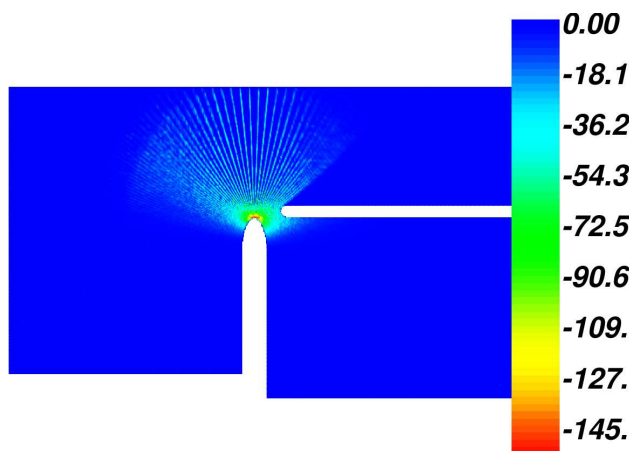


Рис. 19: Пространственный заряд в межэлектродной области (Кл/м³)

чение как в моделировании, так и в работе реальных устройств. Также

на расчетные характеристики существенное влияние оказывает отклонение эмиссионной поверхности от плоскости в силу формулировки теории Фаулера – Нордгейма.

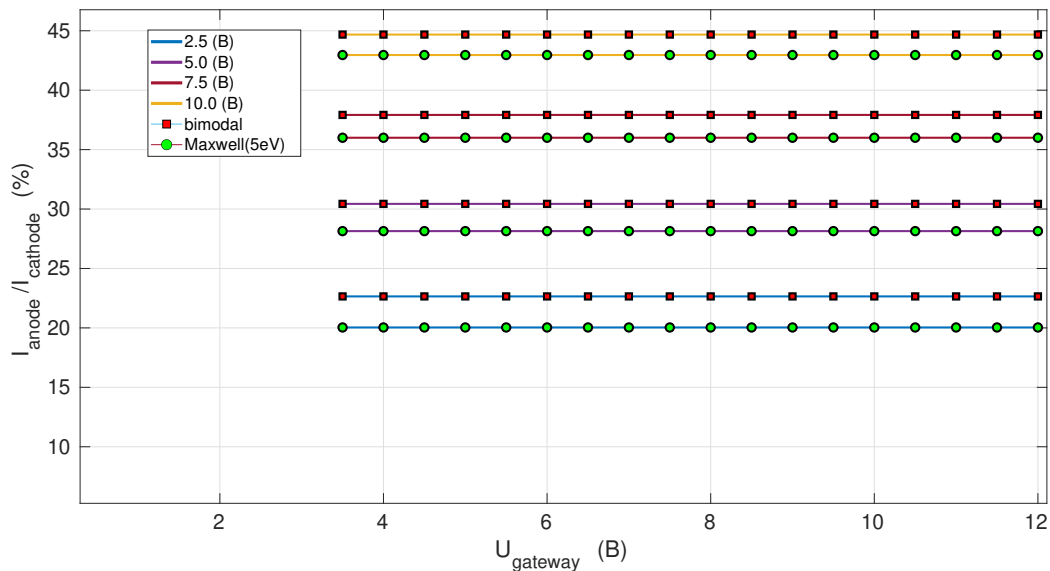


Рис. 20: Доля анодного тока от тока на катоде (%)

При появлении пространственного заряда происходит возникновение облака электронов в межэлектродной области по причине того, что в этой области нет положительно заряженных частиц. Это облако экранирует поверхность эмиттера. Пока облако растет, то увеличивается и соответственно величина эмиссионного тока, но эмиссионный ток со временем выходит на постоянный уровень, так как передача электронов от эмиттера к облаку и от облака к аноду достигает баланса [2].

