

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»

На правах рукописи

Кретов Вадим Игоревич

**Математическое моделирование теплопереноса с учетом
плавления в коническом катоде**

РЕЗЮМЕ ДИССЕРТАЦИИ

на соискание учёной степени кандидата наук
по прикладной математике НИУ ВШЭ

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор
Данилов Владимир Григорьевич

Москва — 2019

Актуальность темы исследования

Эмиссия электронов из твёрдого тела является интересным явлением, имеющим различные применения на практике. В частности, благодаря электронной эмиссии работают электронно-лучевые приборы, электронные микроскопы и другие устройства.

В данной работе исследуется эмиссия из конических автоэмиссионных катодов малых размеров. Такие катоды применяются в автоэлектронной микроскопии и электронной литографии. Было объявлено о работах по созданию дисплея на основе автоэлектронных катодов малого размера. Катоды изготавливают из разных материалов: вольфрама, кремния, других металлов и полупроводников. Мы рассматриваем катоды, изготовленные из кремния, хотя модель может быть применена и для катодов из других материалов, причем как металлов, так и полупроводников.

Существенной и до конца не изученной на данный момент проблемой является деградация автоэмиссионных катодов в процессе эмиссии. Деградация вызвана сильным разогревом катодов под действием протекающего сквозь них электрического тока, разогрев приводит к частичному плавлению катода и нарушению его геометрии. Поэтому моделирование распределения тепла в катоде, образования участков с жидкой фазой и движение свободных границ раздела фаз имеет большое значение для определения условий эксплуатации приборов, использующих автоэмиссионные катоды.

Помимо разогрева под действием протекающего тока, существует еще один эффект, влияющий на температуру катода — эффект Ноттингама, заключающийся в охлаждении острия катода во время эмиссии. Этот эффект также учитывается в данной работе.

Степень разработанности научной проблемы

Модель распределения тепла в катоде рассматривалась в [8], но в ней не учитывалась возможность плавления катода. Кроме того, в [8] используется аппроксимация Фаулера-Нордгейма для вычисления величины плотности эмиссионного тока, хотя эта аппроксимация неприменима при высоких температурах, которые достигаются при автоэлектронной эмиссии. В настоящей работе эти особенности процесса эмиссии учтены.

Формулы для плотности тока эмиссии в полупроводниковых катодах наиболее подробно рассмотрены в [9], [10] и [11]. Стоит отметить, что теория автоэлектронной эмиссии из полупроводников развивалась еще в 50-х и 60-х годах XX века, и в основном представлена в работах Р. Страттона (например, [11]). Однако, не все предсказания теории Страттона подтвердились [10]. Поэтому в данной диссертации используются более современные результаты, полученные в основном, в [10].

Математическая модель теплопереноса основывается на работах Каджиналпа [12, 13, 14], в которых предложена регуляризация для задачи Стефана-Гиббса-Томсона в виде системы фазового поля. Строго регуляризация была доказана в работах [15] и [16]. В последней работе В.Г. Данилова, Г.А. Омельянова, Е.В. Радкевича было предложено определение обобщенного решения, которое допускает предельный переход от системы фазового поля к задаче Стефана-Гиббса-Томсона. Кроме этого, подробно рассмотрена задача Стефана в монографии [17] (и большом цикле других работ Мейрманова, ссылки на которые есть в этой монографии). В работах Мейрманова подробно исследованы свойства обобщенного решения задачи Стефана и построен пример неклассического решения (mushy region). Система фазового поля применялась в работе А.М. Лашина для моделирования кристаллизации чистого металла (см. [18]). В монографии [19] получено точное решение

задачи Стефана и представление решения в виде интегралов и рядов, а также рассмотрены численные методы решения. Вопросы, связанные с численным решением уравнения теплопроводности, в том числе задачи Стефана, подробно рассмотрены в [20]. Еще одной работой, касающейся задачи Стефана, является [21].

В диссертации применяется математическая модель в виде системы фазового поля. Для предельного перехода от системы фазового поля к задаче Стефана-Гиббса-Томсона доказана асимптотическая оценка, включающая малый параметр системы фазового поля и константы из условия Гиббса-Томсона. Оценка гарантирует корректность предельного перехода в случае, если эти константы малы. Причем, оценка получена как для точного решения системы фазового поля, так и для приближенного численного решения, построенного с помощью метода конечных разностей.

