

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ РЕЖИМА «ПЛАВЛЕНИЕ-ЗАТВЕРДЕВАНИЕ» В АВТОЭМИССИОННОМ НАНОКАНОДЕ ПРИ УЧЕТЕ ЭФФЕКТА НОТТИНГАМА*

Данилов В.Г., Руднев В.Ю., Кретов В.И., Гайдуков Р.К.

*Лаборатория математических методов естествознания
при Национальном исследовательском университете «Высшая школа экономики»*

vgdanilov@mail.ru

Поступила 14.08.2012

Мы предлагаем новый метод моделирования теплопереноса в автоэмиссионном нанокатоде. Основной модели является модифицированная задача Стефана со специальными условиями на свободной границе и вершине катода (условие Ноттингама). Для численного моделирования используется модификация системы фазового поля. С помощью численного моделирования исследуется влияние эффекта Ноттингама на динамику распространения границы раздела фаз в катоде.

УДК 537.533.2 : 517.927.2

1. Введение

Математическое описание тепловых процессов в катодах при автоэмиссии имеет давнюю историю [1-3, 5, 7, 36]. Нетривиальное явление, сопровождающее данный процесс, – это эффект Ноттингама, который обусловлен взаимодействием эмиссионных электронов с кристаллической решеткой вблизи поверхности катода. Математически этот эффект описывается нелинейным краевым условием третьего рода

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right|_{S_e} = f(T, j, E_F), \quad (1.1)$$

* Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

где T – температура на эмитирующей электроны поверхности S_e , \mathbf{n} – нормаль, j и E_F соответственно плотность тока и напряженность электрического поля в точках S_e . Функция $f(T, j, E_F)$ выписывается явно (см. раздел 2 и 3) и обладает тем свойством, что при некотором значении $T = T^*$, называемом температурой инверсии, эта функция меняет знак. При $T < T^*$ краевое условие Ноттингама – это условие нагрева, а при $T > T^*$ – условие охлаждения. Величина T^* вычислена для различных материалов (есть аналитическое выражение для T^* через параметры, характеризующие материал катода, см. ниже (3.18), (3.23)).

Цель данной работы – проанализировать математическую модель процесса распространения тепла, включая явление проплавления, при автоэмиссии из кремниевого острейного катода малых (нано) размеров. Главной задачей является выяснение условий, при которых за счет эффекта Ноттингама происходит затвердевание острия катода, несмотря на значительную величину тока эмиссии. Эксперименты такого рода описаны, например, в работе [38]. Это, на первый взгляд, странное явление до сих пор не было подробно математически исследовано.

В изучаемой системе существенную роль играют две особенности. Во-первых, кремний – полупроводник, и поэтому эффектом Томсона можно пренебречь, см. [37]. Во-вторых, достаточно высокая теплопроводность материала (кремния) и малые размеры катода приводят к тому, что безразмерный коэффициент теплопроводности оказывается большим, что интуитивно понятно: в малой области температура быстро выравнивается. Данный момент вносит существенные сложности в алгоритм вычислений (большой коэффициент теплопроводности – это эквивалент больших времен).

Другим важным следствием малых размеров (малого радиуса острия) является увеличение напряженности электрического поля в окрестности острия примерно в 10^6 раз по сравнению с напряженностью приложенного внешнего поля.

Значительной дополнительной трудностью является наличие двухфазного состояния теплопроводящей среды: твердой и жидкой, и необходимость описания движения теплового фронта (границы раздела фаз). Здесь мы используем недавно разработанные новые математические подходы [21], [25-27] к построению решений дифференциальных уравнений для многофазных сред.

При моделировании автоэлектронной эмиссии мы не учитываем механических напряжений материала катода и не исследуем возможности вариации геометрии нанокатода (немного об этом сказано в разделе 6).

Мы сравниваем наши результаты с данными экспериментальных исследований [38]. В работе [38] (и [30]) авторы были склонны предполагать, что в экспериментах наблюдается процесс проплавления некоторого слоя катода с последующим его затвердеванием, но не было ясно, когда происходит затвердевание: уже после выключения тока, или в процессе автоэмиссии. Для тех параметров, которые приводились в [30],[38], результаты нашего математического моделирования не дали картины затвердевания. Однако, если изменить параметры, то в нашей модели, как раз, возникает эффект затвердевания острия катода, и именно в самом процессе протекания тока автоэмиссии.

Подробная математическая теория, включающая моделирование расплавления-кристаллизации, описана ниже. Здесь мы отметим только, что эффект Ноттингама не является монотонным относительно температуры. При увеличении температуры, правая часть в (1.1) возрастает, что приводит к охлаждению эмитирующей поверхности. В силу большой теплопроводности это приводит к охлаждению всего катода и затвердеванию (если они ранее появились) расплавленных зон. После этого теоретически процесс нагрева-охлаждения может повториться. Мы не наблюдали таких колебаний в численном эксперименте, по-видимому, в силу ограниченности вычислительных возможностей. Но даже и без этого, просто сам эффект немонотонного поведения свободной границы, разделяющей расплав и твердое вещество, которое мы наблюдаем при

моделировании данной системы, если отклониться от «экспериментальных» параметров [38], кажется очень интересным. С точки зрения теории нелинейных уравнений, свободная граница – это фронт нелинейной волны (решения уравнения Алена-Кана, см. (4.12)). Примеров немонотонного поведения нелинейных волн в реальных диссипативных системах известно не так уж и много.

Численные эксперименты позволили выделить параметры, от которых существенно зависит характер процесса. К ним относятся приложенное напряжение, радиус скругления острия катода (что понятно) и параметры охлаждения основания катода.

Менее существенное влияние оказывает комбинация параметров, входящая в безразмерный коэффициент теплопроводности и «форм-фактор», который может быть введен для учета различия, которое вносит учет реальной геометрии острия по сравнению с решением в полупространстве квантово-механической задачи о туннелировании электронов (эмиссии электронов из материала катода).

При изложении материала мы придерживались следующего плана. В Разделе 2 приводится математическая модель автоэмиссионной эмиссии, учитывающая возможное расплавление материала катода. В Разделе 3 приводятся формулы, описывающие автоэлектронную эмиссию и уточняющие математическую модель из предыдущего раздела. В Разделе 4 описывается модель фазового поля, позволяющая эффективно моделировать теплоперенос с учетом возможного проплавления. В Разделе 5 обосновывается связь численного решения системы фазового поля с решением задачи Стефана-Гиббса-Томсона с учетом малых размеров катода. В Разделе 6 приведенная выше модель автоэлектронной эмиссии конкретизируется в применении к конкретным размерам, форме, материалу катода и внешним условиям, при которых происходит автоэмиссия. Приводится обезразмеривание с учетом физических параметров, характеризующих процесс теплопереноса. Раздел 7 посвящен описанию плотности тока внутри катода и тока эмиссии, а также эффекта Ноттинггама для рассматриваемого в работе случая. В Разделе 8 излагается алгоритм вычислений. В Разделе 9 приводятся результаты численного моделирования.

Авторы выражают глубокую благодарность М.В. Карасеву, прочитавшему статью в рукописи, за многочисленные дискуссии и комментарии. Без дружеской помощи М.В. Карасева, участвовавшего также в определении объекта исследования, статья вряд ли была бы написана.

2. Модель теплопереноса

Напомним, что электронной автоэмиссией называется явление испускания электронов в вакуум под действием электрического поля. Для создания поля достаточной для автоэмиссии силы в случае катода, имеющего форму иглы с радиусом скругления острия порядка нескольких нанометров, требуется приложить напряжение всего лишь в десятки вольт. Однако, в случае малых размеров, возникает опасность разрушения (расплавления) катода под действием джоулева тепла, генерируемого протекающим через катод током. В данной части обзора мы рассмотрим методы моделирования теплопереноса в подобном наноразмерном катоде.

Мы исходили из следующих размеров кремниевого катода, использовавшегося в ходе физических экспериментов [30], [38].

Высота катода	10–15 мкм
Диаметр основания катода	6 мкм
Радиус скругления вершины катода	15 нм
Угол при вершине катода	20°

Математическая модель процесса теплопереноса при автоэмиссии хорошо известна, см., например, [28]:

$$\rho c(T) \frac{\partial T}{\partial \tilde{t}} = \nabla(\lambda(T) \nabla T) + F, \quad (2.1)$$

$$\operatorname{div} j = 0, \quad (2.2)$$

Здесь \tilde{t} – реальное время, T – температура вещества катода, ρ , c , λ – плотность, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности материала катода, j – плотность тока внутри катода, F – плотность мощности тепловыделения, обусловленная эффектами Джоуля и Томсона. Функция F имеет вид

$$F = \frac{1}{\sigma_e(T)} j^2(\tilde{r}, \tilde{t}) + g(\tilde{t}) \langle j, \nabla T \rangle, \quad (2.3)$$

где \tilde{r} и \tilde{t} – реальные физические координата и время, $\sigma_e(T)$ – удельная проводимость катода, $g(t)$ – коэффициент Томсона. Плотность тока задается формулой

$$j = -\sigma_e(T) [\nabla \Psi + A(T) \nabla T], \quad (2.4)$$

где Ψ – потенциал электрического поля в катоде, $A(T)$ – коэффициент термоэдс.

Мы будем рассматривать модификацию этой модели, приспособленную для изучения катода малых размеров, изготавливаемых из кремния. Последнее приводит к тому, что эффектом Томсона можно пренебречь, так как кремниевый эмиттер имеет смешанный (электронно-дырочный) тип проводимости и вклады электронов и дырок в величину термоэдс примерно компенсируют друг друга (т.е. $A(T) \approx 0$). Таким образом, в формуле (2.3) имеем

$$g(\tilde{t}) = 0. \quad (2.5)$$

Однако, указанная модель недостаточна для исследования теплопереноса, сопровождающегося фазовым переходом (расплавлением или кристаллизацией). Для того чтобы описать динамику границы раздела фаз при фазовых переходах, уравнение теплопроводности (2.3) необходимо дополнить условием Стефана на свободной границе (границе раздела фаз) $\Gamma(\tilde{t})$:

$$k \left[\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\Gamma(\tilde{t})} = -\mathbf{v}, \quad (2.6)$$

где \mathbf{n} – внешняя нормаль к свободной границе. Нормаль направлена из твердой фазы ($T = T_s$) в жидкую ($T = T_l$). В условии (2.6) величина \mathbf{v} – это нормальная скорость свободной границы $\Gamma(\tilde{t})$, и

$$\left[\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\Gamma(\tilde{t})} = \langle \nabla T_s - \nabla T_l, \mathbf{n} \rangle.$$

Кроме того, на свободной границе $\Gamma(\tilde{t})$ должно выполняться условие Гиббса-Томсона

$$(T - T_0) \Big|_{\Gamma(\tilde{t})} = -\alpha \sigma \mathbf{v} - \sigma K, \quad (2.7)$$

где K – средняя кривизна свободной границы, T_0 – температура плавления вещества катода, α , σ – некоторые константы, определяемые физическими параметрами среды (α определяет так называемое время релаксации системы, σ определяет поверхностное натяжение). Закон (2.7) определяет простейшую (линейную) зависимость скорости свободной границы от температуры и кривизны.

Подчеркнем, что в общем случае нужно использовать именно условие (2.7), а не часто встречающееся условие

$$T \Big|_{\Gamma(\tilde{t})} = T_0. \quad (2.8)$$

Только в случае $\sigma \ll 1$ и $\alpha \sigma \ll 1$ из условия (2.7) получается (2.8).

Далее, нужно добавить краевое условие определяющие тепловой баланс при термоэмиссии с острия катода $\tilde{r} = \tilde{R}_0$. Оно описывается формулой

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial \tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=\tilde{R}_0} = \frac{j_{em}}{e} E \Big|_{\tilde{r}=\tilde{R}_0} - \psi \sigma_{SB} T^4 \Big|_{\tilde{r}=\tilde{R}_0}, \quad (2.9)$$

см. [28]. Здесь σ_{SB} – постоянная Стефана-Больцмана, e – заряд электрона, ψ – коэффициент черноты, j_{em} – плотность эмиссионного тока, E – средняя энергия эмитируемых электронов. Заметим, что эффект Ноттингама описывается вторым слагаемым в правой части (2.9), первое слагаемое задает дополнительное условие излучения.

Таким образом, уравнения (2.1)–(2.4), (2.6), (2.7), (2.9) определяют модель, которую мы используем при исследовании теплопереноса в наноканале. Понятно, что они должны быть дополнены начальными и краевыми условиями на внешних границах катода.

