

Санкт–Петербургский государственный университет

*Вековцев Вячеслав Владиславович*

**Выпускная квалификационная работа**

*Численное моделирование и анализ характеристик  
автоэмиссионной электронно-оптической системы*

Уровень образования: бакалавриат

Направление 27.03.03 «Системный анализ и управление»

Основная образовательная программа СВ.5164.2020 «Прикладные  
компьютерные технологии»

Научный руководитель:  
кандидат физ.-мат. наук,  
доцент кафедры МЭКС,  
Никифоров К. А.

Рецензент:  
кандидат физ.-мат. наук,  
доцент кафедры теоретической  
физики СВФУ  
им. М. К. Аммосова,  
Федоров А. Г.

Санкт-Петербург

2024 г.

# Содержание

<b>Введение</b> . . . . .	3
<b>Постановка задачи</b> . . . . .	4
<b>Обзор литературы</b> . . . . .	5
<b>Физическая модель</b> . . . . .	7
<b>Математическая модель</b> . . . . .	10
<b>Компьютерная модель</b> . . . . .	12
<b>Исследования и результаты</b> . . . . .	25
<b>Заключение и выводы</b> . . . . .	31
<b>Список литературы</b> . . . . .	32

## Введение

С ростом сложности разработки современных систем и изучения процессов все большую актуальность обретает технология компьютерного моделирования, позволяющая с меньшими временными и материальными затратами получать необходимые результаты. В свою очередь активное развитие вычислительных средств обеспечивает возможность проведения необходимых вычислений прямо на компьютере без применения специальной аппаратуры. Эффективность компьютерного моделирования обеспечена универсальностью математического аппарата, не зависящего от природы изучаемого объекта в силу замены реального объекта соответствующей ему моделью с помощью сведения к физической, математической и в итоге компьютерной модели.

Объектом рассмотрения в рамках данной работы выступает автоэмиссионная электронно-оптическая система с катодно-модуляторным узлом. Автоэлектронная эмиссия состоит в испускании электронов под воздействием сильного электрического поля в соответствии с квантовой теорией, описываемой соотношением Фаулера—Нордгейма.

Вычислительные модели для исследования свойств и характеристик автоэмиссионных электронно-оптических систем имеют ряд характерных особенностей, одной из которых является учет многомасштабности разнообразных процессов, протекающих при автоэлектронной эмиссии [1]. Одной из основных проблем многомасштабного моделирования является необходимость стыковки множества разнородных моделей, описывающих поведение и свойства сложных систем на различных уровнях детализации.

В результате использования многомасштабного подхода в численном моделировании удастся преодолеть разницу в размерах структурных элементов модели при переходе от нанометровых объектов, в том числе кристаллической решетки, расстояние между узлами которой бывает меньше нанометра, до сантиметровых объектов, в частности, всего объема вычислительной области.

## Постановка задачи

Целью работы является построение компьютерной модели автоэмиссионного катодно-модуляторного узла с выбором подходящих способов задания начально-краевых условий для инжекции модельных частиц в вычислительную область с разными распределениями начальных скоростей и вычислением вольт-амперных характеристик соответствующей электронно-оптической системы при разных значениях параметров в среде компьютерного моделирования COMSOL Multiphysics.

Задачами, которые необходимо выполнить для достижения указанной цели, являются:

- Изучение документации и средств моделирования программного обеспечения COMSOL Multiphysics и анализ встроенных возможностей дискретизации пространства, задания начально-краевых условий и проведения необходимых вычислений.
- Создание вычислительной области в среде COMSOL Multiphysics, соответствующей тестовой конфигурации катодно-модуляторного узла.
- Построение компьютерной модели данной конфигурации для практической реализации выбранных методов и задание начальных распределений модуля скорости и начально-краевых условий с соотношением Фаулера—Нордгейма для эмитированных частиц.
- Дискретизация вычислительной области в соответствии с построенной компьютерной моделью и с учетом многомасштабности моделируемых процессов, проведение исследования на сеточную сходимость.
- Реализация вычислительного эксперимента с разными начальными распределениями скоростей эмитированных частиц и анализ полученных результатов.

## Обзор литературы

В данной работе рассматривается катодно-модуляторный автоэмиссионный узел, в настоящее время имеющий широкое применение в разных электронных устройствах и электронно-оптических системах. При написании работы использовалась научная и учебно-методическая литература, связанная как с объектом исследования, так и с особенностями моделирования в используемой программной среде разработки.

В статье Дж. Вебстера описывается изучение эффектов, связанных с полевой эмиссией. В ней рассматривается и геометрическая природа данного явления, и ее сравнение с термоэлектронной эмиссией, и законы, которым она подчиняется, такие как соотношение Фаулера—Нордгейма и другие начально-краевые условия [2].

Более подробное описание начально-краевых условий с соответствующими параметрами эмиттированного пучка, в том числе эмиттанс, разброс поперечных скоростей и т.д. представлено в свежей статье журнала вакуумной науки и техники под авторством Дж. Вака [3]. Наиболее полная же информация об автоэлектронной эмиссии изложена в тематической книге Егорова Н.В. и Шешина Е.П., которая привлекла внимание во время выполнения работы как источник справочных материалов [1].

В рассматриваемой модели важным аспектом планируется внедрение бимодального распределения частиц по начальным скоростям и соответствующим энергиям. Более подробная теоретическая информация об энергетических спектрах, имеющих два максимума приведена в свежих статьях Санкт-Петербургского Государственного Университета и Московского физико-технического института 2023 и 2022 годов соответственно [4], [5]. При этом дополнительная информация с приближенными кадрами, касательно катодно-модуляторного узла «карбид кремния — диоксид кремния — металл» представлена в тематической статье Кузнецовой, Лучинина [6].

С учетом создания компьютерной модели реального устройства и дальнейшего ее анализа в среде моделирования COMSOL Multiphysics, необходимо было ознакомиться с данной программной средой разработки. Наибольшее количество необходимой информации было получено при обращении к пол-

ной документации COMSOL Multiphysics Reference Manual [7]. Дополнительная информация касательно моделирования движущихся частиц была взята из руководства пользователя Particle Tracing Module User's Guide [8]. Также была проведена работа с программной энциклопедией, внесшей ясность по поводу работы с электростатикой в данной программе [9]. Таким образом, было получено достаточно информации о задании необходимых условий и методах программного решения задач для получения желаемых результатов.

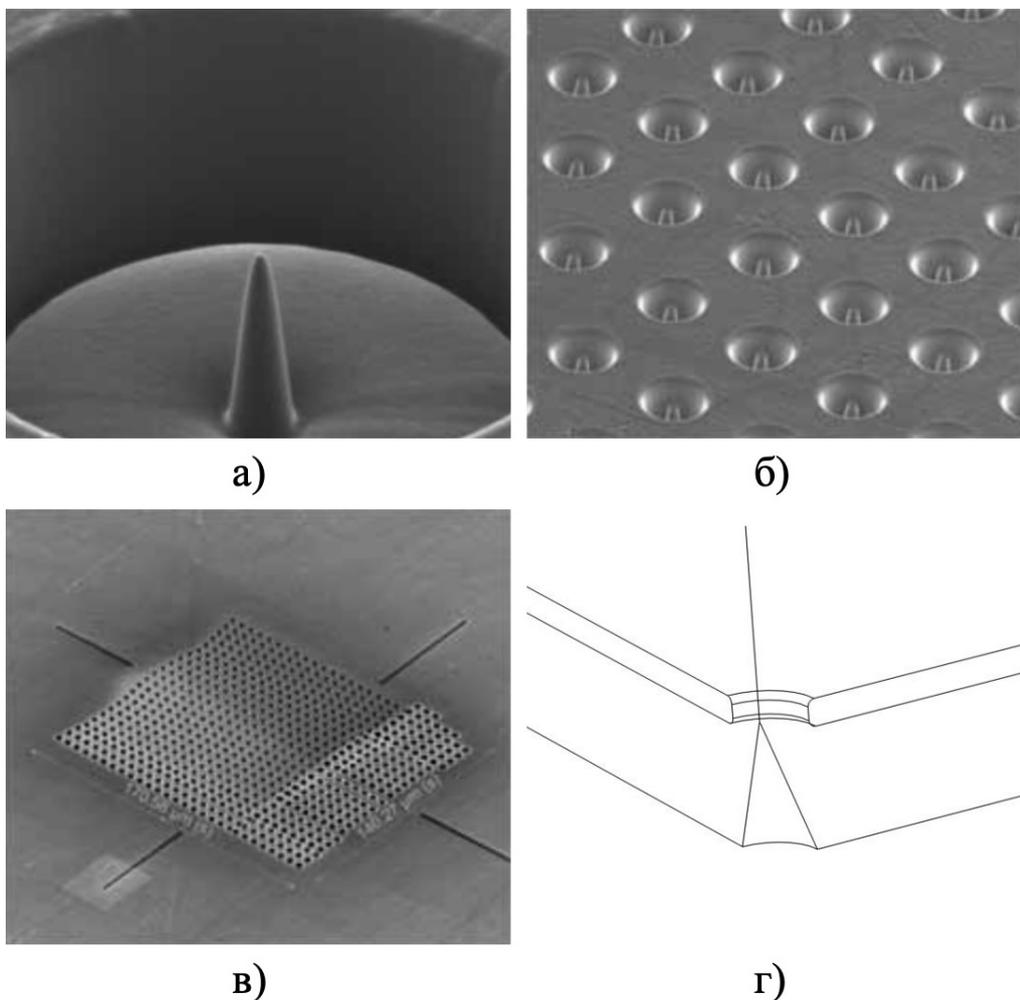
Важным этапом численного моделирования является дискретизация вычислительной области, так как все дальнейшие вычисления производятся на основе построенной конечно-элементной сетки. По данной теме были изучены соответствующие работы [10], [11], в которых рассматриваются различные виды и способы построения сеток, в том числе используемые в программной среде COMSOL Multiphysics. Многомасштабный подход к моделированию и разбиению расчетной области на подобласти, в частности, применяется в работе [12], что обеспечивает учет особенностей неоднородной поверхности и материала, влияя в итоге на точность получаемых результатов.