Цель и задачи диссертационной работы

Главная цель диссертационного исследования — создание модели теплопереноса в коническом автоэмиссионном катоде с учетом возможности плавления и эффекта Ноттингама, и численный анализ теплового режима работы эмиттера.

Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи:

1. Построение модели теплопереноса в коническом автоэмиссионном катоде на основе системы фазового поля.
2. Обоснование корректности предельного перехода от системы фазового поля к системе Стефана-Гиббса-Томсона.
3. Построение алгоритма вычисления плотности эмиссионного тока.
4. Модификация системы фазового поля для учета образования области жидкой фазы.

5. Реализация комплекса программ для выполнения численного моделирования и анализа результатов.

Научная новизна

В работе представлена новая математическая модель, описывающая теплоперенос и плавление в коническом полупроводниковом автоэмиссионном катоде малого размера. Эта модель включает уравнение теплопроводности с правой частью, моделирующей джоулев нагрев, уравнение Аллена-Кана, описывающее движение границ раздела твердой и жидкой фаз с помощью функции порядка, уравнение для потенциала электрического поля. Приведены и проанализированы результаты вычислений, выполненных с помощью этой модели. Также предложен новый метод моделирования зарождения области жидкой фазы в катоде¹.

Обоснованность и достоверность результатов

Результаты, изложенные в диссертационной работе, получены при помощи строгих математических методов, таких как асимптотические методы, методы исследования нелинейных уравнений математической физики и методы численного решения дифференциальных уравнений с помощью конечных разностей. Все новые утверждения, сформулированные в диссертационной работе, строго доказаны. Решения полученных уравнений проиллюстрированы с помощью их численного решения с использованием алгоритма, основанного на разностных схемах, удовлетворяющих принципу максимума. При этом вычислительные алгоритмы и комплекс программ на их основе протестирован на известных точных решениях уравнений, составляющих математическую модель.

¹Метод добавления зародышей отличается от описанного в [22]

Положения, выносимые на защиту

1. Построена математическая модель для аналитического и численного анализа теплопереноса и процессов движения свободных границ в коническом катоде малых размеров, основанная на системе фазового поля. В модели учтены эффект Ноттингама и процессы теплоотвода.
2. Исследован предельный переход от разностной схемы для системы фазового поля к задаче Стефана-Гиббса-Томсона. Показано, что построенная математическая модель является регуляризацией физической задачи о теплопереносе со свободной границей.
3. Применительно к построенной математической модели разработан оригинальный алгоритм вычисления плотности эмиссионного тока, заменяющий известную аппроксимацию Фаулера-Нордгейма.
4. Предложена модификация построенной модели, предназначенная для моделирования зарождения области жидкой фазы в катоде.
5. Создан комплекс компьютерных программ, реализующий построенную модель. С его помощью проведен численный анализ зависимости температуры от физических параметров катода, а также анализ зарождения области жидкой фазы, выявлены определяющие параметры. Полученные результаты вычислительного эксперимента находятся в согласии с экспериментальными данными [23].

Методы исследования

Для решения поставленной задачи используются теоретические методы исследования нелинейных уравнений математической физики и методы численного решения дифференциальных уравнений с помощью неявных конечно-разностных схем. Для обоснования применимости системы фазового поля

использовались элементы теории обобщенных функций. Конечно-разностные схемы решались с помощью метода переменных направлений. Численные расчеты были выполнены с помощью разработанного комплекса программ, написанного на языке C++. Использовались открытые библиотеки Qt, qwt и muParser.

Теоретическая и практическая значимость

Практическая и теоретическая значимость диссертационной работы определяется возможностью анализа теплового режима автоэмиссионных катодов для создания приборов, содержащих эти катоды. Моделирование хотя и не позволяет избежать экспериментальной работы по подбору оптимальных параметров катода, но может сократить ее объем. Также возможно дальнейшее развитие модели в сторону ее уточнения. Модель может использоваться, например, для исследования теплового режима катодов в кантилеверах электронных микроскопов. Результаты работы могут быть применены в исследованиях в области процессов теплопереноса и автоэлектронной эмиссии.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на следующих научно-технических конференциях и семинарах:

1. Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов МИЭМ, 2011 г.
2. The World Congress on Engineering and Technology (CET2012), Beijing, China, 2012.
3. 4-я международная конференция для молодых математиков по дифференциальным уравнениям и их приложениям, посвященная Я. Б. Лопатинскому, Донецкий национальный университет, г. Донецк, Украина, 2012 г.

4. Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов МИЭМ, 2014 г.
5. Международная конференция International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond (CSP2015), ВШЭ, 2015 г.
6. Научно-методологический семинар НИВЦ МГУ, 2016 г.
7. Научно-исследовательский семинар «Асимптотические методы в математической физике» под руководством д.ф.-м.н., профессора С. Ю. Доброхотова, ИПМех РАН, 2017 г.
8. Научно-исследовательский семинар «Асимптотические методы в математической физике» под руководством д.ф.-м.н., профессора С. Ю. Доброхотова, ИПМех РАН, 2018 г.

Тезисы докладов опубликованы в [24, 25, 26].

Личный вклад автора

Автор принимал активное участие в построении модели и анализе результатов моделирования. Также автор разработал комплекс компьютерных программ для проведения моделирования и провел серию численных экспериментов для проверки корректности программы и анализа результатов модели. Все результаты, выносимые на защиту, получены лично автором.

Общие выводы исследования

1. Построена математическая модель для аналитического и численного анализа теплопереноса и процессов движения свободных границ в коническом катоде малых размеров, основанная на системе фазового поля. С помощью граничных условий в модели учитывается эффект Ноттингама на верхнем основании катода и отвод тепла через нижнее основание.

2. Исследован предельный переход от разностной схемы для системы фазового поля к задаче Стефана-Гиббса-Томсона. Показано, что построенная математическая модель является регуляризацией физической задачи о теплопереносе со свободной границей.
3. Разработан алгоритм вычисления плотности эмиссионного тока, заменяющий аппроксимацию Фаулера-Нордгейма (непригодную в условиях рассматриваемой в работе задачи).
4. Предложена модификация построенной модели, предназначенная для моделирования зарождения области жидкой фазы в катоде.
5. Создан комплекс компьютерных программ, реализующий эту модель. Получено свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ.
6. С помощью построенной модели и программы проведен численный анализ зависимости температуры от различных физических параметров катода, а также анализ зарождения области жидкой фазы. При этом физические параметры соответствуют известным из эксперимента [23]. Выявлены существенные параметры, определяющие тепловой режим катода.

Публикации

Соискатель имеет 7 опубликованных работ по теме диссертации, из них 2 работы опубликованы в рецензируемых научных изданиях, входящих в систему цитирования Scopus, 1 работа опубликована в рецензируемом научном издании, входящем в список рекомендованных журналов НИУ ВШЭ. Получено одно свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. В публикациях содержатся все основные результаты диссертации. В

работах с соавторами соискателю принадлежит не менее 50 % результатов. Все положения, выносимые на защиту, принадлежат лично автору.

Результаты диссертации, выносимые на защиту, отражены в публикациях, перечисленных ниже.

Работы, опубликованные автором в рецензируемых научных изданиях, входящих в систему цитирования Scopus

1. Danilov V., Gaydukov R., Kretov V., Rudnev V. Modelling of Liquid Nuclei Generation for Field-Emission Silicon Nanocathode // IEEE Transactions on Electron Devices. 2014. Vol. 61. No. 12. — 1 а.л.
2. Rudnev V., Kretov V. I., Dyuzhev N. A., Makhaboroda M. A., Churilin M. N. Investigation of the thermal degradation of the silicon field-emission cathode as a two-phase system // Russian Microelectronics. 2012. Vol. 41. No. 7. P. 387–392. — 0,6 а.л.

Работы, опубликованные автором в рецензируемых научных изданиях, входящих в список рекомендованных журналов НИУ ВШЭ

3. Дюжев Н. А., Кретов В. И., Махиборода М. А., Руднев В. Ю., Чурилин М. Н. Исследование тепловой деградации кремниевого автоэмиссионного катода как двухфазной системы // Известия вузов. Электроника. 2011. №4(90), с.23–29. — 0,5 а.л.