3. Термополевая эмиссия и эффект Ноттингама

В этом разделе мы рассмотрим некоторые теоретические формулы, описывающие термополевую (TF) эмиссию электронов, основываясь на материале работы [1]. К сожалению, как мы поясним ниже, в этой работе содержатся существенные неточности. Тем не менее, общую математическую модель процесса эмиссии электронов и основные методы ее исследования эта работа достаточно хорошо проясняет.

Теория TF-эмиссии содержится, например, в [2–9]. Важную роль в ней имеет эффект Ноттингама: явление, когда катод охлаждается, если средняя энергия эмитируемых электронов лежит ниже уровня энергии Ферми ζ материала катода.

Рассмотрим основные теоретические сведения, использующиеся при исследовании эмиссии.

Поверхностная плотность эмиссионного тока определяется формулой

$$j_{TF} = e \int_{-\infty}^{\infty} P(W) dW,$$

где выражение

$$W = \frac{p_x^2}{2m_e} + V(x)$$

задает энергию электронов, вылетающих по нормали к поверхности эмиттера и $P(W) dW$ – число электронов в интервале энергий dW из расчета на элемент времени и элемент площади.

Обычно делается два предположения. Первое: электроны внутри эмиттера подчиняются распределению Ферми-Дирака, таким образом, что число электронов, находящихся на поверхности эмиттера из расчета на интервал времени и элемент площади, определяется функцией

$$N(W, T, \phi) = \frac{4\pi m_e kT}{h^3} \ln(1 + e^{-(W+\zeta)/kT}), \quad (3.1)$$

которую называют функцией поддержки. Здесь ζ и T – работа выхода и температура эмиттера. Второе: используется WKB-асимптотика для вероятности туннельного перехода через потенциальный барьер на поверхности эмиттера

$$D(E_F, W) = \left[1 + \exp \left(-2i\hbar^{-1} \int_{x_1}^{x_2} p(\xi) d\xi \right) \right]^{-1}, \quad (3.2)$$

где x_1 и x_2 – точки экстремума потенциала. Потенциал приближенно задается формулой

$$V(x) = \begin{cases} -W_a, & x < 0, \text{ внутри эмиттера,} \\ -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x} - eE_F x, & x > 0, \text{ снаружи эмиттера,} \end{cases} \quad (3.3)$$

где константа $-W_a$ намного ниже, чем значение энергии Ферми $-\zeta$. В TF-теории эта константа, обычно, может быть заменена на $-\infty$.

Несмотря на то, что формулы (3.1), (3.2) и (3.3) выводятся с использованием приближенных методов, мы, ссылаясь на эти формулы, будем считать их «точными». Тем самым, не рассматриваем ситуации, когда, например, ВКВ-асимптотику нельзя применять (для полей очень большой силы $\approx 10^{10}$ В/м, когда потенциальный барьер на поверхности эмиттера становится очень узким).

С учетом данных определений аппроксимация для $P(W)$ имеет вид

$$P(W) = D(W)N(W)dW,$$

откуда следует, что

$$\begin{aligned} j_{TF}(T, E_F, \zeta) = & \\ = \frac{4\pi m_e k T e}{h^3} & \left\{ \int_{-\infty}^{W_l} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{W + \zeta}{kT} \right) \right) \times \right. \\ \times \left[1 + \exp \left(\frac{\sqrt{2}}{3} (4\pi\epsilon_0)^{-3/4} \left(\frac{m_e^2 e^5}{\hbar^4 E_F} \right)^{1/4} y^{-3/2} v(y) \right) \right]^{-1} & (3.4) \\ & \left. + \int_{W_l}^{\infty} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{W + \zeta}{kT} \right) \right) dW \right\}, \end{aligned}$$

где

$$W_l = -\sqrt{\frac{e^3 E_F}{8\pi\epsilon_0}}, \quad y = \sqrt{\frac{e^3 E_F}{4\pi\epsilon_0}} \frac{1}{|W|} \quad (3.5)$$

и

$$v(y) = \begin{cases} \sqrt{1+y} \left[E \left(\frac{1-y}{1+y} \right) - yK \left(\frac{1-y}{1+y} \right) \right], & y \leq 1, \\ -\sqrt{\frac{y}{2}} \left[(y+1)K \left(\frac{y-1}{2y} \right) - 2E \left(\frac{y-1}{2y} \right) \right], & y > 1. \end{cases} \quad (3.6)$$

Через K и E обозначены эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно [13]. Формулу (3.4) для плотности тока эмиссии будем рассматривать как «точную».

Теперь рассмотрим приближенные формулы для тока эмиссии.

Вероятность туннельного перехода $D(W)$ может быть экспоненциально аппроксимирована вблизи значения энергии Ферми (аппроксимация Фаулера-Нордгейма). Это дает, см. [2],

$$\begin{aligned} j_{FN}(T, E_F, \zeta) = & \\ = \frac{e^3 E_F^2}{8\pi h \zeta^2 (\hat{y})} \exp \left(\frac{-4\sqrt{2m_e} \zeta^3}{3\hbar E_F} v(\hat{y}) \right) \left[\frac{\pi k T}{d(E_F, \zeta, \hat{y})} \right] \left[\sin \left(\frac{\pi k T}{d(E_F, \zeta, \hat{y})} \right) \right]^{-1}, & (3.7) \end{aligned}$$

где

$$\hat{y} = \sqrt{\frac{e^3 E_F}{4\pi\epsilon_0 \zeta}} \frac{1}{\zeta}, \quad (3.8)$$

$$t(\hat{y}) = v(\hat{y}) - \frac{2}{3} \hat{y} \frac{d v(\hat{y})}{d \hat{y}}, \quad (3.9)$$

$$d(E_F, \zeta, \hat{y}) = \frac{\hbar e E_F}{2\sqrt{2m\zeta} t(\hat{y})}. \quad (3.10)$$

Формула (3.7) известна как формула Фаулера-Нордхейма.

Более простой вариант формулы (3.7) иногда используется для значения температуры $T = 0$ и в предположении $t(\hat{y}) = 1$, $v(\hat{y}) = 1$ для того, чтобы избежать вычисления эллиптических интегралов. Но в такой упрощенной форме аппроксимация Фаулера-Нордхейма будет некорректна для некоторых значений амплитуды при всех значениях электрической напряженности и работы выхода. А точнее, несмотря на то, что $t(\hat{y}) \approx 1$ и $v(\hat{y}) \approx 1$ для слабых полей, абсолютная величина коэффициента

$$\frac{-4\sqrt{2m_e\zeta^3}}{3\hbar e E_F}$$

перед функцией $v(\hat{y})$ в показателе экспоненты в формуле (3.7) очень большая. Это приводит к тому, что даже небольшие отклонения v от 1 приводят к значительной ошибке при вычислении плотности тока j . Для значений напряженности электрического поля, встречающихся на практике, разброс в полученных по такому приближению значений плотности тока может быть порядка $10^2 - 10^6$ раз, что, конечно, неприемлемо.

Из рис. 1 также видно, что возможность использования аппроксимации Фаулера-Нордхейма (3.7) ограничена малыми значениями температуры. С другой стороны, выражение (3.7) в случае сильных полей не работает и при малых температурах из-за нулей синуса. Однако, на практике его используют, избегая вычисления общего интеграла (3.4).

Чтобы получить более точные и, одновременно, простые приближенные формулы для тока полевой эмиссии, можно использовать, например, аппроксимацию функции $v(y)$:

$$v(y) = 1 - y^{\beta_y}. \quad (3.11)$$

В этой формуле β_y – числовой параметр, который может быть оптимизирован для получения минимальной ошибки в интересующей нас области $y \in [0, 2]$. Хантш [12] дает более совершенную аппроксимацию $v(y)$ со сравнительно меньшей ошибкой. Аналогично,

$$\begin{aligned} t(y) &= 1 - \alpha_1 y^{\beta_1}, \\ t^2(y) &= 1 - \alpha_2 y^{\beta_2}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Эти формулы также дают подходящую аппроксимацию, поскольку функция $t(y)$ слабо меняется. Числовые значения параметров, средние ошибки и краткое описание метода оптимизации будет приведено ниже.

Формулы (3.11) и (3.12) могут служить для получения хорошей аппроксимации выражения Фаулера-Нордхейма (3.7). Но используются и более точные методы аппроксимации, в которых параметры оптимизируются в соответствии с «точной» плотностью тока, задаваемой формулой (3.4):

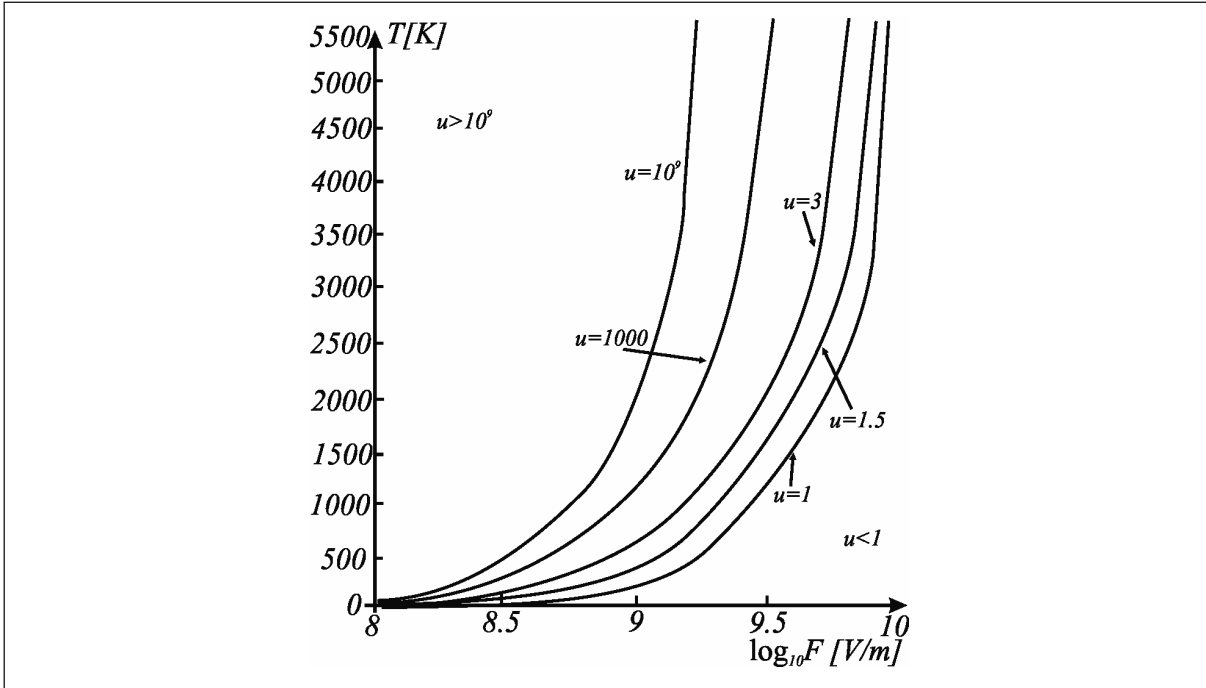


Рис. 1. Линии постоянства отношения $u = j/j_{FN}$ для работы выхода $\zeta = 3.5$ эВ.

$$j_{Fit, T=0}(E_F, \zeta) = \frac{q_1 E_F^{q_2}}{\zeta^{q_3} \left(1 + q_4 \frac{\zeta^{q_5}}{E_F^{q_6}}\right)} \exp\left(-q_7 \frac{\zeta^{q_8}}{E_F^{q_9}} + q_{10} \zeta^{q_{11}} E_F^{q_{12}}\right). \quad (3.13)$$

Заметим, что в общем случае ТФ-эмиссии получить простые приближенные формулы трудно, и приходится вычислять плотность эмиссионного тока непосредственно по формуле (3.4), что не всегда удается.

Обсудим теперь эффект Ноттингама.

Средняя энергия эмитирующих электронов определяется формулой

$$E = \frac{e}{j(T, E_F, \zeta)} \int_{-\infty}^{\infty} E P_E(E, T, E_F, \zeta) dE + \zeta, \quad (3.14)$$

где $E = p^2/2m_e + V$ – полная энергия электрона,

$$P_E(E, T, E_F, \zeta) = \int_{-\infty}^E N_E(E, T, \zeta) D(W, E_F) dW. \quad (3.15)$$

Если предположить, что эмитируемые электроны удовлетворяют распределению Ферми, а для вероятности туннельного перехода можно применить WKB-аппроксимацию, то

$$N_E(E, T, \zeta) = -\frac{4\pi m_e}{h^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{E + \zeta}{kT}\right) + 1}, \quad (3.16)$$

и $D(W, E_F)$ задается формулой (3.2). Вычисление «точного» значения E по рассматриваемым формулам приводит к вычислению j как двойного интеграла от сложных функций, содержащих эллиптические интегралы. Вычисление этих интегралов возможно только численными методами и довольно трудоемко.