В рассматриваемом катодно-модуляторном узле ключевым элементом является катод, который в свою очередь в зависимости от своих параметров выдает различные характеристики уже на старте частиц. А любой расчет электронно-оптической системы и траекторный анализ в частности начинается с постановки начально-краевых условий, поэтому актуальной является задача рассмотрения учета этих условий в современной среде моделирования и разработки цифровых моделей.

## Физическая модель

Автоэмиссионный катодно-модуляторный узел является важнейшим структурным элементом электронно-оптической системы и включает в себя следующие элементы:

- автоэмиссионный катод, обладающий большой кривизной поверхности для усиления электрического поля;
- модуляторный электрод, создающий вблизи катода необходимую для эмиссии напряженность электрического поля;
- анодный электрод, принимающий поток эмиттированных с катода электронов.



**Рис. 1.** Катодно-модуляторный узел «карбид кремния — диоксид кремния — металл»: вид одиночного эмиттера и многоэмиттерной структуры. Модель поверхности электродов [6].

В физическую модель входят следующие законы, соотношения и упрощающие предположения:

- Многоэмиттерная система рассматривается как периодически структурированный массив эмиттеров в квазистационарном приближении (рис. 1а-в).
- Зависимость плотности тока полевой электронной эмиссии от напряженности электрического поля, вызывающего ее, рассчитывается в рамках теории Фаулера–Нордгейма (1).
- Форма острейного эмиттера аппроксимируется сферическим сегментом, вписанным на вершине конуса, форма края диафрагмы модулятора — тороидальными поверхностями (рис. 1г).
- Неоднородность физических условий на эмиссионной поверхности (в том числе шероховатость на атомарном масштабе, изменения работы выхода и пр.) учитывается в коэффициенте усиления  $k$  локального электрического поля (2).

Напряженность электрического поля в несколько единиц порядка  $10^9$  В/м необходима для того, чтобы потенциальный порог на поверхности катода превратился в потенциальный барьер и появилась бы отличная от нуля вероятность туннелирования электронов сквозь барьер в процессе полевой электронной эмиссии.

В соответствии с теорией Фаулера — Нордгейма [1] плотность эмиссионного тока зависит от модуля напряженности поля и работы выхода:

$$j(E) = \frac{AE}{\varphi t^2(y)} \exp \left( -B \frac{\varphi^{\frac{3}{2}}}{E} \nu(y) \right), \quad (1)$$

где  $j$  — плотность тока эмиссии,  $A$  и  $B$  — постоянные, связанные с фундаментальными физическими величинами,  $A = \frac{e^3}{8\pi h}$ ,  $B = \frac{8\pi\sqrt{2m}}{3eh}$ ,  $h$  — постоянная Планка,  $e$  — заряд электрона,  $m$  — масса покоя свободного электрона,  $t(y)$ ,  $\nu(y)$  — эллиптические функции Нордгейма аргумента  $y = \sqrt{\frac{e^3 E}{4\pi\epsilon_0 \varphi^2}}$ , для

которых используется аппроксимация  $t^2(y) \approx 1,11619$ ,  $\nu(y) \approx 0,95 - y^2$ ,  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная,  $E$  — величина напряженности внешнего электрического поля,  $\varphi$  — работа выхода материала, являющаяся мерой энергии связи электронов с твердым телом.

Внешнее распределение энергии и скорости эмиттированных электронов, с которой частицы попадают в межэлектродное пространство катодно-модуляторного узла, зависит от прозрачности потенциального барьера и вида функции распределения энергии электронов внутри катода.

Таким образом, катодно-модуляторный узел рассматривается, как система трех электродов с гладкими поверхностями: вершина конусообразного катода аппроксимируется вписанной сферической поверхностью, края отверстия модулятора аппроксимируются тороидальными поверхностями. Неоднородность физических условий на эмиссионной поверхности (шероховатость на атомарном масштабе, изменения работы выхода и пр.) учитывается в коэффициенте усиления локального электрического поля:

$$E = kE_m, \quad (2)$$

где  $k$  — коэффициент усиления напряженности макроскопического электрического поля  $E_m$ .

При этом используются следующие упрощающие предположения:  $\varphi = const$ ,  $k = const$ ,  $T = 0$ .

С учетом осевой симметрии системы можно было бы рассмотреть двумерную постановку задачи в цилиндрических координатах, однако, в дальнейшем возможно появление дополнительных условий на поверхности катода, нарушающих осевую симметрию: например, неоднородное распределение работы выхода по поверхности катода. Поэтому система катодно-модуляторного узла рассматривается сразу в трехмерной постановке, но с целью экономии вычислительных ресурсов проводятся расчеты пока только с четвертью объема системы.

В силу рассмотрения  $1/4$  модели катодно-модуляторного узла, имеем смешанную задачу (третьего рода), с использованием граничных условий разного типа — как типа Дирихле, так и условий Неймана.

## Математическая модель

Рассмотрим расчетную область  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ , где  $\Gamma = \cup_i \Gamma_i$  — граница расчетной области.

Электрическое поле описывается с использованием электростатического потенциала и уравнения Лапласа:

$$\Delta U = 0, \quad (3)$$

$$\vec{E} = -\nabla U. \quad (4)$$

Уравнение Лапласа решается в замкнутой области, соответствующей внутреннему пространству катодно-модуляторного узла, на границе которой заданы краевые условия:

$$U|_{\Gamma_i} = U_i, \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial \vec{n}} \right|_{\Gamma_d} = 0, \quad (6)$$

где  $n$  — нормаль к поверхности границы,  $U_i$  — постоянный потенциал  $i$ -го проводника с границей  $\Gamma_i$ ,  $\Gamma_d$  — боковая граница катодно-модуляторного узла.

Общий эмиссионный ток вычисляется интегрированием по области эмиссии величины плотности тока в соответствии с соотношением Фаулера — Нордгейма:

$$I = \int_s j(E) ds. \quad (7)$$

Моделирование величины тока эмиссии реализуется с использованием модельных заряженных частиц, которые инжектируются в вычислительную область с границы в области эмиссии. Количество физических частиц на одну модельную частицу в единицу времени, которые должны быть выпущены для создания необходимой величины тока определяется частотой испускания  $f = \frac{I}{eN}$ , где  $N$  — количество моделируемых частиц.

Движение заряженных частиц в электростатическом поле описывается уравнением:

$$\frac{d}{dt}(m_p \vec{V}) = -e\vec{E}, \quad (8)$$

где  $m_p$  — масса частицы,  $V$  — скорость частицы,  $e$  — заряд электрона,  $t$  — время.

Начально-краевые условия:

$$q_{0i} = \Gamma_e, \quad (9)$$

$$\vec{V}_{0i} = const, \quad (10)$$

где  $q_{0i}$  — положение частицы в начальный момент времени,  $\Gamma_e$  — эмиссионная поверхность,  $\vec{V}_{0i}$  — скорость частицы в начальный момент времени,  $i$  пробегает по всем моделируемым частицам. Направление начальных скоростей частиц совпадает с внешней нормалью к эмиссионной поверхности  $\Gamma_e$ .

## Компьютерная модель

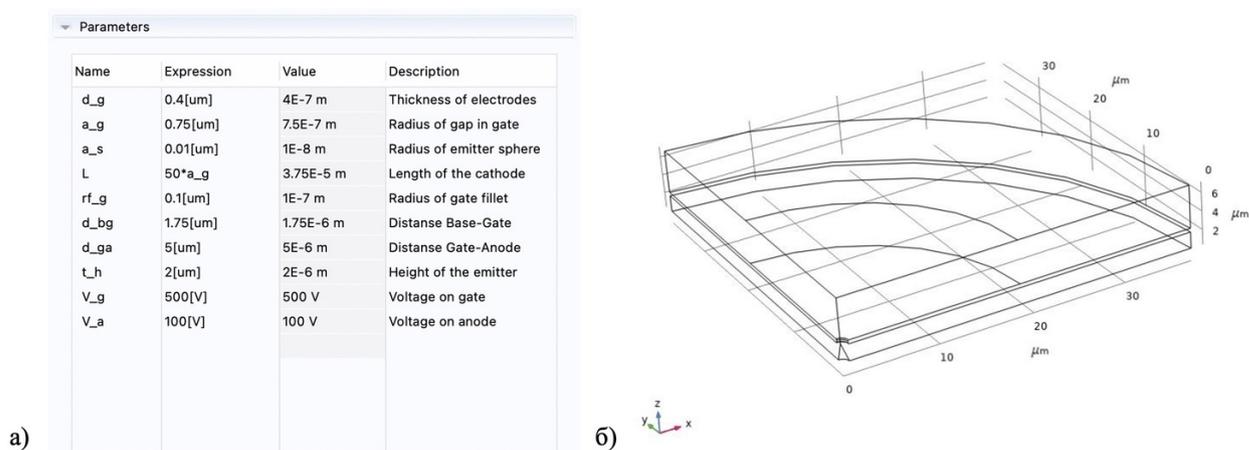
Построение компьютерной модели включало в себя несколько следующих этапов:

- задание геометрических параметров и построение геометрической модели системы;
- дискретизация вычислительной области;
- реализация соотношения Фаулера—Нордгейма в компьютерном представлении;
- выбор и настройка необходимых физических интерфейсов.