Пространственный заряд оказывает существенное влияние на результирующую напряженность электрического поля на поверхности эмиттера, уменьшая ее. Чем больше напряженность поля, создаваемого конфигурацией электродов без учёта пространственного заряда, найденного из решения уравнения Пуассона при нулевой плотности эмиссионного тока, тем соответственно выше плотность эмиссионного тока [25], но в связи с этим также растет и влияние пространственного заряда и, следовательно, тем значительнее ощущается экранирование поверхности эмиттера при рас-

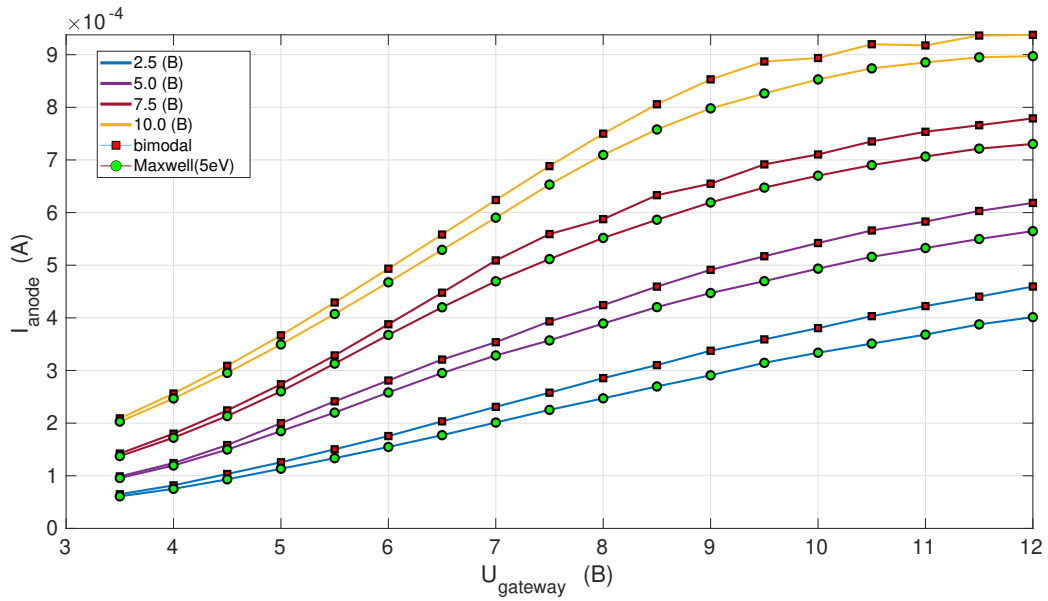


Рис. 21: Семейство кривых — зависимость анодного тока (А) от затворного напряжения (В)

смотрении вольт-амперных характеристик и тем больше отличие между результирующим электрическим полем на катоде и полем, порождённым конфигурацией электродов.