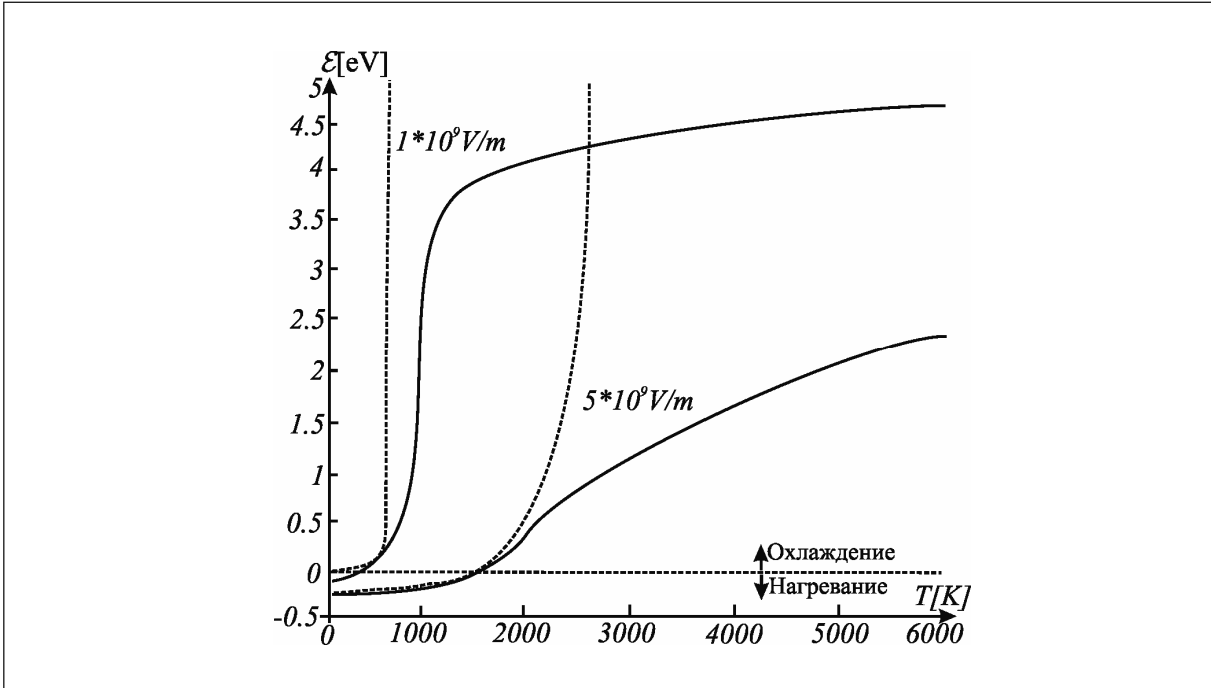


Рис. 2. Сравнение точной величины эффекта Ноттинггама (сплошная линия) с аппроксимацией Фаулера-Нордгейма (пунктирная линия) для работы выхода $\zeta = 4.5$ эВ.

При использовании аппроксимации Фаулера-Нордхейма интегралы могут быть вычислены аналитически, и в результате получим

$$E_{FN} = -\pi k T \cot\left(\frac{\pi T}{2 T^*}\right), \quad (3.17)$$

где

$$T^* = \frac{d(E_F, \zeta, \hat{y})}{2k} \quad (3.18)$$

– это так называемая инверсионная температура.

В интервале, когда температура ниже инверсионной температуры, эмиттер электронов нагревается, а в интервале температур выше T^* эмиттер остывает. На рис. 2 сравнивается значение энергии E , полученной с помощью аппроксимации Фаулера-Нордхейма, с ее точным значением для некоторых полей. Аппроксимация дает вполне удовлетворительный результат для температур $T \leq T^*$, но может оказаться, что аппроксимация неверна при $T > T^*$, когда котангенс терпит разрыв при $T = 2T^*$. Аппроксимация также становится непригодной для малых значений работы выхода и полей большой силы (рис. 3).

Реальные значения нагревания и охлаждения в соответствии с эффектом Ноттинггама пропорциональны jE . Поскольку $|E|$ и j относительно малы при $T < T^*$, можно заключить, что эффект Ноттинггама – это в основном эффект охлаждения. В области охлаждения $T > T^*$ и аппроксимация Фаулера-Нордгейма, очевидно, неверна.

Рассмотрим формулу для E (3.17) и учтем следующие аналитические факты:

$$a_{T^*} := \frac{d}{dT} E_{FN} \Big|_{T=T^*} = \frac{\pi^2 k_B}{2}, \quad (3.19)$$

$$a_\infty := \frac{d}{dT} E \Big|_{T \rightarrow \infty} = 2k_B. \quad (3.20)$$

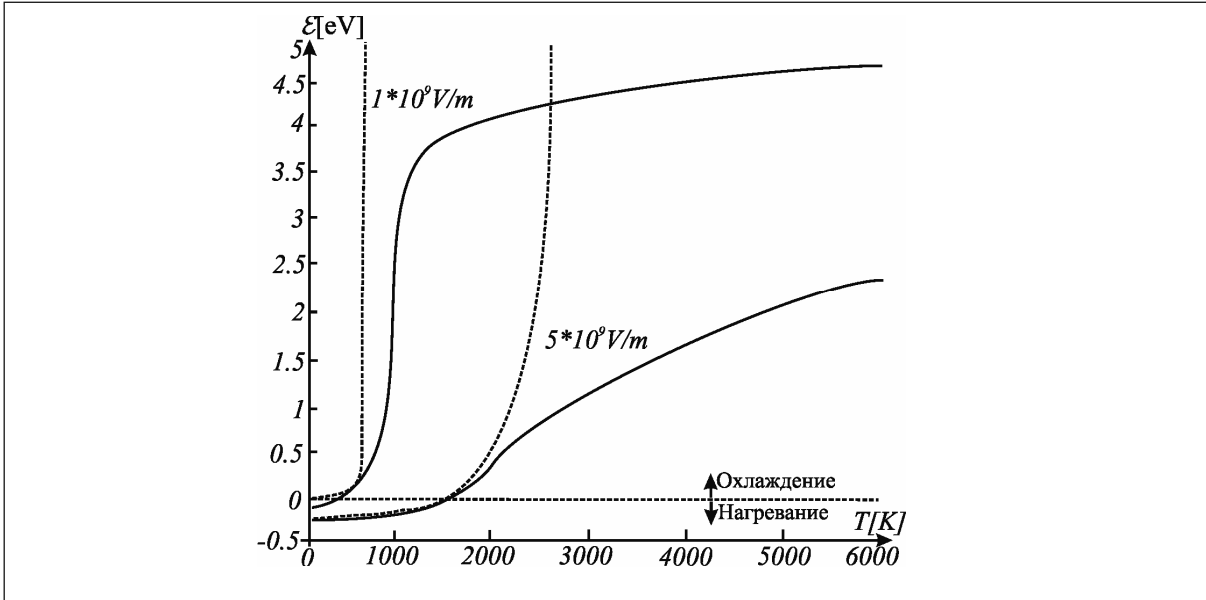


Рис. 3. Сравнение точной величины эффекта Ноттингама (сплошная линия) с аппроксимацией Фаулера-Нордгейма (пунктирная линия) для функции работы $\zeta = 2.5$ эВ.

Тогда аппроксимация энергии E записывается в виде

$$E_{Fit} = \begin{cases} -aa_T \frac{2}{\pi} T \cot\left(\frac{\pi T}{2 T^*}\right), & T \leq T^*, \\ -aa_T (T - T^*) (1 - \vartheta) + (a_\infty T + b) \vartheta, & T > T^*, \end{cases} \quad (3.21)$$

где

$$\vartheta = \frac{p^\delta}{1 + p^\delta}, \quad p = c \left(\frac{T}{T^*} - 1 \right), \quad (3.22)$$

и аппроксимация для инверсионной температуры выглядит следующим образом

$$T^* = \omega_1 \frac{E_F^{\omega_2}}{\zeta^{\omega_3}} \left\{ 1 + \frac{\omega_4}{\zeta^{\omega_5}} \left[1 + \tanh \left(\omega_6 \frac{E_F^{\omega_7}}{\zeta^{\omega_8}} - \omega_9 \right) \right] \right\} \quad (3.23)$$

Далее мы приведем сводку значений параметров оптимизации, полученных в работе [1].

В формуле (3.11) имеем

$$\beta_y = 1.65516 \quad (3.24)$$

со средней ошибкой $\bar{r} = 0.67\%$ и максимальной ошибкой $r_{\max} = 1.28\%$. В формуле (3.12) имеем

$$\alpha_t = 0.109392, \quad \beta_t = 1.65516, \quad (3.25)$$

с $\bar{r} = 0.19\%$, $r_{\max} = 0.45\%$ и

$$t^2(y) = 1 - \alpha_{t^2} y^{\beta_{t^2}}, \quad \alpha_{t^2} = 0.231723, \quad \beta_{t^2} = 1.29655, \\ \bar{r} = 0.27\%, \quad r_{\max} = 0.64\%.$$

Если E_F задана в В/м, а ϕ в эВ, то аппроксимация для тока полевой эмиссии имеет вид (3.13) и оптимизированные значения параметров q_i равны:

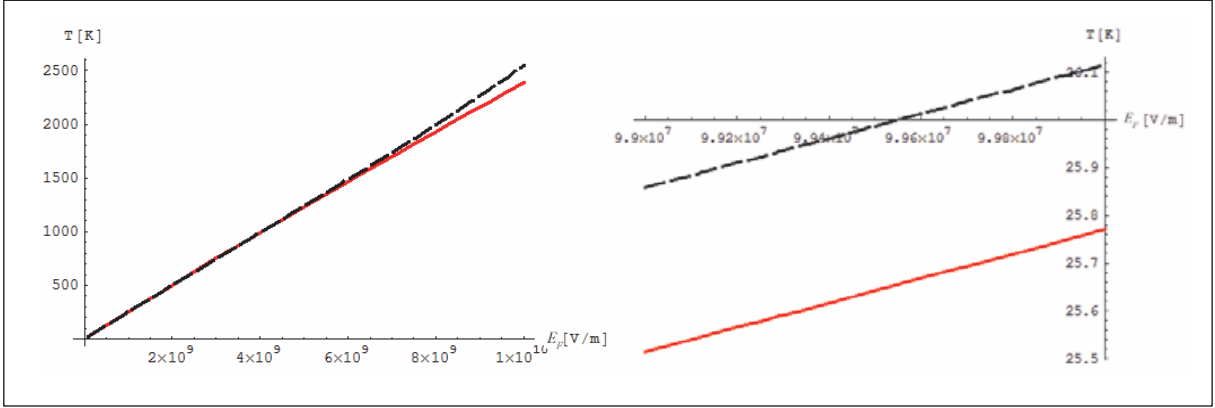


Рис. 4. Сравнение зависимости инверсионной температуры от внешнего электрического поля, вычисленной по формуле Фаулера-Нордхейма (сплошная линия) и по приближенной формуле (пунктирная линия). $\phi = 4.8 \text{ эВ}$.

$$\begin{aligned} q_1 &= 7.32527 \times 10^{-6}, & q_2 &= 1.90593, \\ q_3 &= 0.810323, & q_4 &= 2.36641 \times 10^{-22}, \\ q_5 &= 2.43459, & q_6 &= 5.22916, \\ q_7 &= 6.71665 \times 10^9, & q_8 &= 1.49781, \\ q_9 &= 0.998795, & q_{10} &= 197.477, \\ q_{11} &= 0.205375, & q_{12} &= 0.145045. \end{aligned}$$

Аппроксимация осуществлялась для значений $E_F \in [3.16 \times 10^7, 10^{10}] \text{ В/м}$ и $\zeta \in [2, 5] \text{ эВ}$. В этом интервале средняя ошибка равна $\bar{r} = 0.85\%$ и максимальная ошибка равна $r_{\max} = 36\%$.