Для расчета и анализа автоэмиссионных систем и процессов требуются гибкие и функциональные инструменты моделирования. Для проведения данного вычислительного эксперимента была использована современная среда компьютерного моделирования COMSOL Multiphysics, имеющая универсальность в силу наличия множества профильных модулей и применимая для численного моделирования мультифизических устройств и процессов в разнообразных областях науки. Для решения поставленной задачи понадобилось задействование двух физических интерфейсов программного обеспечения COMSOL Multiphysics — интерфейса модуля электростатики (Electrostatics), отвечающего за распределение электростатического потенциала и поля на первом этапе моделирования, и интерфейса модуля траекторий заряженных частиц (трассировки — Charged Particle Tracing), отвечающего за запуск и отслеживание модельных частиц на втором этапе моделирования.

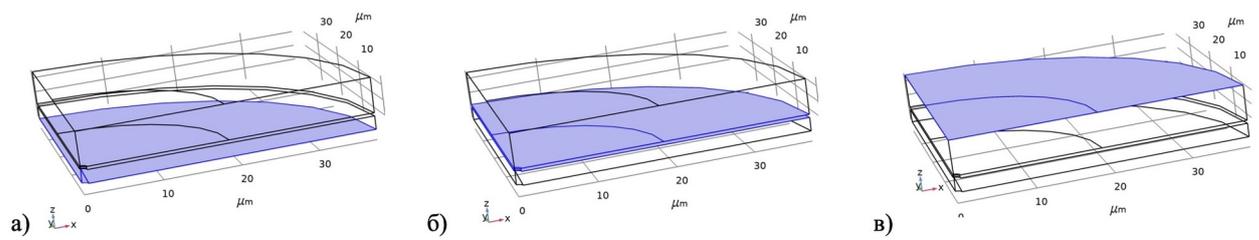
Данная задача может быть представима и в двумерной постановке, однако ее рассмотрение в трехмерной постановке позволяет учесть более тонкие эффекты с более точным вычислением поля, хотя и является при этом более ресурсоемким подходом. Для снижения же вычислительной нагрузки, как ранее было отмечено, рассматривается четверть объема системы с наложением соответствующих условий симметрии на боковые грани модели.

За основу была взята модель микротриода, первым этапом реализации которой было создание объемной геометрии модели, соответствующей необходимым параметрам, приближающих ее к реальному объекту. Для этого в среде моделирования в табличном виде было произведено задание таких ключевых параметров, как толщина электродов, радиус диафрагмы модулятора, радиус кривизны вершины эмиттера, малый радиус тора на кромке диафрагмы модулятора, длина катода, расстояние от подложки до модулятора и от модулятора до анода, высота эмиттера, а также напряжения на аноде и модуляторе, значения которых представлены на рис. 2а. На основе данных параметров построена геометрическая модель необходимой конфигурации, представленная на рис. 2б.



**Рис. 2.** а) геометрические параметры в табличном представлении; б) трехмерная (объемная) модель на основе заданных параметров геометрических примитивов.

Распределение электростатического потенциала и напряженности электрического поля, а также катодный и анодный токи формируются такими составляющими автоэмиссионной системы, как анод, катод и модулятор. Плоскости, соответствующие этим элементам в модельном представлении выделены синим цветом на рис. 3.



**Рис. 3.** Модельные плоскости, соответствующие а) области катода; б) области модулятора; в) области анода.

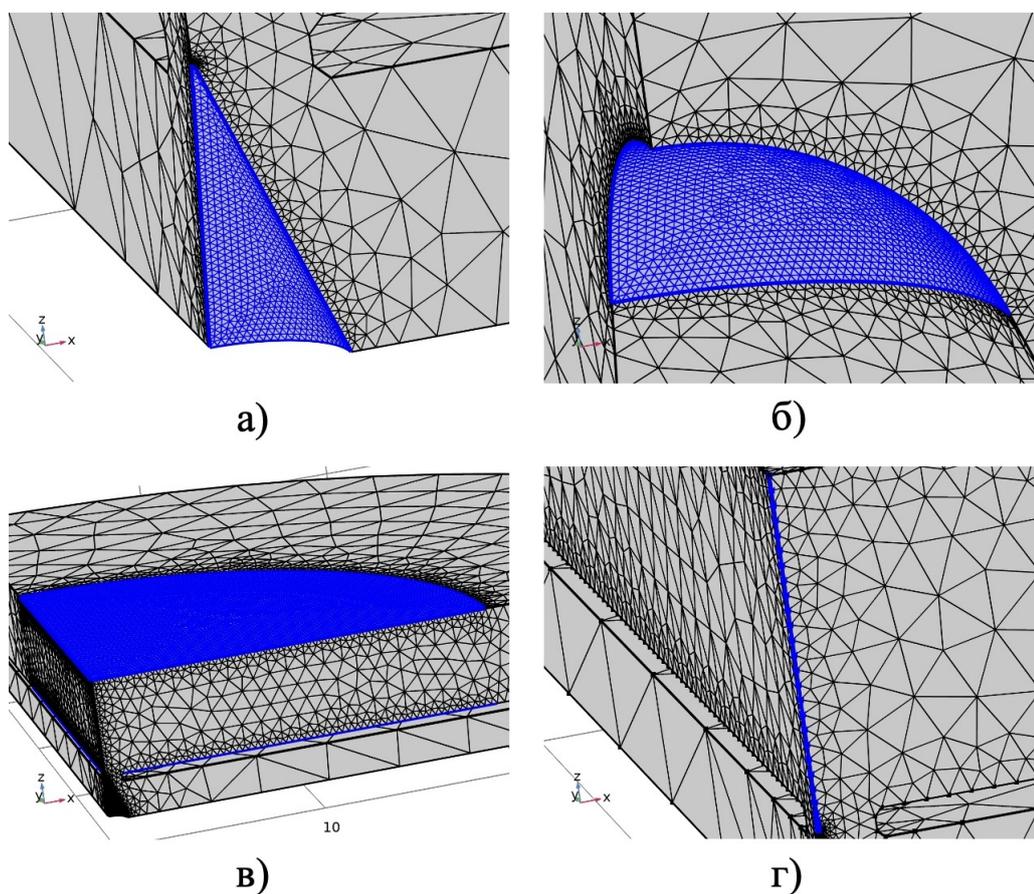
Не менее важным этапом было создание объемной вычислительной конечно-элементной сетки на основе заданной геометрии. Важность этапа дискретизации в численном моделировании обусловлена тем, что все дальнейшие вычисления выполняются непосредственно на основе построенной конечно-элементной сетки. Пространственная дискретизация является необходимой процедурой для разбиения расчетной области на конечное число подобластей. В результате исходное непрерывное распределение искомой величины представляется в виде конечных распределений в дискретных объемах.

Сетки, получаемые в результате пространственной дискретизации, подразделяются на структурированные и неструктурированные [10]. От выбранного типа сетки зависит и численный метод дискретизации пространства. Так, метод контрольных объемов изначально предназначен для решения уравнений переноса и применяется для решения задач на основе структурированных сеток. Преимуществом таких сеток является использование простых структур данных для хранения информации о координатах сеточных узлов и соответствующих значениях искомых переменных в них. Также данные сетки просты в построении и для решения уравнений на структурированных сетках существуют эффективные решатели, не требующие больших вычислительных ресурсов и работающие достаточно быстро. Недостатком же такого способа пространственной дискретизации является ограниченность в сложности геометрических форм. В свою очередь неструктурированные сетки наоборот отличаются большей гибкостью и адаптивностью, позволяя легко описывать сложные геометрические объекты и, соответственно, решать более широкий круг задач. При этом теряются преимущества, даваемые структурированными

сетками на простой геометрии, а именно, требуются более сложные структуры данных, что приводит к более сложным алгоритмам решения уравнений и большему потреблению вычислительных ресурсов [11].

В рассматриваемом случае за построение необходимой трехмерной сетки отвечает метод конечных элементов. Дискретизация непрерывной задачи согласно этому численному методу производится на неструктурированной сетке с неравномерным пространственным шагом. Как отмечено в предыдущем разделе, автоэмиссионные системы требуют высокой точности вычисления в области, где происходит непосредственно эмиссия. Это связано с тем, что в данной области вычисляется плотность тока, экспоненциально зависящая от напряженности поля (1), т. е. погрешности вычисления напряженности экспоненциально распространяются на вычисленную плотность тока. В этой области требуется обеспечение максимально возможного точного вычисления напряженности. Еще одной особенностью является то, что для снижения погрешности интегрирования траекторий частиц частям вычислительной области, в которых движутся модельные частицы, должны соответствовать области с достаточно мелким разбиением сетки, в смысле обеспечения устойчивости методу интегрирования уравнений движения.

Вычислительная сетка, удовлетворяющая описанным выше особенностям, построена следующим образом. Так как при инжекции модельных частиц в вычислительную область их начальное положение определяется в интерфейсе Charged Particle Tracing выбором случайного сеточного элемента для каждой частицы с вероятностью, пропорциональной размеру элемента сетки, в следствии чего больше частиц будет запущено с более крупных сеточных элементов. В результате для минимизации погрешности области наименьшего шага на рис. 4 соответствуют поверхности модулятора (рис. 4а) и его вершины (рис. 4б), откуда непосредственно производится эмиссия. На областях, куда в ходе симуляции работы системы не попадают эмитированные частицы, размеры ячеек сетки крупнее, так как это снижает объем вычислений, при этом не влияя на точность решения (рис. 5).