Работы, опубликованные в других изданиях

4. Кретов В. И. Вычисление напряженности электрического поля в кремниевом автоэмиссионном катоде // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. 2017. Том 16, №1, с.59–68. — 0,6 а.л.
5. Свид. №2013661633 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Моделирование теплопереноса в

малоразмерном коническом эмиссионном катоде. / Гайдуков Р. К., Данилов В. Г., Кретов В. И., Руднев В. Ю.; правообладатель Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (RU). — Заявл. 25.10.2013; опубл. 11.12.2013, Реестр программ для ЭВМ. — 1 с.

6. Данилов В. Г., Руднев В. Ю., Гайдуков Р. К., Кретов В. И. Математическое описание режима «плавление-затвердевание» в автоэмиссионном катоде при учете эффекта Ноттингама // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. 2013. Том 9, №1, с.39–84. — 2,5 а.л.
7. Данилов В. Г., Руднев В. Ю., Гайдуков Р. К., Кретов В. И. Математическое моделирование эмиссии из катодов малых размеров // Горячая линия–Телеком. 2014. — 232 с. — 12 а.л.

Список литературы

8. Фурсей Г. Н., Глазанов Д. В., Баскин Л. М. Кинетика импульсного нагрева острых автокатодов реальной геометрии эмиссионным током высокой плотности // Журнал технической физики. 1989. Т. 59, № 5. С. 60–68.
9. Christov S. G. General theory of electron emission from metals // Physica Status Solidi (B). 1966. Vol. 17, no. 1. P. 11–26.
10. Ding M. Field emission from silicon: PhD thesis // Massachusetts Institute of Technology. 2001.
11. Stratton R. Theory of field emission from semiconductors // Physical Review. 1962. Vol. 125, no. 1. P. 67–82.

12. Caginalp G. Stefan and Hele–Shaw type models as asymptotic limits of the phase field equations // *Physical Review A*. 1989. Vol. 39. P. 5887–5896.
13. Caginalp G., Chadam J. Stability of interfaces with velocity correction term // *Rocky Mountain Journal of Mathematics*. 1991. Vol. 21, no. 2. P. 617–629.
14. Caginalp G. An analysis of a phase field model of a free boundary // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1986. Vol. 92, no. 3. P. 205–245.
15. Плотников П. И., Старовойтов В. Н. Задача Стефана с поверхностным натяжением как предел модели фазового поля // *Дифференциальные уравнения*. 1993. Т. 29, № 3. С. 461–471.
16. Omel'yanov G. A., Radkevich E. V., Danilov V. G. Stability and “stabilization” of the solution of the phase field system // *Nonlinear analysis and applications: proceedings of Banach Center*. Vol. 6. 1995.
17. Мейрманов А. М. Задача Стефана. Наука, 1986. 238 с.
18. Лашин А. М. Исследование динамики фазовых переходов первого рода в процессе направленной кристаллизации чистого металла в переохлажденный расплав на базе модели фазового поля. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.
19. Рубинштейн Л. И. Проблема Стефана. Рига: Звайгзне, 1967. 458 с.
20. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
21. Данилюк И. И. О задаче Стефана // *Успехи математических наук*. 1985. Т. 40, № 5. С. 133–185.

22. Яковлев Н. Н., Лукашев Е. А., Радкевич Е. В. Проблемы реконструкции процесса направленной кристаллизации // Доклады академии наук. 2008. Т. 421, № 5. С. 625–629.
23. Исследование эмиссионных свойств кремниевых катодов различной геометрии / Н. А. Дюжев, С. А. Гудкова, М. А. Махиборода [и др.] // Вакуумная наука и техника, материал XII научно-технической конференции с участием зарубежных специалистов / под ред. Д. В. Быкова. М.: МИЭМ, 2005. С. 221–224.
24. Кретов В. И. Моделирование динамики взаимодействия свободных границ в задаче Стефана-Гиббса-Томсона в конической области // Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов МИЭМ. Тезисы докладов. Москва: 2011.
25. Кретов В. И. Моделирование образования области жидкой фазы в коническом автоэмиссионном катоде // Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов МИЭМ. Тезисы докладов. Москва: 2014.
26. Danilov V. G., Rudnev V. Y., Kretov V. I. Simulation of the heat transmission in the nano-sized cathode // Fourth International Conference for Differential Equations and Applications dedicated to Ya. B. Lopatinskii, Book of Abstracts. Donetsk: 2012. P. 94.