Если E_F задана в В/м то аппроксимация для инверсионной температуры имеет вид (3.23), где оптимизированные значения параметров ω_i равны

$$\begin{aligned} \omega_1 &= 7.1130 \times 10^{-7}, & \omega_2 &= 0.98604, \\ \omega_3 &= 0.47483, & \omega_4 &= 1.0296, \\ \omega_5 &= 0.91905, & \omega_6 &= 4.8022, \\ \omega_7 &= 8.8832 \times 10^{-2}, & \omega_8 &= 0.15358, \\ \omega_9 &= 30.371. \end{aligned}$$

Аппроксимация осуществлялась для значений $E_F \in [2 \times 10^8, 10^{10}] \text{ В/м}$ и $\zeta \in [2, 5] \text{ эВ}$. В этом интервале средняя ошибка равна $\bar{r} = 1.1\%$ и максимальная ошибка равна $r_{\max} = 4.56\%$. Уравнение (3.23) также справедливо для полей силой меньше $2 \times 10^8 \text{ В/м}$.

В формуле (3.21), если E задана в эВ ($a_{T^*} = \frac{\pi^2 k}{2e}$ и $a_\infty = \frac{2k}{e}$), имеем

$$\begin{aligned} a &= 1 - 1.03104 \times 10^{-2} E_F^{0.193326} / \zeta^{0.821433}, \\ b &= \zeta - 1.99435 \times 10^{-5} E_F^{0.533739}, \\ c &= 0.687365 / \zeta^{0.0525966}, \\ s &= 3.48481. \end{aligned}$$

Остановимся более подробно на вычислении инверсионной температуры T^* . Здесь можно использовать два подхода: «точную» формулу (метод Фаулера-Нордгейма) (3.18) и приближенную формулу (3.23). В формуле (3.18) работа выхода задается в Джоулях, в формуле (3.23) – в электронвольтах. Формула (3.23) применима в следующих интервалах значений напряженности и работы выхода: $E_F \in [2 \times 10^8, 10^{10}]$ В/м и $\zeta \in [2, 5]$ эВ.

При вычислениях мы использовали следующие значения параметров

m	масса электрона	9.109×10^{-31} кг
e	величина заряда электрона	-1.602×10^{-19} Кл
ζ	работа выхода электронов для кремния	4.8 эВ
k_B	постоянная Больцмана	$1.3806504 \times 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$
\hbar	постоянная Планка	1.0546×10^{-34} Дж · с
ϵ_0	Диэлектрическая постоянная	$8.8542 \times 10^{-12} \frac{\text{Ф}}{\text{м}}$

На рис. 4 показана зависимость инверсионной температуры от величины внешнего поля, вычисленная по формуле Фаулера-Нордгейма (3.18) и по приближенной формуле (3.22). Видно, что для полей $10^8 - 5 \times 10^9$ В/м. аппроксимационная формула дает хорошее приближение. Для более сильных полей аппроксимационная формула дает расхождение с точной, см. рис. 4.

В интересующем нас интервале полей $10^8 - 2 \times 10^8$ В/м значения инверсионной температуры, вычисленные по точной формуле (3.18) отличаются от значений, вычисленных по формуле (3.23), приблизительно на 1К. Приближенная формула дает завышенное значение. Например, при $E_F = 10^8$ В/м $T_{exact}^* = 25.7709$ К, $T_{approx}^* = 26.1115$ К, при $E_F = 2 \times 10^8$ В/м $T_{exact}^* = 51.4439$ К, $T_{approx}^* = 51.7281$ К. Такого рода погрешность не оказывает практического влияния на корректность численного эксперимента.

Главный вывод: в интересующем нас интервале напряженностей электрического поля инверсионная температура T^* кремниевого эмиттера оказывается очень невысокой. Значит, рассматривая режимы работы катода вблизи точки плавления-кристаллизация (температура плавления кремния $T_0 \approx 1700$ К.), мы заведомо находимся в интервале температур $T > T^*$. Поэтому в рассматриваемом нами случае эффект Ноттингама (3.21) всегда является эффектом охлаждения эмиссионной поверхности катода.

4. Система фазового поля и ее использование при моделировании теплопереноса

В этом разделе мы приводим общие сведения о задачах со свободной границей и их регуляризациях. Одним из важнейших приложений таких задач является моделирование процессов плавления-затвердевания. В этом разделе мы не будем конкретизировать математическую модель, привязывая ее к конкретному физическому процессу-это сделано позднее в разделе 6. Здесь мы также, как и ниже, будем говорить о температуре и т.д., не обращая внимание на конкретные значения физических параметров и концентрируя внимания на математической стороне дела.

Рассмотрим вещество, которое может находиться в двух состояниях (двух фазах): твердом и жидком. Пусть это вещество занимает область $\Omega \subset \mathbf{R}^3$. Обозначим через θ безразмерную температуру и выберем начало отсчета температуры так, что $\theta = 0$ – это температура плавления вещества.

В классической задаче Стефана (исторически первой математической модели, описывающей эволюцию вещества при наличии двух фаз) предполагается, что граница раздела фаз определяется следующим образом:

$$\Gamma(t) = \{x \in \Omega, \theta(x, t) = 0\}. \quad (4.1)$$

Здесь и далее x – безразмерная координата, t – безразмерное время. Область, занятая жидкой фазой Ω_l определяется равенством

$$\Omega_l = \{x \in \Omega, \theta(x, t) > 0\}, \quad (4.2)$$

а область, занятая твердой фазой – равенством

$$\Omega_s = \{x \in \Omega, \theta(x, t) < 0\}.$$

Температура θ (безразмерная) должна удовлетворять уравнению теплопроводности

$$\theta_t = k \Delta \theta, \quad (4.3)$$

где k – безразмерный коэффициент теплопроводности. Кроме того, на границе должно выполняться условие Стефана

$$lv = k \left[\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\Gamma(t)}. \quad (4.4)$$

Здесь

$$\left[\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\Gamma(t)} = \langle \nabla \theta_s - \nabla \theta_l, \mathbf{n} \rangle, \quad x \in \Gamma(t),$$

l – безразмерная теплота плавления, а \mathbf{v} – нормальная скорость свободной границы, см. также (2.6).

На внешней границе и при $t = 0$ задаются обычные для уравнения теплопроводности условия:

$$\theta(x, t) = \theta_j(x, t), \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in \mathbf{R}^1 \quad (4.5)$$

(условие Дирихле, например) и начальное условие

$$\theta(x, 0) = \theta_0(x), \quad x \in \Omega. \quad (4.6)$$

Математическая задача состоит в нахождении функции $\theta(x, t)$ и свободной границы $\Gamma(t)$. Таким образом, решение задачи Стефана (4.1), (4.3)–(4.6) является пара – функция $\theta(x, t)$ и поверхность $\Gamma(t)$. Присутствие неизвестной поверхности делает задачу Стефана сильно нелинейной, несмотря на то, что выражения, содержащие неизвестную температуру $\theta(x, t)$ формально (при заданной поверхности $\Gamma(t)$) линейные.

Однако, оказывается, что эта достаточно просто формулируемая математическая модель довольно далека от физической реальности, в особенности, если рассматриваемую систему нельзя считать одномерной.

В модели Стефана не принята во внимание такая важная физическая характеристика как поверхностное натяжение на границе раздела фаз. Как отмечал Гиббс [14], непосредственным следствием учета поверхностного натяжения, как дополнительного фактора устойчивости, является модификация условия задачи Стефана (4.1) на свободной границе, так что оно принимает вид

$$\Delta s \theta(x, t) = -\sigma K(x, t), \quad x \in \Gamma(t), \quad (4.7)$$

где Δs – разность энтропий жидкой и твердой фаз, σ – поверхностное натяжение (безразмерное), $K(x, t)$ – сумма главных кривизн (средняя кривизна) поверхности в точке $\Gamma(t)$.

Из (4.7) непосредственно следует, что если граница раздела фаз плоская, то мы возвращаемся к условию (4.1). В добавление к эффекту, возникающему из-за учета поверхностного натяжения, температура в точках $\Gamma(t)$ должна быть еще уменьшена (или увеличена) – это называют эффектом перегрева (или переохлаждения), [15]. Для учета этого эффекта можно использовать разные выражения, но наиболее употребительным является введение в (4.7) линейной зависимости от скорости:

$$\Delta s \theta(x, t) = -\sigma K(x, t) - \alpha \sigma v(x, t), \quad x \in \Gamma(t), \quad (4.8)$$

где α – «подгоночный» параметр (безразмерный), см. также (2.7) и, подробнее, – ниже.

Заметим, что поверхность раздела фаз в задаче Стефана неустойчива [16]. Замена (4.1) на (4.7), очевидно, должна улучшать устойчивость, т.к. условие (4.7) ограничивает возможную кривизну поверхности (а неустойчивость начинается, как раз, с локальных возмущений, имеющих большую кривизну). Таким образом, можно сказать, что при больших значениях поверхностного натяжения σ локальные неустойчивости на $\Gamma(t)$ не развиваются, а затухают.

Коэффициент α в (4.8) (и вообще, слагаемое, включающее скорость) действует не так, это лишь слабо стабилизирующий фактор. Линейный анализ [17] показывает, что неустойчивые моды в задаче Стефана остаются неустойчивыми, если (4.1) заменить на (4.8) при $\sigma = 0$, но амплитуда этих мод возрастает медленнее.

Таким образом, условия (4.1), (4.7) и (4.8) приводят к разным по качественным свойствам типам эволюции межфазной поверхности. Для заданного материала адекватный результат можно надеяться получить при соответствующем выборе параметров σ и α в (4.8). Ясно, что условие (4.8) (и (4.7)) делает модель еще более нелинейной, чем модель Стефана. Модель с общим условием (4.8) называется задачей Стефана-Гиббса-Томсона.

Теперь мы переформулируем задачу Стефана-Гиббса-Томсона на языке обобщенных функций. Заметим, что уравнение теплопроводности (4.3) понимается в смысле классического анализа: частные производные от температуры берутся с одной или другой стороны от поверхности раздела фаз, но не в точках самой поверхности. Легко видеть, что уравнение (4.3) и условие (4.4) могут быть объединены в одно уравнение, в котором производные понимаются уже в слабом смысле (как в теории обобщенных функций), а именно:

$$\theta_t + \frac{l}{2} \bar{\varphi}_t = k \Delta \theta, \quad \bar{\varphi} = \begin{cases} 1, & x \in \Omega_s, \\ -1, & x \in \Omega_l. \end{cases} \quad (4.9)$$

Тогда можно сказать, что $\Gamma(t)$ – это поверхность, на которой функция $\bar{\varphi}$, заданная в области $\Omega \times \mathbf{R}^1$, имеет разрыв.

Ясно, что такая постановка задачи привязана к (4.1), и замена (4.1) на (4.8) требует какого-то изменения определения функции $\bar{\varphi}$, т.к. температура на $\Gamma(t)$ теперь вовсе не обязательно равна нулю. Нужно как-то ввести эту функцию в условие (4.8). Здесь можно воспользоваться двумя способами.

Первый (физический, условно) – построить модель процесса взаимопревращения фаз, которая явно включала бы в себя функцию $\bar{\varphi}^{(s)}$ или ее аналог и придавала бы ей физический смысл.

Второй – рассматривать задачу (4.3), (4.4)–(4.6), (4.9) как предельную при стремлении к нулю малого параметра ε в некоторой другой задаче – регуляризации задачи (4.3), (4.4)–(4.6), (4.9). Известная здесь аналогия – это соответствие предельного уравнения Хопфа

$$u_t + (u^2)_x = 0 \quad (4.10)$$

и его регуляризации

$$u_t^\varepsilon + \left((u^\varepsilon)^2 \right)_x = \varepsilon \Delta u^\varepsilon, \quad (4.11)$$

составляющее суть метода малой вязкости в теории законов сохранения.

Вначале кратко остановимся на первой возможности.

В физической литературе известно довольно много про поведение неравновесных термодинамических систем: модели Гинзбурга-Ландау, Ландау-Халатникова и др. В таких моделях предполагают, что состояние системы определяется не только физиче-

скими параметрами – температурой, плотностью и т.д. – но и дополнительным безразмерным «параметром порядка» $\varphi = \varphi(x, t)$ (или несколькими параметрами, см., например, модель А в [18]). В этом контексте рассматривалась такая система уравнений:

$$\theta_i + \frac{l}{2} \varphi_i = k \Delta \theta, \tag{4.12}$$

$$\alpha \xi^2 \varphi_i = \xi^2 \Delta \varphi + \frac{1}{a} g(\varphi) + 2\theta,$$

где $g(\varphi)$ – производная симметричного относительно нуля потенциала $W(\varphi)$ с двумя минимумами в точках $\varphi = \pm 1$. В простейшем случае $g(\varphi) = \varphi - \varphi^3$. Параметры l, k, α, ξ и a – безразмерные комбинации физических параметров задачи, см. [19, 20]. Подробнее мы поговорим об их определении позднее.