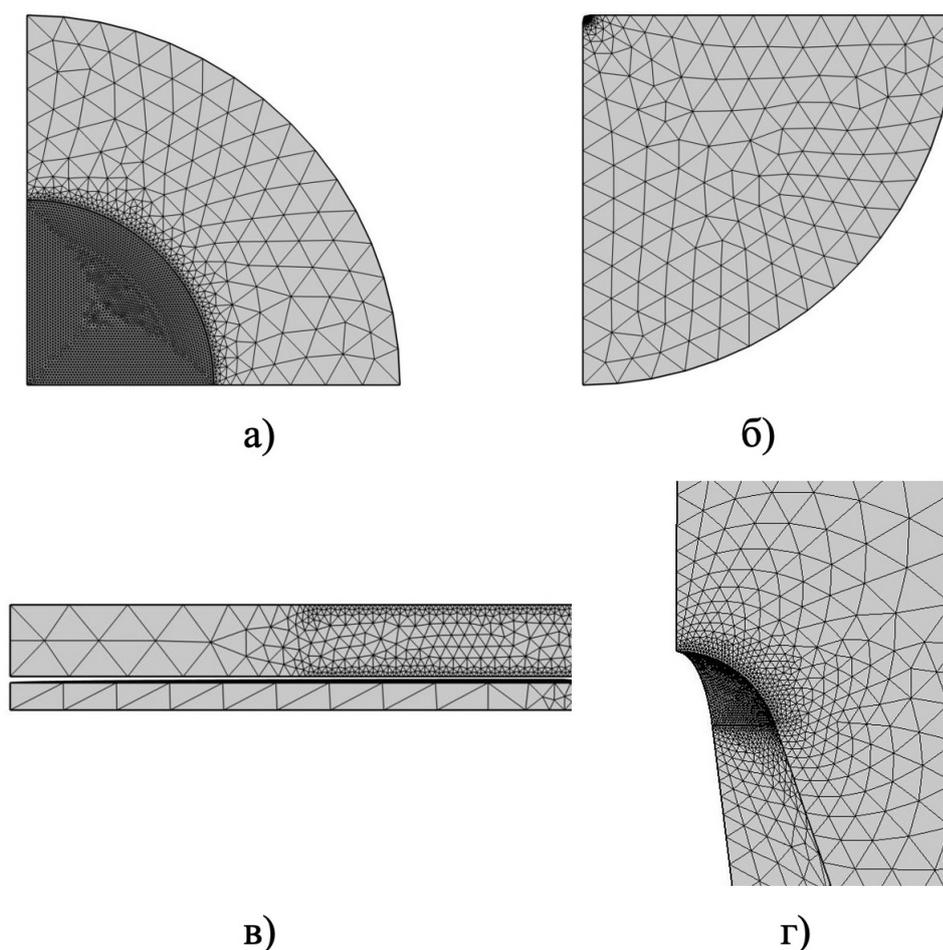


**Рис. 4.** Дискретизация вычислительной области а) на коническом основании эмиттера; б) на вершине эмиттера; в) в области инжекции и прохождения модельных частиц; г) на оси системы и поверхностях симметрии.

Таким образом, элементами построенной сетки являются тетраэдры, общее количество которых превышает 650000 единиц (рис. 5). В результате осуществляется аппроксимация геометрии модели и приближенное решение задачи происходит в дискретных точках пространства, определяемых данной сеткой. При наличии сеточной сходимости по мере уточнения сетки численное решение имеет тенденцию более точно приближаться к решению граничной и начально-краевой задачи.

Результатом дискретизации является достаточно подробная сетка, предоставляющая решение с допустимой погрешностью (определенной точностью), но не перегружающая вычислительную систему, обеспечивая эффективность по времени вычислительного процесса. В рассматриваемой модели выделены четыре отдельных подобласти (рис. 4), на которых сетка имеет большую детализацию в соответствии со значениями параметра, задающего наибольший

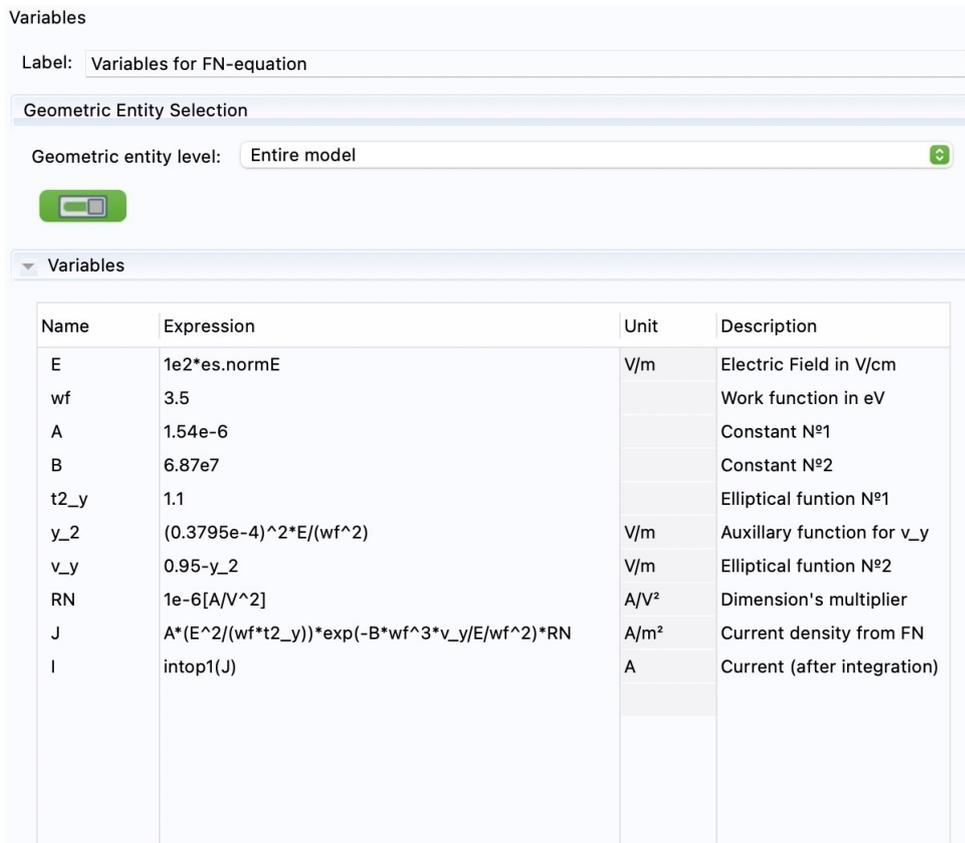
размер сеточного элемента.



**Рис. 5.** Вид поверхностной сетки а) сверху, в проекции XY; б) снизу, в проекции XY; в) сбоку, в проекции XZ; г) на эмиттере.

Как было ранее упомянуто, работа моделируемой системы основана на квантовой теории в соответствии с соотношением Фаулера—Нордгейма. Для создания необходимой модели задействовались два разных интерфейса моделирования COMSOL — электростатики (es) и трассировки заряженных частиц (cpt), поэтому описание реализации модели проводится далее в терминах среды моделирования COMSOL. Для реализации соотношения Фаулера—Нордгейма в компьютерном представлении в глобальных настройках рабочей области был создан блок с рядом уравнений, использующихся впоследствии при генерации частиц. В том числе было произведено включение соответствующих переменных среды (таких как величина напряженности поля) и использования эллиптических функций Нордгейма в приближенном

виде. При этом область применения данных условий была выбрана вся модельная область, что отражено на рис. 6.



**Рис. 6.** Интерфейс модуля электростатики: а) задействованные узлы данного интерфейса; б) область задания узла нулевого заряда (Zero Charge).

Интерфейс модуля электростатики (es) используется для расчета электрического поля, поля электрического смещения (при наличии диэлектриков) и распределения потенциала. Данный вычислительный модуль применяет закон Гаусса для электрического поля, используя скалярный электрический потенциал в качестве зависимой переменной. Задействованные узлы данного модуля представлены на рис. 7а и имеют следующий функционал.

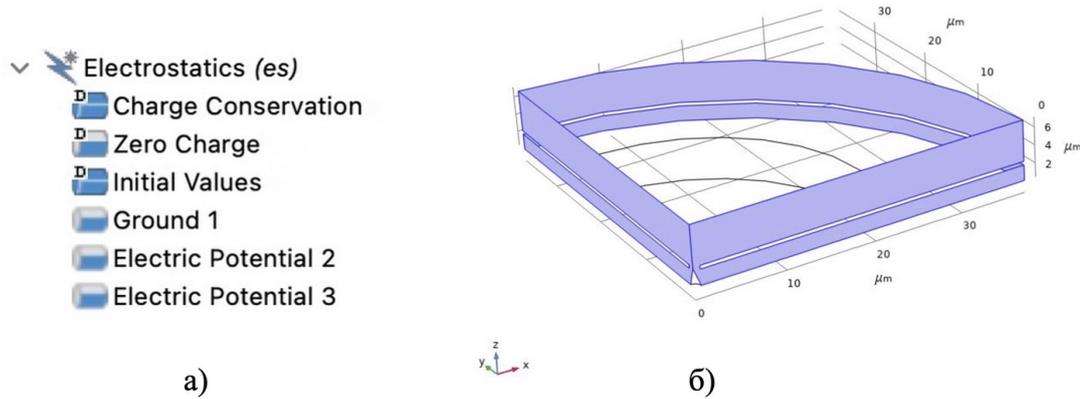
Основным является узел сохранения заряда (Charge Conservation), распространяющийся на всю модельную область и задающий соотношение (4) для электрического потенциала, а также имеющий окно настроек для задания определяющего соотношения (12) для поля электрического смещения и связанных с ним свойств, таких как относительная диэлектрическая проницаемость (в случае присутствия диэлектриков).

$$\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E}) = \rho_u, \quad (11)$$

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E}. \quad (12)$$

где  $\rho_u$  — плотность пространственного заряда,  $\varepsilon_r = 1$  — относительная диэлектрическая проницаемость среды,  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная.