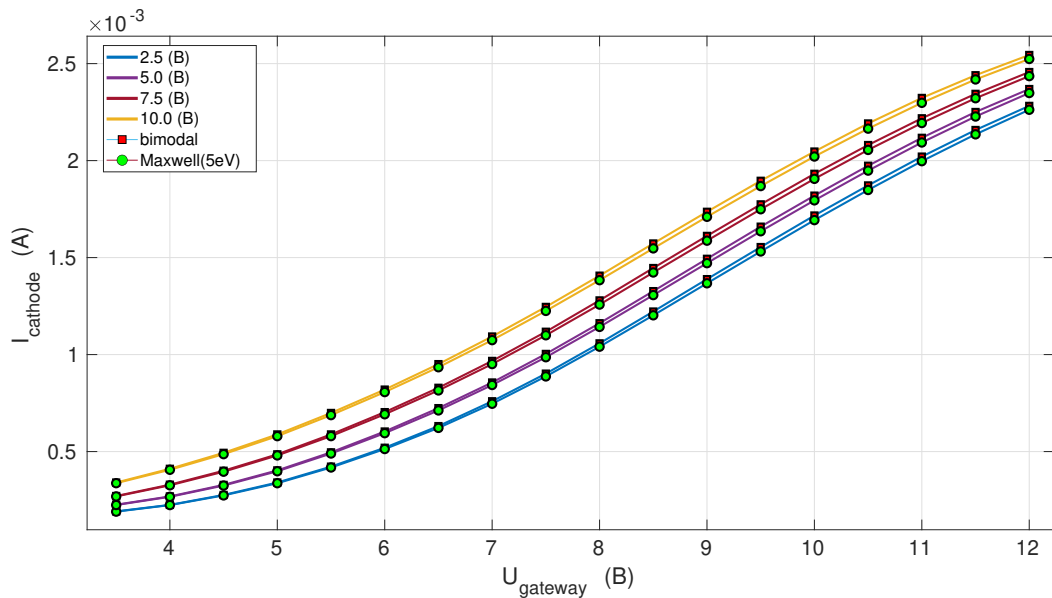


Рис. 22: Семейство кривых — зависимость катодного тока (А) от затворного напряжения (В)

Работа устройств полевой эмиссии в режиме ограничения пространственным зарядом в то же время является довольно перспективным направлением развития ВНЭ, так как помогает избежать некоторых суще-

ственных проблем данного подхода таких, как снижение влияния разрушения и деформации поверхности эмиттера в процессе работы на величину анодного тока и стабильность работы устройства, также использование пространственного заряда позволяет внести ту или иную степень контроля над эмиссионным процессом за счет того, что с помощью моделирования характеристик пространственного заряда можно регулировать величину анодного тока [2].

7. Заключение и Выводы

В данной работе описана математическая модель триодной ячейки массива автоэмиссионного катода, используя методы частицы в сетке и расщепления задачи на физические процессы. Модель включает в себя как формализацию, так и описание численных схем, необходимых для решения полученных задач.

Рассмотрен метод численного решения уравнений в частных производных эллиптического типа с помощью конечно-разностной аппроксимации высокого порядка точности на неравномерной сетке, также проанализированы методы решения полученной сеточной системы линейных алгебраических уравнений, в частности подробно изучен метод последовательной верхней релаксации, который является одним из наиболее эффективными при решении сеточных систем такого типа.

Рассмотрена схема численного интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений с перешагиванием. Схема устойчива на длинных траекториях, в силу того, что ошибки аппроксимации законов сохранения энергии и импульсов ограничены. Исходя из задачи интегрирования траекторий макрочастиц (39), данная схема подходит под специфику этой задачи, так как требуется рассчитывать относительно длинные траектории. Также в сравнении с другими схемами, метод с перешагиванием экономичен в вычислительном смысле, для обеспечения второго порядка точности по шагу необходимо только одно вычисление правой части системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

В вычислительный пакет DAISI добавлены следующие модификации:

- 1) Расчёт плотности тока согласно модели Фаулера–Нордгейма, а также последующая инжекция частиц в расчётную область на основе эффекта полевой эмиссии.

- 2) Возможность задания начального распределения скоростей частиц.
- 3) Пакет адаптирован для запуска серий вычислительных экспериментов в высокопроизводительной вычислительной системе с общей памятью.

В ходе модификации пакета DAISI изучены способы организации объектно-ориентированного PIC-кода на примере уже существующего и работающего вычислительного пакета, написанного на C++.

Проведены следующие вычислительные эксперименты, используя модифицированный пакет DAISI:

- 1) Осуществлён обоснованный выбор вычислительной сетки.
- 2) Смоделировано начальное распределение скоростей, на основе экспериментальных спектров начальных энергий частиц.
- 3) Подобран коэффициент эффективного усиления поля в виде функции напряженности на основе экспериментальных данных.
- 4) Вычислены зависимость анодного тока от затворного напряжения и такие свойства ячейки, как потенциал в межэлектродном пространстве, напряженность электрического поля с учетом распределения заряда автоэлектронов в межэлектродном пространстве, плотность заряда и общий ток эмиссии (Рис. 17, 18, 19, 20, 21, 22)

Работа выполнена с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ Вычислительный центр и Междисциплинарного ресурсного центра по направлению «Нанотехнологии» СПбГУ.