Видно, что первое уравнение в (4.12) по виду совпадает с уравнением (4.9), однако решение уравнения из системы (4.12) не имеет скачка, как функция $\bar{\varphi}^{(s)}$ в (4.9).

Если формально положить

$$a = \Delta s \Big|_{\Gamma(t)}, \quad a \xi^2 = \sigma \varepsilon^2 \tag{4.13}$$

и предположить, что $\varepsilon \rightarrow +0$ – формальный параметр, то в пределе при $\varepsilon = 0$ второе уравнение (4.12) переходит в (4.8).

Итак, основная идея состоит в том, чтобы заменить исходную задачу Стефана-Гиббса-Томсона, которая не является «стандартной» краевой задачей из теории дифференциальных уравнений из-за наличия неизвестной свободной границы, на новую задачу, в данном случае, – (4.12), которая уже принадлежит стандартному классу краевых задач для (нелинейных) дифференциальных уравнений. Эта новая «стандартная» задача зависит от малого параметра, и предельный переход по этому параметру в «стандартном» решении как раз и даст решение исходной «нестандартной» задачи. Это – центральное место всего нашего алгоритма [21], [25-27]. Здесь имеется одна существенная тонкость: у «стандартной» задачи, в силу ее сложности, мы не можем найти точное решение; приходится ограничиваться асимптотическими приближениями, которые могут быть неустойчивыми. До сих пор, эту возможную неустойчивость в общей ситуации преодолеть теоретически не удалось. Однако, в конкретных системах, например, в случае задачи (4.12), вместо теоретического исследования можно опираться на результаты компьютерного решения и проверять устойчивость, просто варьируя параметры численного эксперимента. С одной стороны, это, конечно, не дает строго доказательства того, что получаемые таким способом, при малых значениях параметра регуляризации, компьютерные данные действительно являются приближением для точного решения задачи Стефана-Гиббса-Томсона. С другой стороны, в данной задаче, в силу ее сложности, вообще не стоит рассчитывать на получение строго математического обоснования, и, наоборот, нужно доверять результатам многих компьютерных экспериментов для верификации результатов, т.е. ограничить уровень строгости разработкой передовой «математической технологии», а не законченной математической теории.

Отметим, что строгое обоснование собственно предельного перехода от системы фазового поля (4.12) к задаче Стефана-Гиббса-Томсона, без исследования упомянутого выше вопроса об устойчивости, существует, но математически весьма нетривиально. Справедлива следующая теорема [21].

Теорема. Пусть начальные данные для (4.12) $\varphi(x, 0, \varepsilon) \in W_2^1(\Omega)$ удовлетворяет условиям:

$$\varphi(x, 0, \varepsilon) \rightarrow \varphi_0(x) \in BVC(\Omega) \text{ в } L_2(\Omega),$$

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\varepsilon}{2} |\nabla \varphi(x, 0, \varepsilon)|^2 + \frac{1}{4\varepsilon} (\varphi^2 - 1)^2 \right] dx \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{3} \int_{\Omega} d|\nabla \varphi_0|.$$

Здесь $BV(\Omega)$ – пространство функций ограниченной вариации, $BVC(\Omega) = \{\zeta, \zeta \in BV(\Omega), |\zeta| = 1\}$, $d|\nabla \varphi_0|$ – мера, отвечающая обобщенному градиенту φ_0 .

Пусть $\theta(x, 0) \in L_2(\Omega)$. Тогда существует слабое решение системы (4.12), такое, что

$$\begin{aligned} \varphi(x, t, \varepsilon) &\in W_2^1(\Omega) \cap L^\infty(W_2^1(\Omega) \cap L_4(\Omega); (0, T)), \\ \theta(x, t, \varepsilon) &\in L^\infty(L_2(\Omega); (0, T)) \cap L_2(W_2^1(\Omega); (0, T)). \end{aligned}$$

Более того, если $\varphi_0(x)$ и $\theta(x, 0)$ удовлетворяют неравенству

$$\int_{\Omega} d|\nabla \varphi_0| - \int_{\Omega} \theta_0 \varphi_0 dx \leq \int_{\Omega} d|\nabla v| - \int_{\Omega} \theta_0 v dx$$

для всех $v \in BVC(\Omega)$, то для всех пробных функций $\psi, \chi \in C^1(\bar{\Omega})$ справедливы равенства

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_Q ((\nabla \theta, \nabla \psi) - (\theta + \varphi) \psi_t) dx dt + \int_{\Omega} (\theta(x, 0) + \varphi(x, 0, \varepsilon)) dx \right\} = \quad (4.14)$$

$$\int_Q ((\nabla \bar{\theta}, \nabla \psi) - (\bar{\theta} + \bar{\varphi}) \psi_t) dx dt + \int_{\Omega} (\theta(x, 0) + \varphi_0(x)) dx = 0,$$

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \varepsilon \int_Q \varphi_t \langle \chi, \nabla \varphi \rangle dx dt - \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\varepsilon}{4} (\varphi^2 - 1)^2 \right) \operatorname{div} \chi dx dt + \right. \\ \left. + \int_Q \left(\varepsilon \langle \nabla \varphi, \frac{\partial \chi}{\partial x} \nabla \varphi \rangle + \Delta s \varphi \operatorname{div}(\chi \theta) \right) dx dt \right\} = \quad (4.15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} = \int_Q V \langle \mathbf{v}, \chi \rangle |\nabla_x \bar{\varphi}| \langle t, dx \rangle - \int_Q \left(\operatorname{div} \chi - \left\langle \mathbf{v}, \frac{\partial \chi}{\partial x} \mathbf{v} \right\rangle |\nabla_x \bar{\varphi}| \right) \langle t, dx \rangle + \\ + \Delta s \int_Q \bar{\varphi} \operatorname{div}(\chi \theta) dx dt = 0. \end{aligned}$$

Здесь $Q = \Omega \times [0, T]$, $\bar{\theta} = w. - \lim \theta \in L^\infty(L_2(\Omega); 0, T) \cap L_2(W_2^1(\Omega); 0, T)$, $\bar{\varphi} = w. - \lim \varphi \in L^\infty(BVC(\Omega); 0, T)$. Через $w. - \lim$ мы обозначили слабый предел соответствующих функций при $\varepsilon \rightarrow 0$. Обобщенная нормальная скорость V и обобщенный вектор нормали \mathbf{v} определяется в смысле теоремы Радона-Никодима

$$\mathbf{d}\varphi = \langle -V, \mathbf{v} \rangle^t dt |\nabla_x \bar{\varphi}| \langle t, dx \rangle,$$

где $\mathbf{d}\varphi$ векторная мера, отвечающая обобщенному градиенту $\langle \bar{\varphi}_t, \nabla_x \bar{\varphi} \rangle^t$.

Эта формулировка приведена здесь, в основном, для того, чтобы продемонстрировать какого типа математический аппарат приходится привлекать при строгом обосновании предельного перехода от регуляризованной задачи к интересующей нас задаче Стефана-Гиббса-Томсона. Ниже мы эту технику не привлекаем.

Тем не менее, в связи с этой теоремой мы сделаем несколько замечаний:

1) равенство нулю выражений в левых частях в фигурных скобках в (4.14) и (4.15) – это определение (необычное, см. [21]) слабого решения системы уравнений (4.12);

2) равенство нулю интегралов в правых частях равенств (4.14) и (4.15) является определением слабого решения задачи Стефана-Гиббса-Томсона, в частности, правая часть равенства (4.15) – это формулировка в слабом смысле условия Гиббса-Томсона (4.8).

Уточним: приведенная выше теорема не гарантирует, что существование слабого решения (4.12) (о котором говорится в теореме) обязательно приводит к предельному классическому решению с разделением области на подобласти, занятые твердой и жидкой фазой. В цитированной работе [21], например, построен пример решения задачи Стефана-Гиббса-Томсона, описывающего так называемую «зону перемешивания» (mushy region). В этой зоне $\bar{\varphi} \equiv 0$ и $\bar{\theta} \equiv 0$, но $|\nabla \bar{\theta}| = \text{const}$ (все равенства понимаются в слабом смысле). Более того, теорема не утверждает, что даже в случае существования областей, занятых жидкой и твердой фазой, границы этих областей будут иметь хоть какую-то гладкость. Граница области – это множество $\Gamma_t = \{x, \bar{\varphi}(x, t) = 0\}$, но $\bar{\varphi} \in BVC$, поэтому множество Γ_t может и вовсе не быть поверхностью, хотя при $\varepsilon > 0$ регуляризованная система фазового поля имеет довольно «хорошие» решения.

Грубо говоря, для того, чтобы предел решения системы фазового поля действительно давал классическое решение задачи Стефана-Гиббса-Томсона, требуется, чтобы $\Gamma_t^\varepsilon = \{x, \varphi(x, t, \varepsilon) = 0\}$ было поверхностью при $\varepsilon \geq 0$ и температура мало менялась в окрестности Γ_t^ε , $|\nabla \theta| < \text{const}$ при $\varepsilon \geq 0$.

При численных расчетах выполнение (или невыполнение) этих условий при малых ε легко можно определить визуально.

Вернемся теперь к способам получения системы фазового поля. С точки зрения построения асимптотического решения для системы уравнений с малым параметром (4.12), условие (4.8) означает условие разрешимости уравнения для поправки к решению второго уравнения (уравнение Аллена-Кана) в (4.12). Поэтому можно формально попробовать написать какое-то другое уравнение (не Аллена-Кана), условием разрешимости уравнения для поправки в котором будет снова условие (4.8). Оказывается, это можно сделать, но самый простой вариант – это, все-таки, само уравнение Аллена-Кана и небольшие его модификации. Так что к системе уравнений (4.12) можно относительно двояко – и как к системе, имеющей физический смысл и как к способу регуляризации задачи Стефана-Гиббса-Томсона, которая получается из регуляризирующей задачи (например, (4.12)) при $\varepsilon \rightarrow 0$. Такая двоякая точка зрения будет использоваться в дальнейшем.

Система фазового поля позволяет значительно упростить численное исследование задачи Стефана-Гиббса-Томсона. Основной выигрыш состоит в том, что уравнения системы решаются во всей области, а свободная граница может быть определена как носитель скачка предельной функции $\bar{\varphi}$.

Выше уже говорилось, что нелинейность в уравнении Аллена-Кана, имеющая вид

$$g(\varphi) = \varphi(1 - \varphi^2),$$

имеет три корня $\varphi_0 = 0$ и $\varphi_{\pm} = \pm 1$. Полагая $\theta = 0$, легко проверить, что корень φ_0 неустойчивый, а корни φ_{\pm} – устойчивые, причем положительные возмущения φ_0 развиваются к φ_+ , а отрицательные – к φ_- . Решение $\varphi(x, t, \varepsilon)$ входит в пару (θ, φ) переходящую в пределе в классическое решение задачи Стефана-Гиббса-Томсона, и устроено следующим образом.

В ε -окрестности $\Gamma_\varepsilon(t)$ некоторой гладкой поверхности $\Gamma(t)$ функция $\varphi \in (-1, 1)$, а вне этой окрестности функция φ близка либо к значению $\varphi = 1$, либо к значению $\varphi = -1$. При $\varepsilon \rightarrow 0$ $\Gamma_\varepsilon(t)$ переходит в границу раздела фаз $\Gamma(t)$, область $\Omega_s = \{x, \bar{\varphi}(x, t) = -1\}$ оказывается занятой твердой фазой, а $\Omega_l = \{x, \bar{\varphi}(x, t) = 1\}$ – жидкой фазой.

Рассматривая θ в уравнении Аллена-Кана как возмущающую правую часть, можно понять, что при $\theta < 0$ значения функции φ будут быстро приближаться к φ_- , а при $\theta > 0$ – к φ_+ . Отсюда следует важный вывод о том, что система фазового поля, вообще говоря, содержит задачу о возникновении двухфазного состояния – т.е. о проплавлении или кристаллизации.

По-видимому, для этой последней задачи система фазового поля представляет собой только одну из возможностей для регуляризации в силу сказанного выше о трудностях в определении областей, занятых фазами.

Система фазового поля используется в расчетах, связанных с тепловыми процессами, сопровождающимися фазовыми превращениями уже в течение долгого времени, см. [22], [23] и ссылки в этих работах.

В [23] кроме прочего отмечается, что система фазового поля плохо решается численно, если коэффициент при скорости в условиях Стефана-Гиббса-Томсона (4.8) существенно меньше других коэффициентов, т.е. когда на значение температуры на границе наибольшее влияние оказывает кривизна. В [23] предлагается модификация системы фазового поля для этой ситуации. Ниже мы также встретимся с ней, но решение у нас будет другим.