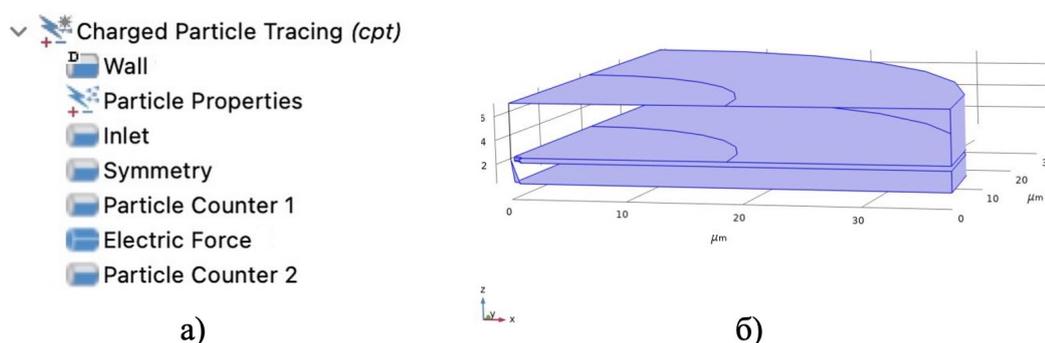
Узел нулевого заряда (Zero Charge) добавляет условие, согласно которому на границе с помощью соотношения  $\vec{n} \cdot \vec{D} = 0$  задан нулевой заряд. Данное граничное условие используется на границах симметрии, когда потенциал симметричен относительно границы. В данном случае это обусловлено рассмотрением 1/4 вычислительной области в рамках поставленной задачи, а область задания этого узла отражена на рис. 7б.



**Рис. 7.** Интерфейс модуля электростатики: а) задействованные узлы данного интерфейса; б) область задания узла нулевого заряда (Zero Charge).

В узле начальных значений (Initial Values) задан нулевой электрический потенциал для всей модельной области, исключения в которой устанавливают узлы заземления (Ground) и электрических потенциалов (Electric Potential), заданные на модельных плоскостях, соответствующих катоду, модулятору и аноду, представленных ранее на рис. 3. Напряжения в данных областях задаются этими узлами отдельно. Так, плоскости катода соответствует напряжение  $U = 0$  В, на плоскости модулятора задано напряжение  $U = 100$  В, а на аноде  $U = 500$  В (данные величины варьируются при расчете вольт-амперных характеристик).

Когда необходимое электрическое поле построено, задействуется интерфейс модуля трассировки заряженных частиц (cpt). Данный интерфейс необходим для расчета траекторий модельных частиц, движение которых в построенной модели происходит в соответствии с Ньютоновской формулировкой, определяющей набор обыкновенных дифференциальных уравнений (8) второго порядка для координат частицы на основе второго закона Ньютона. Задействованные узлы этого интерфейса представлены на рис. 8а и необходимы для реализации следующих функций.



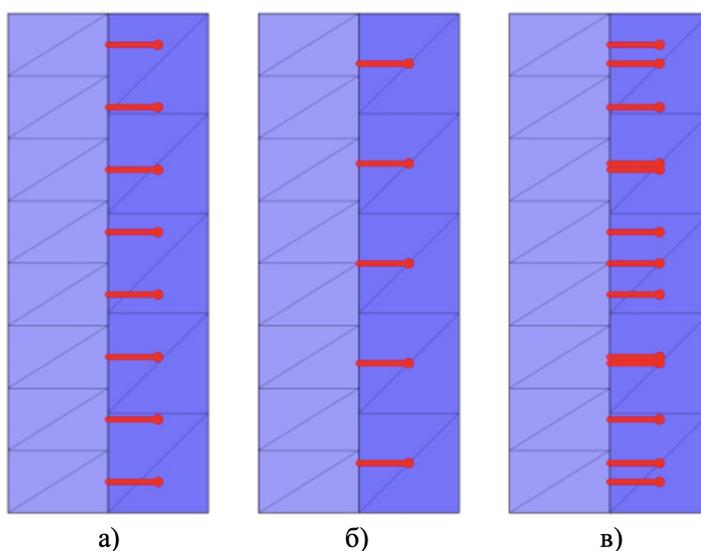
**Рис. 8.** Интерфейс трассировки заряженных частиц: а) задействованные узлы данного интерфейса; б) область задания условия остановки (взаимодействия с границей) модельных частиц (узла Wall).

Узел взаимодействия частиц со стенками (Wall) используется для определения того, что будет происходить с частицами при контакте с границами построенной модели и включает в себя набор граничных условий, описывающих условия взаимодействия частиц с соответствующими границами. В построенной модели контакт частицы с любой границей, за исключением областей симметрии, должен означать окончание ее движения. Поэтому в данном узле было выбрано условие остановки (Freeze), означающее фиксацию частицы при ее контакте с границей. Согласно данному условию положение частицы после контакта больше не меняется и она завершает свой путь, что и требуется в соответствии с постановкой задачи. Модельные плоскости, соответствующие областям, на которые распространяется данное условие, представлены на рис. 8б.

Узел свойств частиц (Particle Properties) используется для указания

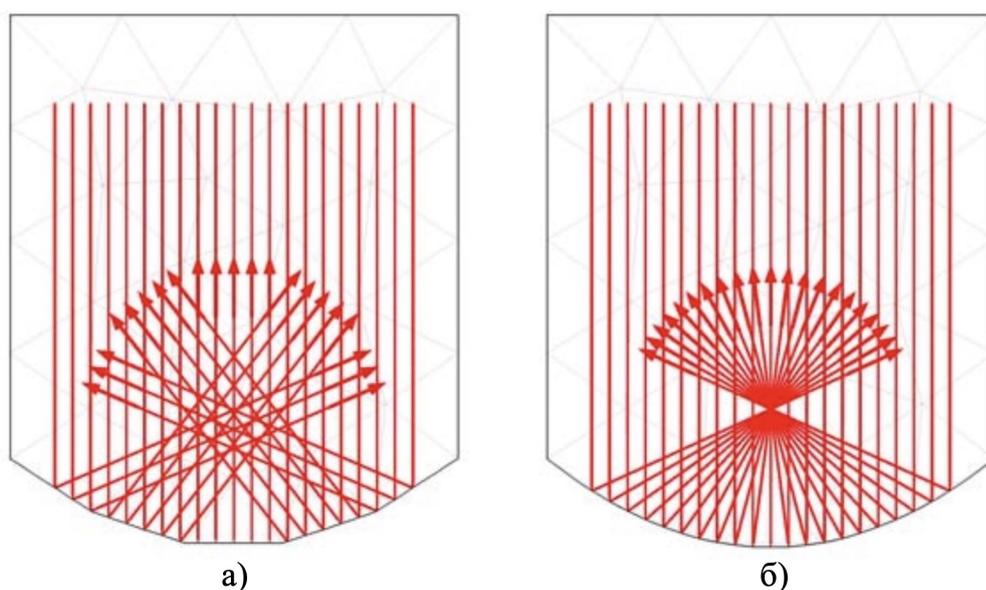
массы и заряда частицы. В рамках поставленной задачи необходимо было моделирование частиц, идентичных электрону, поэтому были заданы заряд  $q = -1$  и масса в виде встроенной константы  $m_{e\_const} = 9,10938356 \cdot 10^{-31}$  кг.

Узел условий запуска частиц (Inlet) подразумевает задание начальных условий для инъекции модельных частиц в вычислительную область. В частности, задаются такие параметры, как начальная скорость (энергия) частиц и их начальное положение. Данное условие в рамках поставленной задачи позволяет произвести инъекцию модельных частиц с разными начальными краевыми условиями, а именно: с постоянной скоростью; с распределением скоростей, свойственным случаю термоэмиссии (распределение Максвелла); с бимодальным законом распределения, соответствующим натурному эксперименту и свойственным карбиду кремния. Как правило, инъекция модельных частиц в вычислительную область производится на границе раздела сред, на которой также стыкуются и две разные вычислительные сетки. В связи с этим необходим выбор той сетки, на основе которой будет производиться инъекция. Имеются три разных варианта запуска частиц (рис. 9) — с опорой на сетку источника, сетку стока или их обеих. Так как в рамках поставленной задачи особое значение имеет область инъекции частиц, в модели использовался первый вариант запуска.



**Рис. 9.** Запуск модельных частиц на основе сетки: а) источника, б) стока, в) как источника, так и стока. В каждом случае источник обозначен более светлым цветом [8].