Список литературы

- [1] Фурсей Г.Н. Автоэлектронная эмиссия СПб.:Лань, 2012. 321 с.
- [2] Егоров Н. В., Шешин Е. П. Автоэлектронная эмиссия. Принципы и приборы. М.: Интеллект, 2011. 704 с.
- [3] Никифоров К. А., Егоров Н. В., Сайфуллин М. Ф. Математическое моделирование диодной системы с матричным автоэлектронным катодом // Журнал технической физики, 2015, Т. 85, С. 55–59.
- [4] Алцыбеев В. В. Моделирование и оптимизация динамики интенсивных пучков заряженных частиц: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18. СПб., 2016. 130 с.
- [5] Altsybeyev V. et al. Numerical simulation of a triode source of intense radial converging electron beam // Journal of Applied Physics, 2016. Vol. 120, No 14. P. 336–338.
- [6] Feng Y., Verboncoeur J. P. A model for effective field enhancement for Fowler-Nordheim field emission // Phys. Plasmas 2005 Vol. 12, 103301.
- [7] Fowler R.H., Dr. L. Nordheim Electron Emission in Intense Electric Fields // Proceedings of the Royal Society A., 1928, V. 119 (781), 173–181 с.
- [8] Власов А. А. Теория многих частиц // М. : Наука, 1950, 350 с.
- [9] Hockney R., Eastwood J. Computer Simulation Using Particles Francis, 1988. 540 p.
- [10] Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц в ячейках Новосибирск:СО РАН, 2004, 360 с.

- [11] Ponomarev, V., Altsybeyev, V. Development of 2D Poisson equation C++ finite-difference solver for particle-in-cell method // In "Stability and Control Processes" in Memory of V.I. Zubov (SCP), 2015, P. 195–197.
- [12] В. В. Алцыбеев Оптимизационный алгоритм расчета плотности тока эмиссии // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 10. Прикл. матем. Информ. Проц. упр., 2015, № 4, С. 56–71.
- [13] Kevin L. Jensen Introduction to the Physics of Electron Emission John Wiley & Sons, 2017, 712 с.
- [14] А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич, П. П. Матус Разностные схемы повышенного порядка точности на неравномерных сетках // Дифференциальные уравнения, 1996. Т. 32, № 2. С. 265–274.
- [15] Вержбицкий В.М. Основы численных методов М. : Высш. шк., 2002. 840 с.
- [16] Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики (5-изд.). М. : Наука, 1977. - 742 с.
- [17] Hong Q., et al. Why is Boris algorithm so good? // Phys. Plasmas, 2013. Vol. 20, no. 084503.
- [18] G.L. Delzanno, E. Camporeale On particle movers in cylindrical geometry for Particle-In-Cell simulations // Journal of Computational Physics V. 253, 2013, P. 259–277.
- [19] Поттер Д. Вычислительные методы в физике, М.: Мир, 1975. 392 с.
- [20] Skeel R. D. Variable Step Size Destabilizes the Stomer/Leapfrog/Verlet Method // BIT Numerical Mathematics, 1993, Vol. 33, P. 172–175.
- [21] R. G. Forbes, J. Deane Correction for Forbes and Deane, Reformulation of the standard theory of Fowler-Nordheim tunnelling and cold field electron

emission // Mathematical, Physical and Engineering Sciences 2007, Vol. 463, No. 2087, 2907-2927 с.

- [22] Зартдинов А. Н., Никифоров К. А. Усиление электрического поля на наноструктурной эмиссионной поверхности
Труды 44-ой международной научной конференции аспирантов и студентов, С.-Петербург.: 2013, 215-219с
- [23] Б. В. Гнеденко. Курс теории вероятностей. М.: ФИЗМАТГИЗ, 1961, 406 с
- [24] Tsung-Wei Huang, Dian-Lun Lin, Yibo Lin, Chun-Xun Lin Cpp-Taskflow v2: A General-purpose Parallel and Heterogeneous Task Programming System at Scale arXiv, 2004, 19 с.
- [25] А.В. Батраков, И.В. Пегель, Д.И. Проскуровский Ограничение плотности тока автоэлектронной эмиссии пространственным зарядом эмитированных электронов // Письма в ЖТФ, 1999, том 25, вып. 11, С. 78–82.