5. Вывод решения предельной задачи Стефана-Гиббса-Томсона из численного решения системы фазового поля.

Остановимся подробнее на соответствии решения системы фазового поля и классического решения задачи Стефана-Гиббса-Томсона в предположении, что последнее существует. Обозначим это решение через $\bar{\theta}_0$, и пусть функция $\bar{\varphi}_0$ принимает значения +1 или -1 там, где $\bar{\theta}_0$ положительна или отрицательна соответственно. Предположим, что поверхность скачка функции $\bar{\varphi}_0$ совпадает с множеством нулевого уровня некоторой гладкой функции $S = S(x, t)$.

Можно показать, что в этом случае существует пара функций $\theta_{as}(x, t, \varepsilon)$, $\varphi_{as}(x, t, \varepsilon)$, имеющих вид

$$\theta_{as} = \bar{\theta}^-(x, t) + (\bar{\theta}^+(x, t) - \bar{\theta}^-(x, t)) \omega_1\left(\frac{S}{\varepsilon}\right), \quad (5.1)$$

$$\varphi_{as} = \omega_0\left(\frac{S}{\varepsilon}\right), \quad (5.2)$$

где $\omega_1(z) \rightarrow 0, 1$ при $z \rightarrow \pm\infty$, $\omega_1^{(k)}(z) \in \mathcal{S}(\mathbf{R}_z^1)$ при $k > 0$, $\omega_0(z) = \text{th}\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right)$, $\mathcal{S}(\mathbf{R}^n)$ –

пространство Шварца гладких быстро убывающих функций, и при этом, функции (5.1), (5.2) являются главными слагаемыми асимптотических решений, удовлетворяющих уравнениям (4.12) с любой степенью точности по ε (в формулах (5.1), (5.2) выписаны только главные члены асимптотики, см. подробнее [25]).

Более того, можно показать, что в этом случае существует точное решение системы (4.12) сколь угодно мало (на $O(\varepsilon^N)$) отличающееся от асимптотического решения (5.1), (5.2) [33].

Обратное утверждение, к сожалению, не известно, но можно сформулировать алгоритм: как по численно построенным решениям системы (4.12) установить соответствие между ними и решениями задачи Стефана-Гиббса-Томсона.

Мы различаем численные решения системы (4.12) и ее точные решения, так как численные решения удовлетворяют разностным уравнениям, аппроксимирующим дифференциальные уравнения (4.12), а не самим этим уравнениям. Необходимость учета такого различия связана с тем, что, как следует из формул (5.1), (5.2), решения системы фазового поля (4.12), отвечающие классическим решениям задачи Стефана-

Гиббса-Томсона, быстро меняются $\left(\frac{\partial \varphi_{as}}{\partial t} \ll \varepsilon^{-1}, \text{ и } |\nabla \varphi_{as}| \ll \varepsilon^{-1}\right)$ в окрестности границы фазового перехода $\{x; s = 0\}$. Это означает, что разностная схема при малых ε плохо аппроксимирует уравнения (4.12) в этой окрестности. Выбор достаточно малых значе-

ний ε необходим в силу упомянутой выше специфики задачи – решения системы (4.12) переходят в решения задачи Стефана-Гиббса-Томсона именно при $\varepsilon \rightarrow 0$.

К этой проблеме установления соответствия близка еще одна проблема, упомянутая выше. В случае, когда динамический коэффициент в условии Гиббса-Томсона мал (α в (4.8) мало), ошибки, связанные с аппроксимацией производной $\frac{\partial}{\partial t}$ и конечным значением ε в реальных вычислениях могут, вообще говоря, приводить к тому, что численное решение не будет соответствовать решению задачи Стефана-Гиббса-Томсона.

Итак, как упоминалось в п.3, второй способ провести соответствие между решением системы фазового поля и классическим решением предельной задачи Стефана-Гиббса-Томсона состоит в построении определения слабого решения исходной задачи, допускающего предельный переход в слабом смысле.

Подчеркнем, что сам вопрос об определении слабого решения не специфичен именно для нелинейного случая. Как известно, для линейных уравнений с гладкой зависимостью коэффициентов от переменных есть стандартный способ определения слабого решения; он состоит в умножении уравнения на пробную функцию и перебрасывании производных на эту функцию (интегрированием по частям). Но в нелинейном случае такая операция не приводит к правильному определению.

Эта ситуация подробно описана в работах [21, 26] и мы не будем останавливаться на этом подробно, а просто будем использовать построенное там определение.

В случае системы фазового поля (4.12) первое уравнение (теплопроводности) – линейное, поэтому мы, в основном, сосредоточимся на втором уравнении (Алена-Кана).

Определение слабого асимптотического решения для системы фазового поля (4.12) имеет вид интегральных тождеств. Для уравнения теплопроводности это тождество стандартное и определяется формулой

$$\int_{\Omega} \theta_i \zeta \, dxdt + \frac{l}{2} \int_{\Omega} \varphi_i \zeta \, dxdt - k \int_{\Omega} \Delta \theta \zeta \, dxdt = \tilde{R}_\varepsilon,$$

где $\zeta = \zeta(x, t)$ – пробная функция, $\tilde{R}_\varepsilon \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Для второго уравнения (Алена-Кана) системы (2.12) определение решения имеет вид

$$\begin{aligned} \alpha \varepsilon \int_{\Omega} \varphi_i \langle \chi, \nabla \varphi \rangle \, dxdt + \frac{\varepsilon}{2} \int_{\Omega} \left[|\nabla \varphi|^2 + \frac{1}{2\varepsilon} (\varphi^2 - 1)^2 \right] \operatorname{div} \chi \, dxdt + \\ + \varepsilon \int_{\Omega} \left[\left\langle \nabla \varphi, \frac{\partial \chi}{\partial x} \nabla \varphi \right\rangle + \Delta s \varphi \operatorname{div}(\chi \theta) \right] \, dxdt = R_\varepsilon, \end{aligned} \quad (5.3)$$

которое должно выполняться для любой пробной векторной функции $\chi(x, t)$, R_ε – некоторая величина, стремящаяся к нулю при $\varepsilon \rightarrow 0$, см. [26, 27].

Нетрудно видеть, что (4.8) получается из второго уравнения в (4.12) умножением на выражение $\langle \chi, \nabla \varphi \rangle$ и последующим интегрированием по частям. При этом умножении получаются выражения, не имеющие дивергентной формы. Поэтому не все производные могут быть переброшены на пробную функцию. Это отличает предлагаемую конструкцию (5.3) от привычной схемы в теории линейных дифференциальных уравнений. Привычная конструкция дает «неправильное» определение, не допускающее предельного перехода. Это подробно объясняется в [21, 27].

Сейчас мы покажем, как можно выполнить слабый предельный переход в (5.3). Для этого заметим, что интересующий нас случай, отвечающий задаче Стефана-Гиббса-Томсона, – это решение системы фазового поля, которое имеет структуру (5.1), (5.2). Как уже было сказано, в настоящее время не существует условий, гарантирующих существование такого решения, если априори неизвестно существование классического

решения предельной задачи – а, как раз, его нахождение и есть наша цель! Казалось бы, дело плохо. Но на помощь приходит компьютер.

На графиках, построенных по результатам вычислений на компьютере, легко узнать структуру решения φ , отвечающего классическому решению, см. рис. 12, 15. Это должна быть сглаженная ступенька, переход от значений ± 1 для которой происходит в малой окрестности некоторой поверхности, т.е.

$$\varphi(x, t, \varepsilon) = \omega\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) + O(\varepsilon), \quad (5.4)$$

где S – гладкая функция, такая что $\nabla S|_{s=0} \neq 0$ (последнее условие обеспечивает тот факт, что множество $\{x; S(x, t) = 0\}$ есть гладкая поверхность), а $\omega(z) \in C^\infty$, $\omega(+\infty) = 1$,

$\omega(-\infty) = -1$ и $\frac{d^\alpha \omega}{dz^\alpha} = o(|z|^{-N})$ при $|z| \rightarrow \infty$ и $N > 0$ достаточно большое число. Например, при $n = 3$ (размерность пространства переменных x) достаточно взять $N = 4$. Формула (3.4) означает, что при $S > 0$ отношение $\frac{S}{\varepsilon}$ стремится к 1 при $\varepsilon \rightarrow 0$. При

$S < 0$, в свою очередь, $\frac{S}{\varepsilon} \rightarrow -\infty$ и $\omega\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) \rightarrow -1$. Относительно слагаемого $O(\varepsilon)$ в (5.4)

требуется некоторая детализация, которую мы опускаем, см. [25]. Будем просто считать его малым и несущественным.

Дальнейшие рассуждения опираются на следующую лемму.

Лемма: Пусть $S = S(x, t)$ – некоторая гладкая функция, такая что $\nabla S|_{s=0} \neq 0$ и $\omega_1(z) \in C^\infty$, $\omega_1(z) = o(|z|^{-N})$, $|z| \rightarrow \infty$.

Тогда для любой пробной функции $\chi \in C_0^\infty(Q)$ справедливо равенство

$$\int_Q \omega_1\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) \chi dx = \varepsilon A_{\omega_1} \int_{\{S=0\}} \chi \varpi,$$

где ϖ – мера Лере на поверхности $S = 0$, задаваемая равенством

$$\varpi dS = dx_1 dx_2 dx_3$$

$$\text{и } A_{\omega_1} = \int_{\mathbb{R}^1} \omega_1(z) dz.$$

При $n = 1$ это утверждение проверяется совсем просто:

$$\int_Q \omega_1\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) \chi(x) dx = \left\{ \begin{array}{l} \frac{S(x, t)}{\varepsilon} = z, \\ dx = \varepsilon \frac{dz}{s'_x} \end{array} \right\} = \varepsilon \int \chi \omega_1(z) \frac{dz}{s'_x}.$$

Далее, ясно, что $x = X(\varepsilon z, t)$ и

$$\chi(x) = \chi(X(\varepsilon z, t)) = \chi(X(0, t) + O(\varepsilon)) = \chi(X(0, t)) + O(\varepsilon).$$

Следовательно,

$$\int_Q \omega_1\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) \chi(x) dx = \varepsilon \chi(X(0, t)) \int \omega_1(z) dz + O(\varepsilon^2).$$

По-другому это равенство можно записать так.

Следствие.

$$\int_Q \omega_1 \left(\frac{S}{\varepsilon} \right) \chi(x) dx = \varepsilon \langle \delta(S), \chi \rangle + O(\varepsilon^2),$$

где $\delta(S)$ – δ -функция Дирака, \langle, \rangle – спаривание в \mathbf{D}' – действие обобщенной функции $\delta(S)$ на пробную функцию $\chi(x)$.

Заметим теперь, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega \left(\frac{S}{\varepsilon |\nabla S|} \right) = \frac{S_t}{\varepsilon |\nabla S|} \dot{\omega} \left(\frac{S}{\varepsilon |\nabla S|} \right) + \frac{S}{\varepsilon} \dot{\omega} \left(\frac{S}{\varepsilon |\nabla S|} \right) \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{|\nabla S|}.$$

Последнее слагаемое можно записать в виде

$$\frac{S}{\varepsilon} \dot{\omega} \left(\frac{S}{\varepsilon |\nabla S|} \right) \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{|\nabla S|} = z \left[|\nabla S| \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{|\nabla S|} \right] \omega(z) \Big|_{z=\frac{S}{\varepsilon |\nabla S|}}.$$

Видно, что правая часть последнего равенства ограничена при $\varepsilon \rightarrow 0$ в силу условий, наложенных на функцию ω . Теперь применяя Лемму и Следствие из нее, можно переписать (5.4) в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega \left(\frac{S}{\varepsilon |\nabla S|} \right) = 2\varepsilon \frac{S_t}{|\nabla S|} \delta \left(\frac{S}{|\nabla S|} \right) + O_{D'}(\varepsilon^2), \quad (5.5)$$

где $O_{D'}(\varepsilon^2)$ – обобщенная функция, действие которой на любую пробную функцию $\chi(x)$ оценивается как $O(\varepsilon^2)$,

$$\langle O_{D'}(\varepsilon^2), \chi \rangle = O(\varepsilon^2)$$

для любой $\chi \in C_0^\infty(Q)$.