Однако стоит учитывать, что, вне зависимости от выбранного варианта инъекции модельных частиц в вычислительную область, при произведении расчетов на изогнутых поверхностях все равно имеют место быть ошибки, обусловленные дискретизацией вычислительной области. Таким образом, при расчете движения частиц в вычислительной области как время, так и место взаимодействия частиц с сеточными элементами могут отличаться от соответствующих параметров при взаимодействии частиц с точной геометрией. Это обусловлено упрощением расчетной области относительно заранее построенной геометрии, вследствие чего происходит искажение расчетной сетки и возможно наличие погрешности в расчетах, что характеризует рис. 10. Данная погрешность образуется за счет того, что при достижении частицами границ модельных геометрических объектов, вместо взаимодействия частиц с данными объектами геометрии происходит их взаимодействие с конечными граничными элементами, покрывающими поверхности геометрических объектов.



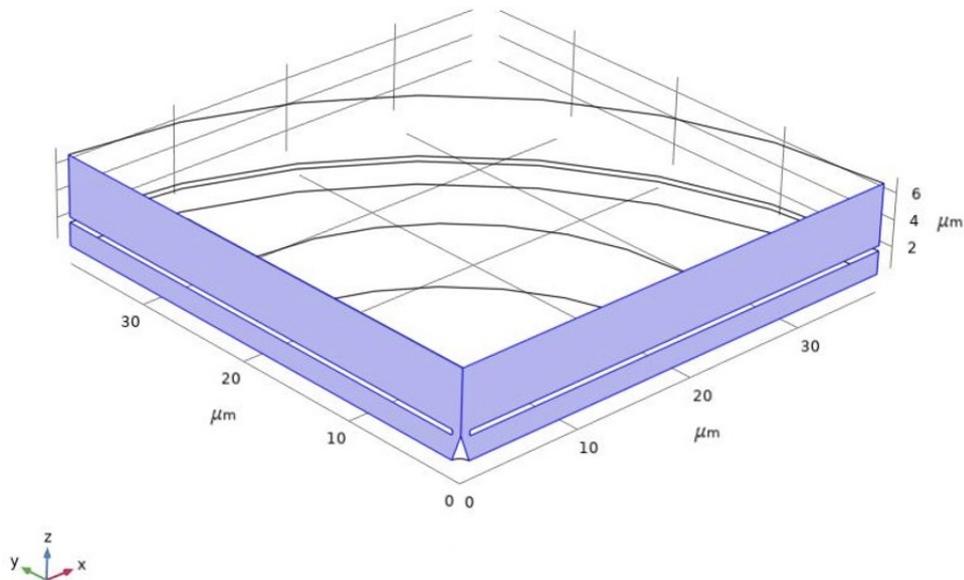
**Рис. 10.** Сравнение частиц, отраженных на изогнутой границе, представленной с помощью: а) линейных элементов, б) квадратичных элементов [8].

Узел осевой симметрии (Symmetry) добавляет граничные условия, отвечающее за поведение модельных частиц, попадающих на выбранные области, аналогично узлу взаимодействия частиц со стенками (Wall), но реализую-

щих симметрию в построенной геометрии. В рамках данной задачи условие симметрии накладывается на плоскости, указанные на рис. 11 в силу рассмотрения 1/4 системы. Согласно данному условию, при попадании на указанную плоскость, частица не прекращает свое движение, как в случае с другими плоскостями на рис. 8б, а продолжает свое движение в соответствии с соотношением:

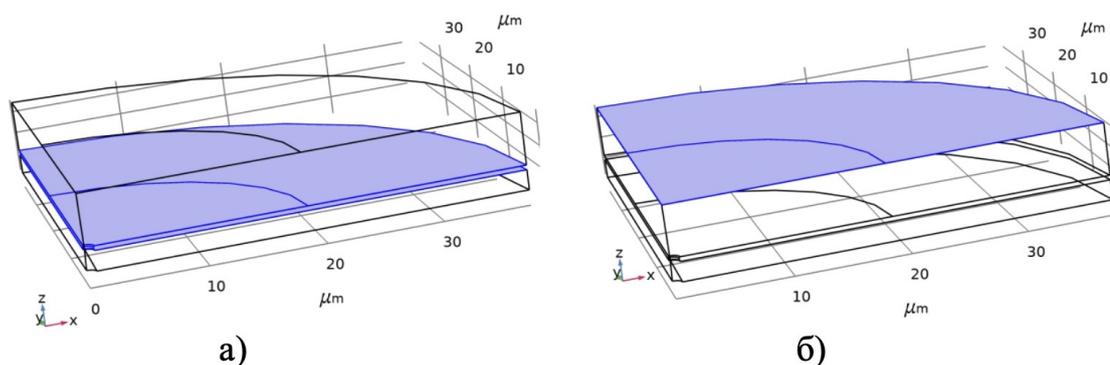
$$\vec{V} = \vec{V}_c - 2(\vec{n}\vec{V}_c)\vec{n}, \quad (13)$$

где  $\vec{n}$  — нормаль к поверхности границы,  $\vec{V}_c$  — скорость падающей на границу частицы.



**Рис. 11.** Область задания условия симметрии (узла Symmetry).

Узлы счетчиков частиц (Particle Counter 1, 2) позволяют задать отдельные подобласти на геометрии модели для получения информации о частицах, попадающих непосредственно на них. В рассматриваемой модели заданы два отдельных счетчика: первый соответствует модельной плоскости модулятора, а второй — анода (рис. 12). Реализовано это с целью расчета отдельно анодного и модуляторного токов и дальнейшего построения вольт-амперных характеристик.



**Рис. 12.** Счетчики (Particle Counter) на модельных плоскостях а) модулятора, б) анода.

Узел вычисления электрической силы (Electric Force) используется для определения электрической части силы Лоренца и задается с помощью электрического поля, построенного в рамках электростатической задачи. В данной модели таким образом обеспечивается влияние электрического поля на движение модельных частиц в вычислительной области. При этом накладывается данное условие на весь объем модели с помощью соотношения  $\vec{F}_e = eZ\vec{E}$ , где  $\vec{F}_e$  — электрическая сила, действующая на частицы, а  $E$  — построенное с помощью интерфейса электростатики электрическое поле.

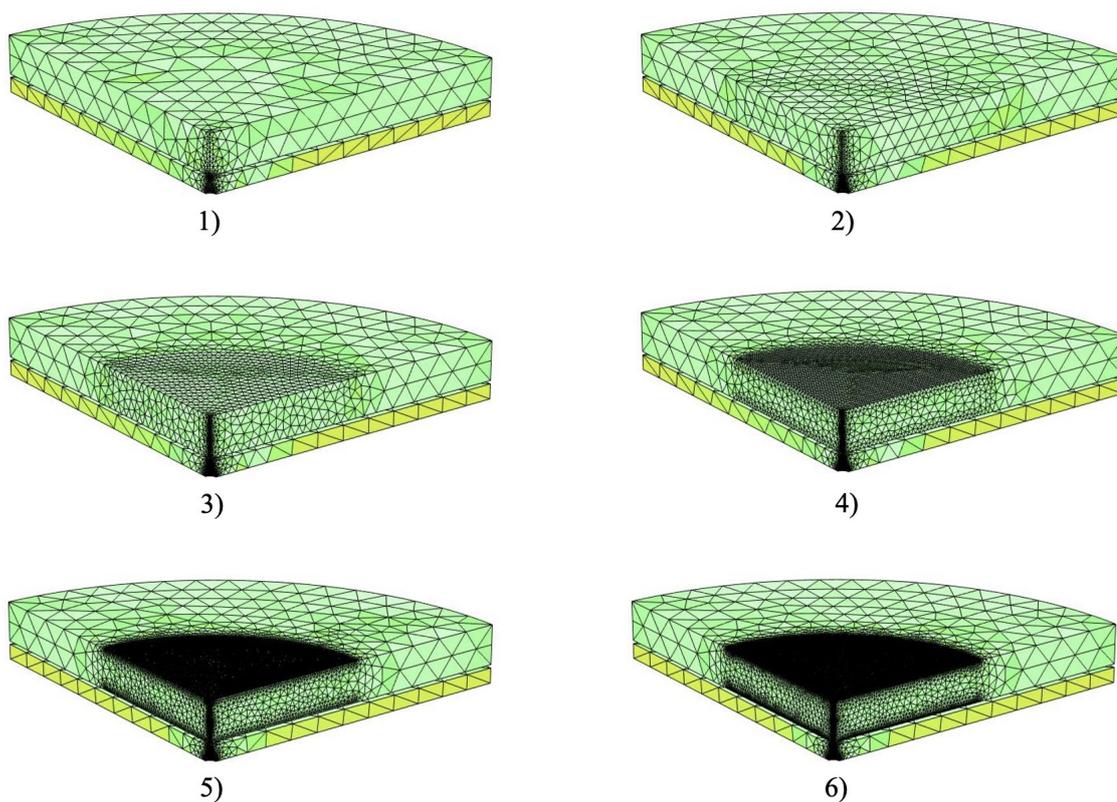
## Исследования и результаты

Далее за этапом построения и настройки в COMSOL компьютерной модели, соответствующей необходимой конфигурации катодно-модуляторного узла, осуществляется задание необходимых исследований (study), отвечающих за непосредственное вычисление нужных характеристик и моделирование физических процессов с дальнейшей визуализацией для наглядной демонстрации результатов.

Вычислительно эффективным методом моделирования заряженных частиц является предварительное решение задачи расчета электрического поля и дальнейший учет его влияния на инжектируемые заряженные частицы при однонаправленном моделировании в соответствии с соотношениями (1)—(10). Таким образом, первоначальная задача разбивается на две отдельных подзадачи. При этом в компьютерном представлении задаются два последовательных исследования — аналогично задействованным в предыдущем разделе интерфейсам — электростатическое, отвечающее за расчет электрического поля и потенциала в стационарном виде (study 1), а также расчет запуска и отслеживания модельных частиц в нестационарном виде (study 2).

Перед проведением основного вычислительного эксперимента с инъекцией модельных частиц в вычислительную область (моделированием полевой эмиссии) было выполнено вспомогательное исследование на сеточную сходимость, в ходе которого была определена оптимальная плотность вычислительной сетки. Исследование проводилось с учетом величины электрического поля в заданной точке в непосредственной близости к поверхности эмиссии как наиболее значимой области. Всего было совершено 6 итераций, на каждой из которых ограничение размера наибольшего сеточного элемента по каждой из областей, приведенных на рис. 4 уменьшалось в 2 раза. В результате процесс измельчения поверхностной конечно-элементной сетки показан на рис. 13. При этом на каждой итерации производилось не только перестроение вычислительной сетки, но и перераспределение электрического потенциала, с помощью которого в данной модели производится расчет электрического поля. Соответствующие результаты с указанием количества степеней свободы и величины электрического поля в заданной точке на каждой итерации

представлены в таблице 1.



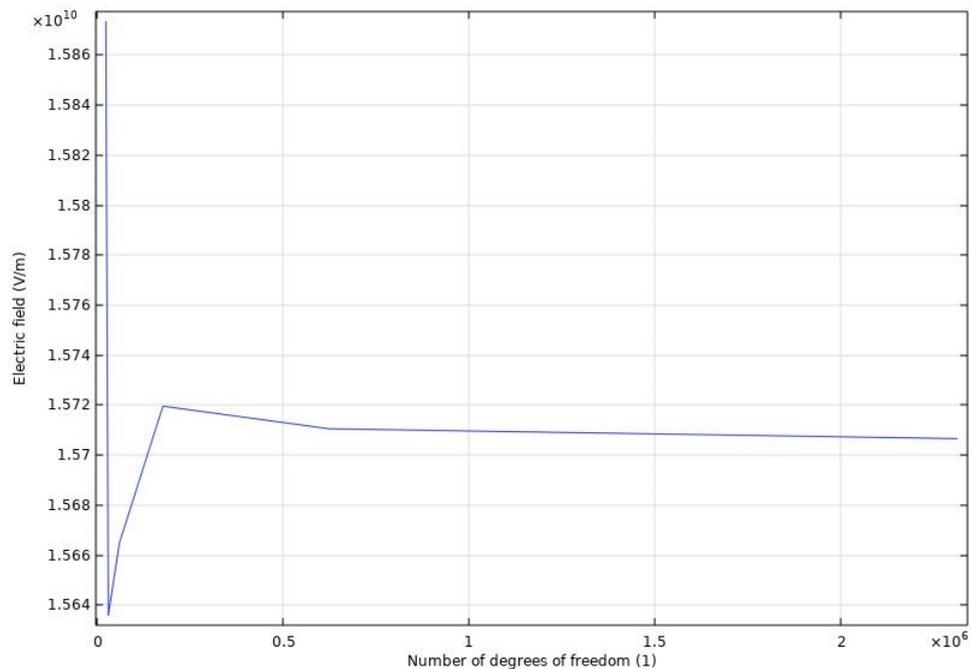
**Рис. 13.** Процесс измельчения поверхностной конечно-элементной сетки при проведении исследования на сеточную сходимость.

Итерация (№)	Количество степеней свободы (ед.)	Значение электрического поля (В/м)
1	10131	$1,5873 \cdot 10^{10}$
2	16925	$1,5636 \cdot 10^{10}$
3	46889	$1,5665 \cdot 10^{10}$
4	163640	$1,5720 \cdot 10^{10}$
5	611223	$1,5711 \cdot 10^{10}$
6	2299289	$1,5707 \cdot 10^{10}$

**Таблица 1.** Значения ключевых величин в исследовании на сеточную сходимость.

Зависимость величины электрического поля в точке наблюдения от количества степеней свободы (рис. 14) иллюстрирует сеточную сходимость,

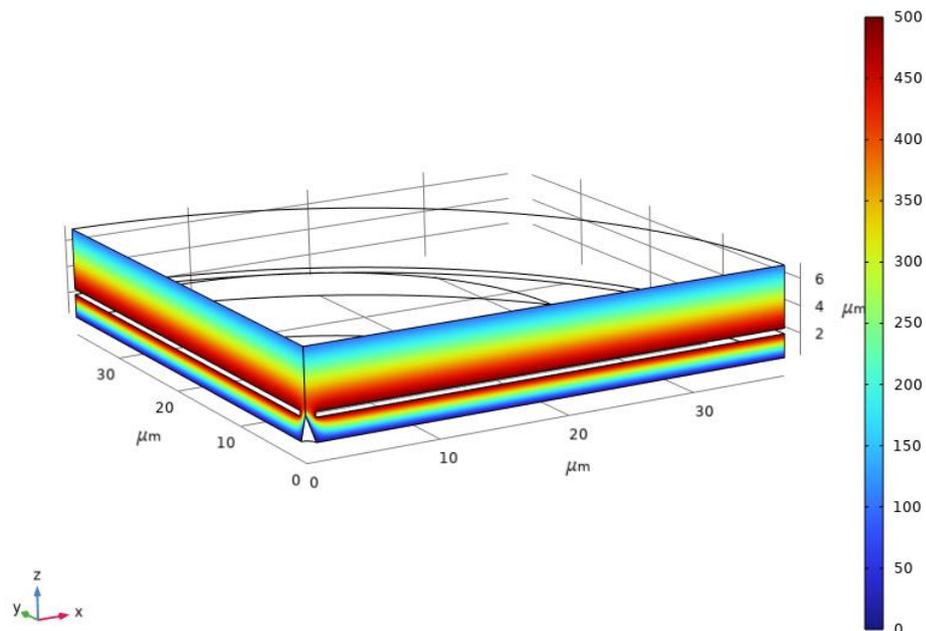
начиная с 600000 элементов.



**Рис. 14.** Зависимость величины электрического поля от количества степеней свободы (сеточных элементов) модели.

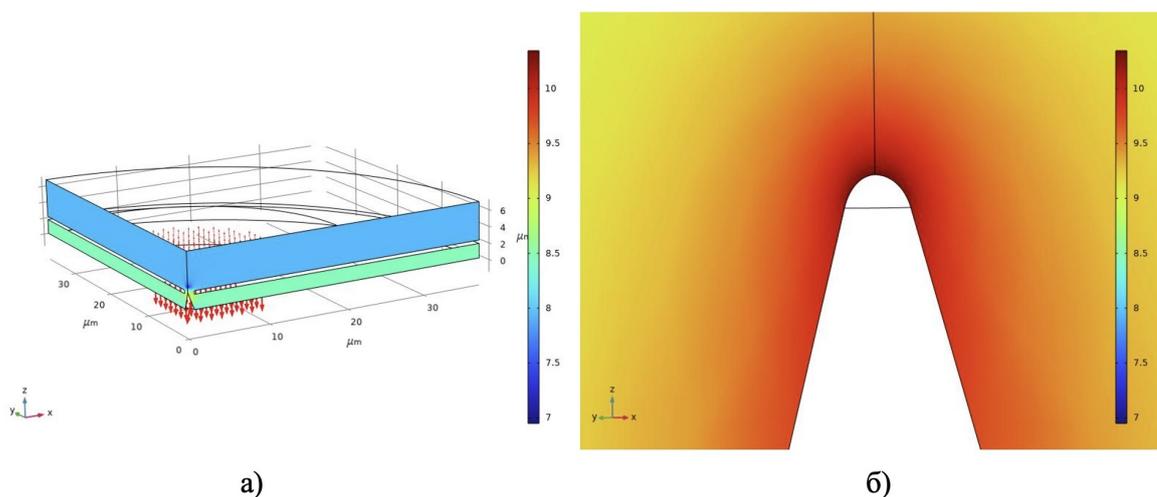
В случае, когда поле является стационарным, появляется возможность значительного снижения как временных, так и вычислительных затрат. Для этого при расчете электростатического поля и потенциала используется стационарный решатель, а за расчет движения частиц отвечает нестационарный решатель, необходимый для интегрирования уравнений, описывающих движение пучка электронов в вычислительной области.

В частности, для решения электростатической задачи в рамках построенной модели используется итерационный решатель сопряженных градиентов, использующий итерационный метод сопряженных градиентов, предназначенный для линейных систем вида  $Ax = b$ , где матрица  $A$  положительно определена и симметрична (эрмитова) — в этом случае решатель задействует меньше памяти и требует меньше времени для получения результатов [7]. В результате решения электростатической задачи получены распределения электрического потенциала (рис. 15) и поля (рис. 16).