Заметим теперь, что выражение $\left| \frac{S_t}{|\nabla S|} \right|$ – это абсолютное значение скорости точки на

поверхности $\{x; s = 0\}$ в направлении нормали к этой поверхности. В самом деле

$$S(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t), t) = 0, \quad (5.6)$$

если точка $(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$ принадлежит поверхности $\{x; S(x, t) = 0\}$. Дифференцируя (5.6) по t , получим

$$S_t + \langle \nabla S, \dot{x} \rangle = 0$$

или

$$V_n = \left\langle \frac{\nabla S}{|\nabla S|}, \dot{x} \right\rangle = -\frac{S_t}{|\nabla S|}.$$

Если теперь вычислить аналогично (5.5) все слагаемые, входящие в левую часть (5.3), мы получим

$$\begin{aligned} & \alpha \varepsilon \int_Q \varphi_t \langle \chi, \nabla \varphi \rangle dx dt + \frac{\varepsilon}{2} \int_Q \left[|\nabla \varphi|^2 + \frac{1}{2\varepsilon} (\varphi^2 - 1)^2 \right] \operatorname{div} \chi dx dt + \\ & + \int_Q \left[\left\langle \nabla \varphi, \frac{\partial \chi}{\partial x} \nabla \varphi \right\rangle + \Delta s \varphi \operatorname{div}(\chi \theta) \right] dx dt = \\ & = \left[-\alpha (V_n + O(\varepsilon)) - \sigma (K + O(\varepsilon)) - \Delta s (\theta + O(\varepsilon)) \right] \Big|_{\{s=0\}}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

Структура правой части (5.7) следует из приведенных выше вычислений (см., например, (5.5)) и очень важна. Она означает, что фазовое поле приближает задачу Стефана-

Гиббса-Томсона даже в случае малых коэффициентов в условии Гиббса-Томсона. В самом деле, если бы, например, вместо слагаемого $-\alpha(V_n + O(\varepsilon))$ в правой части (3.6) мы имели $-\alpha V_n + O(\varepsilon)$, то в случае малого α и «не близких» к нулю значений ε , поправка $O(\varepsilon)$ могла бы играть более существенную роль, чем физически значимое слагаемое $-\alpha V_n$.

Если добавить к (5.7) правую часть из (5.3), то мы можем сформулировать следующее неформальное утверждение.

Утверждение 1. Пусть функция порядка $\varphi(x, t, \varepsilon)$ имеет вид (5.4), и температура θ не имеет скачка в области быстрого изменения функции $\varphi(x, t, \varepsilon)$. Тогда вместе с уравнением (5.3) выполняется равенство

$$\left[-\alpha(V_n + O(\varepsilon)) - \sigma(K + O(\varepsilon)) - \Delta s(\theta + O(\varepsilon)) \right] \Big|_{\{s=0\}} = R_\varepsilon \Big|_{\{s=0\}}. \quad (5.8)$$

Нам осталось выяснить причину возможного появления величины R_ε и оценить ее.

На первый вопрос ответ простой – при решении задачи на ЭВМ мы не получаем точного значения решения, и подстановка численного решения в дифференциальное уравнение (обычно делают наоборот, но для нашего понимания проблемы лучше поменять местами левую и правую часть) возникает невязка, обусловленная погрешностью аппроксимации дифференциального оператора разностным.

Напомним, что если

$$u_x = \pm \frac{u(x \pm h) - u(x)}{h}$$

– это разностная аппроксимация оператора $\frac{d}{dx}$, то погрешность аппроксимации про-

порциональна выражению $h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. В случае, который мы обсуждаем, $u \propto \omega\left(\frac{S}{\varepsilon}\right)$ и диф-

ференцирование приводит к появлению отрицательных степеней ε в качестве множителей, поэтому необходимо оценить возникающую из-за аппроксимации ошибку.

Мы ограничимся рассмотрением одномерного случая, т.к. структура погрешности аппроксимации не меняется в зависимости от размерности. Легко видеть, что погрешность аппроксимации первого слагаемого в левой части (5.3) состоит из двух слагаемых:

$$I_1 = \frac{\tau \alpha \varepsilon}{\varepsilon^3} \int_Q \dot{\omega}\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) \ddot{\omega}\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) g(x, t) dx dt \quad (5.9)$$

и

$$I_2 = \frac{\tau^2 \alpha \varepsilon}{\varepsilon^4} \int_Q \left[\ddot{\omega}\left(\frac{S}{\varepsilon}\right) \right]^2 g_1(x, t) dx dt, \quad (5.10)$$

где $g(x, t)$ и $g_1(x, t)$ – гладкие функции, составленные из пробной функции χ и производных функции S , точкой обозначена производная $\frac{d\omega}{dz} = \dot{\omega}(z)$.

С помощью замены переменной, как это было сделано в доказательстве Леммы, нетрудно проверить, что выражение (5.9) оценивается величиной

$$I_1 = O\left(\frac{\alpha \tau}{\varepsilon}\right),$$

а выражение (5.10) – величиной

$$I_2 = O\left(\frac{\alpha \tau^2}{\varepsilon^2}\right).$$

В первой оценке мы учли, что $\int \dot{\omega}(z) \ddot{\omega}(z) dz = 0$.

Аналогично можно рассмотреть и остальные слагаемые в (5.3). Это дает следующее выражение для R_ε . Если в левую часть вместо $\varphi(x, t, \varepsilon)$ подставлено решение разностного уравнения, то

$$R_\varepsilon = O\left(\frac{\alpha\tau}{\varepsilon}\right) + O\left(\frac{\alpha\tau^2}{\varepsilon^2}\right) + O\left(\frac{\sigma h^2}{\varepsilon^3}\right) + O\left(\frac{\sigma h^4}{\varepsilon^6}\right) + O(\Delta sh). \quad (5.11)$$

Таким образом, мы получаем следующее утверждение.

Утверждение 2. Пусть при численном моделировании получено решение, удовлетворяющее условиям Утверждения 1. Тогда справедливо следующее равенство

$$\left[-\alpha(V_n + O(\varepsilon)) - \sigma(K + O(\varepsilon)) - \Delta s(\theta + O(\varepsilon))\right]_{\{s=0\}} = R_\varepsilon,$$

где остаток R_ε определяется равенством (5.11).

Из сказанного выше можно заключить следующее. Первое: независимо от выбора значений коэффициентов уравнения Аллена-Кана в системе фазового поля (4.12) определение асимптотического решения (5.3) дает правильный результат. Второе: точное решение разностной задачи приводит к условию Гиббса-Томсона (4.8) (получается при предельном переходе из уравнения Аллена-Кана) с правильными поправками. Иными словами, если мы задаем определенные значения коэффициентов в уравнении Аллена-Кана, то получаем численное решение задачи Стефана-Гиббса-Томсона с соответствующими значениями коэффициентов. Классическое решение задачи Стефана-Гиббса-Томсона распознается по графику численного решения, см. ниже рис. 12, 15.

6. Модель нанокатода

В качестве пространственной модели острейного нанокатода мы рассматриваем область, изображенную на рис. 5. На нем $r_1(t)$ и $r_2(t)$ – свободные границы, которые возникают при проплавлении катода.

Пространственные переменные меняются в пределах, $r \in [R_0, R]$, $\phi \in [0, 2\pi]$, $\vartheta \in [-\Theta, \Theta]$, $0 < \Theta < \frac{\pi}{2}$.

Таким образом, область моделирования представляет собой усеченный конус, а основаниями этого конуса являются части сфер с радиусами $r = R_0$ и $r = R$. Такой выбор области моделирования позволяет наиболее простым образом аппроксимировать в полярных координатах конусообразный нанокатод.

В таблицу 1 сведены все значения физических параметров, использующихся при моделировании.

Процесс разогрева нанокатода при прохождении через него электрического тока описывается уравнением теплопроводности (2.1)

Обезразмеривание температуры проводится по следующим формулам

$$\bar{\theta} = \frac{c}{l} T, \quad (6.1)$$

где $\bar{\theta}$ – безразмерная температура. Безразмерное время и радиус определяются из выражений:

$$\tilde{t} = t_0 t, \quad \tilde{r} = r_0 r.$$

Напомним, что \tilde{t} – размерное время (в секундах) и \tilde{r} – размерный радиус (в метрах); t и r – безразмерные величины.

С учетом (6.1), (2.3) и (2.5) из уравнения (2.1) получаем обезразмеренное уравнение теплопроводности

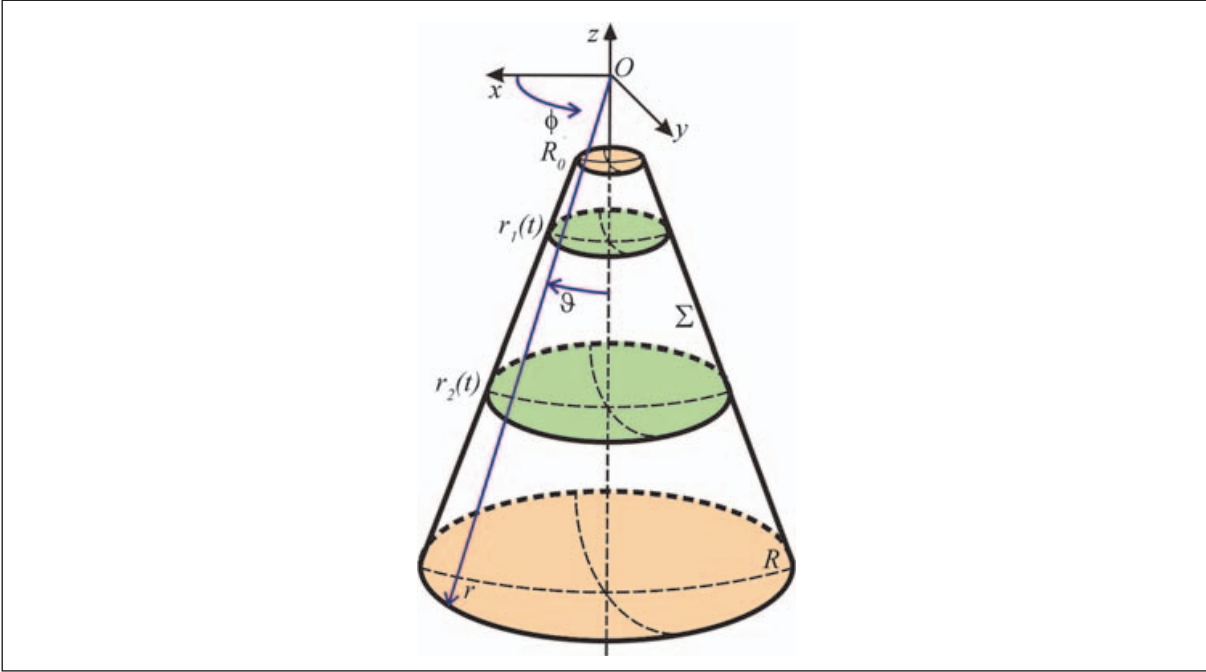


Рис.5. Модель нанокатода.

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} - \hat{k} \Delta \bar{\theta} = \hat{F}, \quad (6.2)$$

где

$$\hat{k} = \frac{\lambda}{\rho c} \frac{t_0}{r_0^2} = k \frac{t_0}{r_0^2}, \quad \hat{F} = \frac{t_0}{l \rho} \frac{j^2}{\sigma_e}, \quad (6.3)$$

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

Особенностью уравнения (6.2) является большой коэффициент теплопроводности ($\hat{k} \approx 10^8$). Это означает, что температура быстро выравнивается в малом объеме и выходит на стационарное решение.

Заметим, что для вычисления плотности тока j в тепловом источнике \hat{F} , определяемом формулой (6.3) (внутри катода), мы используем уравнения (2.2), (2.4), см. подробнее ниже.

Условие Стефана (2.6) после обезразмеривания примет вид

$$\kappa \left[\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial r} \right]_{r=r_i(t)} = -r'_i(t) r_i(t), \quad (6.4)$$

где

$$r = r_i(t), \quad i = 1, 2$$

свободные границы, см. Рис. 4, $\kappa = k \frac{t_0}{r_0^2}$.