**Рис. 15.** Распределение электрического потенциала (в Вольтах).

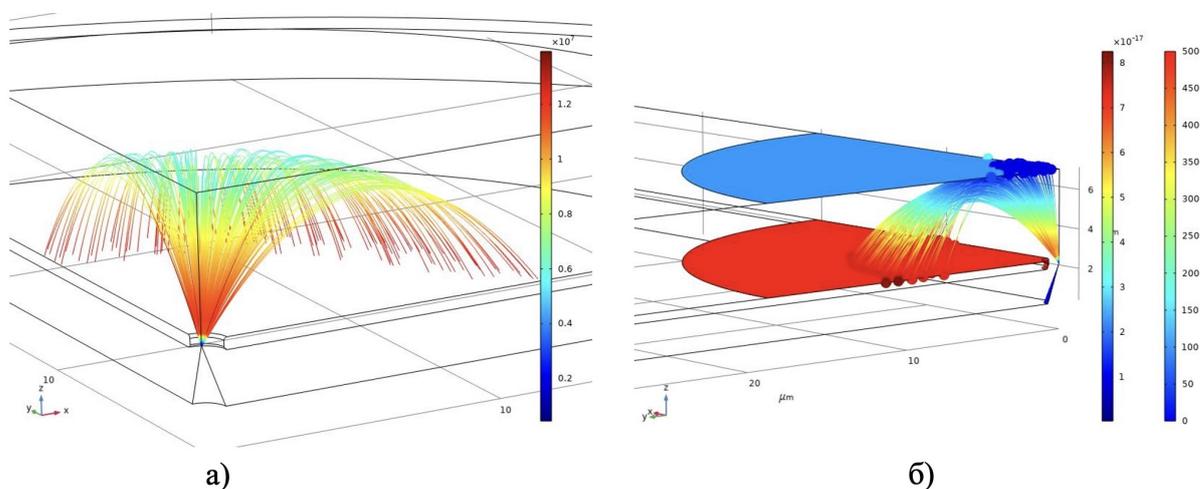
На рис. 16б показана напряженность электрического поля вблизи эмиттера. Так, вблизи эмиссионной поверхности, обладающей значительной кривизной, электрическое поле принимает наибольшее значение и быстро спадает по мере отдаления от эмиттера.



**Рис. 16.** Результат расчета электростатического поля: а) распределение по всей вычислительной области, б) распределение вблизи эмиссионной поверхности.

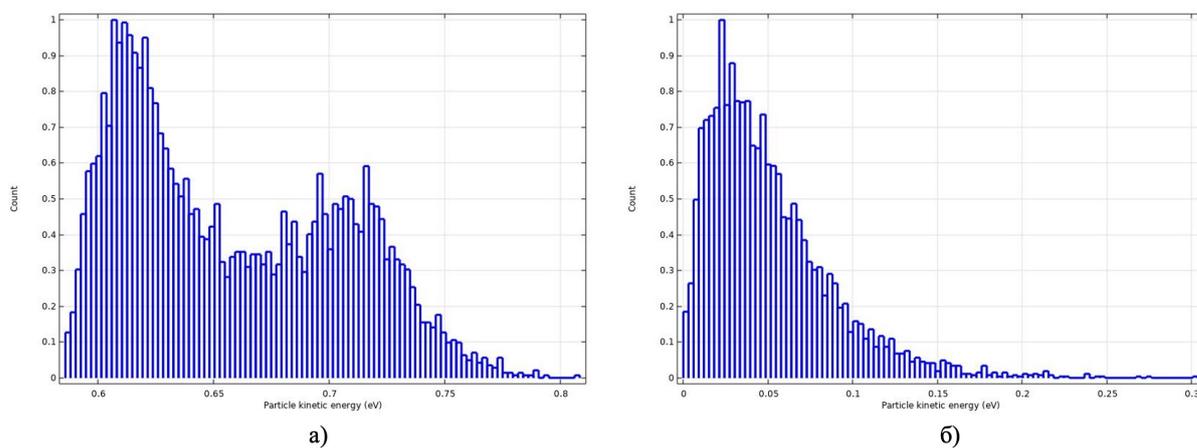
Задача траекторного анализа решалась в рамках нестационарного ис-

следования. При этом входными данными является построенное электрическое поле для учета влияния на испускаемые частицы. В данном исследовании используется нестационарный решатель. В частности, в данной модели был задействован итерационный решатель GMRES, использующий метод обобщенной минимальной невязки и требующий большее количество итераций для получения результата. В итоге были рассчитаны траектории модельных частиц, представленные на рис. 17, где синим и красным отмечены плоскости анода и модулятора соответственно, а точками тех же цветов — окончания траекторий частиц, попавших на данные плоскости. Общий катодный ток вычисляется в соответствии с соотношением (7).



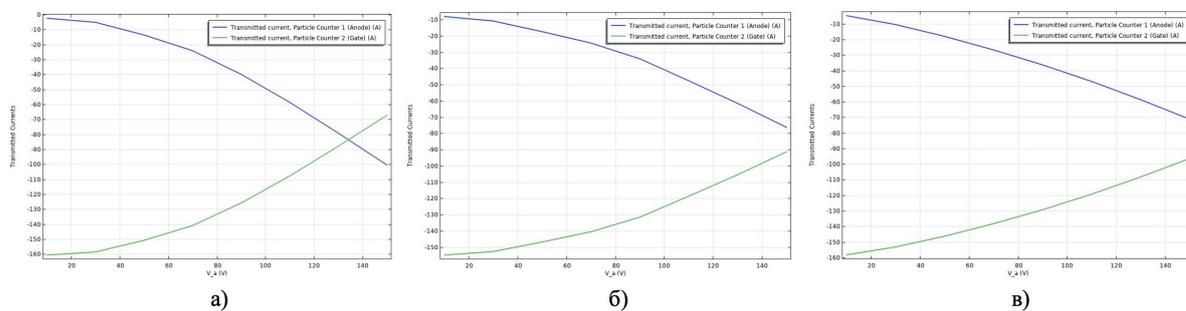
**Рис. 17.** Результат расчета траекторий модельных частиц: а) общий вид движения пучка, б) вид движения пучка с указанием частиц, достигающих модельных плоскостей анода (синий) и модулятора (красный).

Как упоминалось ранее, помимо случая с распределением начальных скоростей частиц по Максвеллу и с постоянной начальной скоростью, рассматривался свойственный карбиду кремния случай, когда начальные скорости частиц распределены в соответствии с бимодальным законом. На рис. 18 представлены модельные энергетический спектры в двух соответствующих случаях.



**Рис. 18.** Распределение частиц по энергиям в начальный момент времени для случаев: а) бимодального распределения, б) распределения по Максвеллу.

В параметрическом исследовании с постоянным потенциалом на модуляторе и переменным на аноде получены следующие результаты (рис. 19), иллюстрирующие различие в ключевой величине электронного тока, измеряемого на аноде и модуляторе, в зависимости от вида распределения начальных скоростей и энергий частиц на катоде.



**Рис. 19.** Вольт-амперные характеристики в случае: а) случайного значения начальной скорости с бимодальным распределением, б) распределения по Максвеллу, в) постоянного значения начальной скорости.

## Заключение и выводы

В результате работы над поставленными задачами по созданию компьютерной модели автоэмиссионного электронно-оптического источника с различными начальными распределениями скоростей испускаемых частиц и с присущими данным системам особенностями моделирования, связанными с многомасштабностью, получены следующие результаты и выводы::

1. Проведено практическое изучение среды компьютерного моделирования COMSOL Multiphysics, создана вычислительная область в данной среде, соответствующая конфигурации автоэмиссионного катодно-модуляторного узла, как важнейшего структурного элемента электронно-оптической системы;
2. Построена компьютерная модель с учетом определяемых пользователем значений начальных скоростей электронов, декомпозиции вычислительной области с различной детализацией сетки, сформулированы соответствующие начально-краевые условия с соотношением Фаулера — Нордгейма для эмиттированных частиц;
3. Реализован вычислительный эксперимент с инъекцией модельных частиц по полученному в натурном эксперименте распределению начальных значений скоростей, определены электронные траектории и токовые характеристики автоэмиссионной электронно-оптической системы. Проведен сопоставительный анализ случаев бимодального и максвелловского начальных распределений скоростей, а также случая постоянного значения начальной скорости.

Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Нанотехнологии» и «Вычислительный центр».

## Список литературы

- [1] Егоров Н. В., Шешин Е. П. Автоэлектронная эмиссия. Принципы и приборы. М: Интеллект, 2011, 703 с.
- [2] J. Webster, Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering, 2013, 29 с.
- [3] S. Tsujino, On the brightness, transverse emittance, and transverse coherence of field emission beam // Vac. Sci. Technol. B 40, 030801, 2022, 12 с.
- [4] K. Nikiforov, V. Trofimov, N. Egorov et al. The Energy Spectrum of Field Emission Electrons from 4H Silicon Carbide // 2020 33rd International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC), IEEE, art. num. 9203525, 2023.
- [5] Шешин Е. П., Лобанов В. М., Чадаев Н. Н., Лобанов С. В., Полевая электронная спектроскопия оксидных катодов // Журнал радиоэлектроники, 2022, 11 с.
- [6] Кузнецова М. А., Лучинин В. В. Формирование карбидокремниевых автоэмиссионных острий методом острорфокусированного ионного пучка // Нано- и микросистемная техника, № 12, 2012, с. 35.
- [7] COMSOL Multiphysics Reference Manual, 2019, 1742 с.
- [8] Particle Tracing Module User's Guide, 2018, 326 с.
- [9] Энциклопедия COMSOL по модулю электростатики: <https://www.comsol.ru/multiphysics/electrostatics-theory?parent=electromagnetics-072-162> (дата обращения 26.05.23)
- [10] Liseikin V. D. Grid generation methods. Netherlands: Springer, 2010. 390 p.
- [11] Василевский Ю. В., Данилов А. А., Липников К. Н. Чугунов В. Н. Автоматизированные технологии построения неструктурированных расчетных сеток. М.: Физматлит, 2016. 216 с.
- [12] Oberdorfer C. Numeric simulation of atom probe tomography. University of Munster, PhD Dissertation, 2014. 175 p.