Обезразмеренное условие Гиббса-Томсона (2.7) примет вид

$$(\bar{\theta} - \bar{\theta}_0) \Big|_{r=r_i(t)} = (-1)^i \hat{\alpha} r'_i(t) - \hat{\beta} \frac{1}{r_i(t)}, \quad i = 1, 2, \quad (6.5)$$

Таблица 1

t_0	Характерное время (время эксперимента)	100с
r_0	Характерный масштаб (размер катода)	10^{-5} м
l	Скрытая теплота плавления	$1.64 \cdot 10^5$ Дж/кг
c	Удельная теплоемкость	$678 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$
λ	Удельная температуропроводность	$149 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$
e	Заряд электрона (без знака)	$1.602 \cdot 10^{-19}$ Кл
T_0	Температура плавления	1700К
σ_{SB}	Постоянная Стефана-Больцмана	$5.6704 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Дж}}{\text{с} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{К}^4}$
σ_e	Удельная проводимость	$10^{-6} \frac{\text{См}}{\text{м}}$
ζ	Работа выхода электронов	4.8эВ
k_B	Постоянная Больцмана	$1.3806504 \times 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$
$k = \frac{\lambda}{c \cdot \rho}$	Коэффициент температуропроводности	$9.43 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$
ρ	Плотность вещества катода (кремния)	$2330 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
σ	Поверхностное натяжение	$0.725 \frac{\text{Н}}{\text{м}}$
I	Электрический ток, наблюдаемый в нанокатоде	$10^{-7} - 10^{-5}$ А
ρ_e	Удельное сопротивление вещества катода (кремния)	$5 \cdot 10^{-5} - 4 \text{ Ом} \cdot \text{м}$
μ	Кинетический коэффициент роста	$0.5 \frac{\text{м}}{\text{с} \cdot \text{К}}$
Ψ_2	Приложенное напряжение к катоду	4 В

где

$$\bar{\theta}_0 = \frac{c}{l} T_0, \quad \hat{\alpha} = \frac{1}{\mu(l/c)} \frac{r_0}{t_0}, \quad \hat{\beta} = \frac{\sigma c T_0}{l^2 \rho} \frac{1}{r_0}. \quad (6.6)$$

В нашем случае коэффициенты в условии (6.5) имеют следующие значения $\hat{\alpha} = 10^{-9}$, $\hat{\beta} = 10^{-3}$. Таким образом, мы приходим к соотношению

$$\hat{\alpha} \rightarrow 0, \quad \hat{\alpha} \ll \hat{\beta}. \quad (6.7)$$

Соотношения (6.7) означают, что на верхней и нижней свободных границах условия Гиббса-Томсона (6.5) имеют вид

$$\begin{aligned} (\bar{\theta} - \bar{\theta}_0) \Big|_{r=r_1(t)} &= -\hat{\beta} \frac{1}{r_1(t)}, \\ (\bar{\theta} - \bar{\theta}_0) \Big|_{r=r_2(t)} &= -\hat{\beta} \frac{1}{r_2(t)}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Условия (6.8) означает, что влияние кривизны на движение свободной границы много больше, чем влияние скорости.

В качестве регуляризации задачи (6.2), (6.4), (6.8) по малому параметру ε мы используем систему фазового поля (2.12). В нашем случае она примет вид

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \hat{k} \Delta \theta = -\frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \hat{F}, \quad (6.9)$$

$$\varepsilon \hat{\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \varepsilon \hat{\beta} \Delta \varphi = \frac{1}{\varepsilon} (\varphi - \varphi^3) + \chi (1 - \varphi^2) (\theta - \bar{\theta}_0), \quad (6.10)$$

Здесь функция $\theta = \theta(r, \phi, \vartheta, t, \varepsilon)$ является регуляризацией температуры $\bar{\theta} = \bar{\theta}(r, \phi, \vartheta, t)$, $\varphi = \varphi(r, \phi, \vartheta, t, \varepsilon)$ – функция «порядка», $\chi = \frac{\sqrt{2}}{5}$.

Как отмечалось выше, решение уравнения (6.9) быстро выходит на стационарное решение. С учетом условия (6.7), решение уравнения (6.10) также выходит на стационарное решение при заданной температуре.

7. Вычисление плотности тока внутри катода и плотности эмиссионного тока. Моделирование эффекта Ноттингама

Электрический ток внутри катода описывается уравнением (2.2), где плотность тока выражается через потенциал в соответствии с формулой (2.4).

При подстановке (2.4) в (2.2), учитывая осевую симметрию катода, мы получим двумерное уравнение на потенциал

$$(L_1 + L_2) \Psi = -\tilde{F}, \quad (7.1)$$

где

$$L_1 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\sigma_e r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right),$$

$$L_2 = \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sigma_e \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right), \quad \tilde{F} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(A \sigma_e r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(A \sigma_e \sin \vartheta \frac{\partial T}{\partial \vartheta} \right).$$

Граничные условия для уравнения (7.1) выглядят следующим образом

$$\Psi|_{r=R_0} = \Psi_1 = 0, \quad (7.2)$$

$$\Psi|_{r=R} = \Psi_2 = 4, \quad (7.3)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \Big|_{\vartheta=\pm\Theta} = 0. \quad (7.4)$$

Условие (7.3) означает, что к нижнему основанию катода приложен потенциал $\Psi_2 = 4B$. На боковой поверхности катода используется условие Неймана (7.4).

Уравнение (7.1) является стационарным. Известно, что для стационарных уравнений не существует «хороших» разностных схем. Поэтому мы вводим новую функцию $u = u(r, \vartheta, t)$, которая удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (L_1 + L_2) u = -\tilde{F}, \quad (7.5)$$

где t – время. Уравнение (7.5) дополняется аналогичными (7.2)–(7.4) краевыми условиями для функции u . Будем считать, что

$$\Psi(r, \vartheta) = u(r, \vartheta, t^*),$$

где значение t^* определяется из условия выхода на стационар:

$$|u(r, \vartheta, t^*) - u(r, \vartheta, t)| < \tilde{\varepsilon}, \quad t > t^*,$$

где $\tilde{\epsilon}$ – заданная точность.

В качестве начального условия для уравнения (7.5) берем

$$u(r, \vartheta, 0) = 0.$$

Для численного решения начально-краевой задачи для уравнения теплопроводности (7.5) мы используем стандартный метод прогонки.

Известно, что

$$E_F = -\nabla\Psi, \quad (7.6)$$

где E_F – напряженность электрического поля. С учетом последней формулы и уравнения (2.4) имеем

$$j = \sigma_e(T)[E_F - A(T)\nabla T], \quad (7.7)$$

где $A(T)$ – коэффициент термоэдс. Таким образом, зная на текущем временном шаге температуру T и вычисляя значения потенциала Ψ из уравнения (7.5) на пространственной сетке, можно, используя стандартные численные методы, вычислить напряженность электрического поля по формуле (7.6), а затем – значения плотности тока по формуле (7.7).

Рассмотрим краевое условие (2.9), которое определяет тепловой баланс на острие катода. Прежде всего, найдем плотность эмиссионного тока. Хотя мы рассматриваем катод из полупроводника – кремния, сначала найдем плотность эмиссионного тока для металлов, и после этого перейдем к полупроводникам.

Как упоминалось выше, плотность эмиссионного тока в формуле (2.9) определяется формулой

$$j_{em} = e \int_{-\infty}^{\infty} N(W)D(W)dW. \quad (7.8)$$

Коэффициент прозрачности барьера $D(W)$ равен модулю отношения плотности потока прошедших частиц j_{III} к плотности потока упавших частиц j_I :

$$D = \left| \frac{j_{III}}{j_I} \right|,$$

где $j_k = \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial u_k^*}{\partial x} u_k - \frac{\partial u_k}{\partial x} u_k^* \right)$, $k = I, III$, а $u = u(x)$ – волновая функция, которая нахо-

дится с помощью метода ВКБ из стационарного уравнения Шредингера для движения одного электрона в направлении оси x (см. [39]):

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V(x))u = 0. \quad (7.9)$$

В результате получается следующее выражение для $D(W)$:

$$D(W) \approx \exp \left(- \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{8m}{\hbar^2} (V(x) - W)} dx \right),$$

где x_1 и x_2 – точки поворота потенциала, которые находятся из условия

$$V(x_1) = V(x_2) = W,$$

причем $x_1 < x_2$.

Потенциал $V(x)$ можно вывести с помощью метода электростатических изображений [34], [35] (рис. 6): за поверхностью катода помещается изображение заряда электрона e на расстоянии, равном расстоянию от электрона до поверхности катода (это направление оси x). Положим $V(\infty) = 0$. Тогда потенциал равен

$$V(x) = - \int_{\infty}^x \left(- \frac{e^2 dx}{4x^2} \right) = - \frac{e^2}{4x}.$$

Заметим, что при $x \rightarrow 0$ формально получаем $V(x) \rightarrow -\infty$, что невозможно, и эта формула для $V(x)$ при величине x порядка межатомного расстояния, конечно, неверна. На самом деле, при отрицательных x потенциал равен константе [35], а при малых положительных x потенциал меняется непрерывно. Кроме этого, необходимо учесть влияние внешнего электрического поля, потенциал которого равен $-eE_F x$. В итоге, получим

$$V(x) = \begin{cases} \delta = const, x < 0, \\ -\frac{e^2}{4x} - eE_F x, x > 0, \end{cases} \quad (7.10)$$

где константа $\delta < 0$ соответствует потенциалу внутри эмиттера. Видно, что при $x = 0$ эта функция терпит разрыв, но при дальнейших построениях этим можно пренебречь. Уточним, что нас интересует область $x > 0$, т.е. область, в которой находятся эмитированные электроны.

Для наглядности приведем график функции $V(x)$ на рис. 7.

Вернемся к выражению для коэффициента прозрачности барьера

$$D(W) \approx \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{8m}{\hbar^2}(V(x) - W)} dx\right).$$

Эта формула корректна только для энергий W , не превышающих потенциальный барьер W_l , равный максимальному значению $V(x)$. Если $W > W_l$, то прозрачность барьера $D(W) = 1$. Подставив $V(x)$ из (7.10), получим

$$-\ln(D) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{8m}{\hbar^2} \left(-eE_F x + |W| - \frac{e^2}{4x}\right)} dx,$$

где

$$x_1, x_2 = \frac{|W|}{2eE_F} \left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{e^3 E_F}{W^2}}\right).$$

Сделаем замену $y = \frac{\sqrt{e^3 E_F}}{|W|}$, тогда новая переменная интегрирования будет равна

$\xi = \frac{2eE_F}{|W|} x$. В итоге получим

$$-\ln(D) = \frac{\sqrt{m|W|^3}}{\hbar e E_F} \int_{1-\sqrt{1-y^2}}^{1+\sqrt{1-y^2}} \sqrt{(-\xi^2 + 2\xi - y^2)} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}. \quad (7.11)$$

Подстановка $\eta = \sqrt{\xi}$ приведет (7.11) к виду

$$-\ln(D) = \frac{\sqrt{m|W|^3}}{\hbar e E_F} \int_a^b \sqrt{(a^2 - \eta^2)(\eta^2 - b^2)} d\eta, \quad (7.12)$$

где

$$b = \sqrt{1 - \sqrt{1 - y^2}}.$$

Из (7.12) получим окончательную формулу для коэффициента перехода

$$D(W) = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m|W|^3}}{3\hbar e E_F} v(y)\right), \quad (7.13)$$

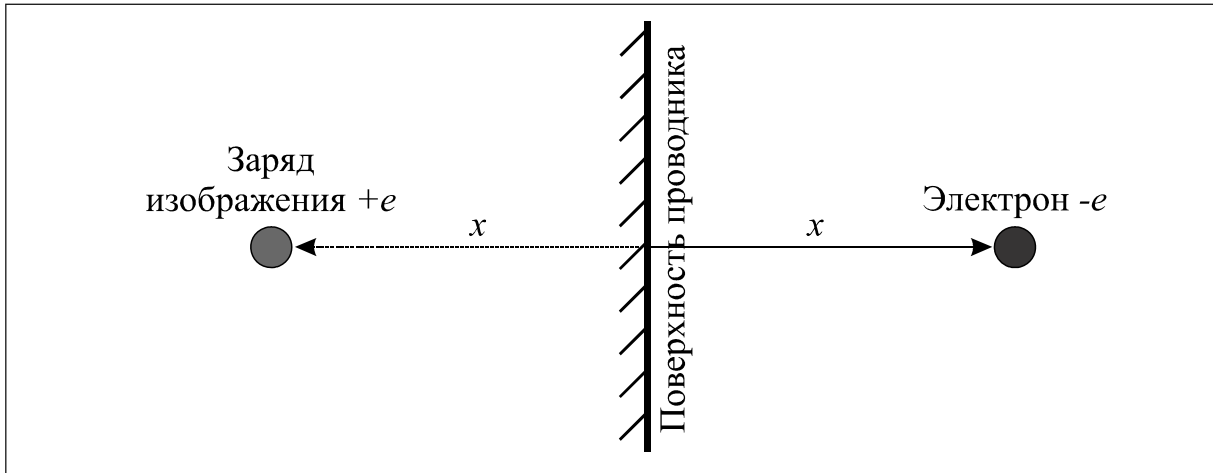


Рис. 6. Схема расположения электрона и его электростатического изображения относительно границы проводника.

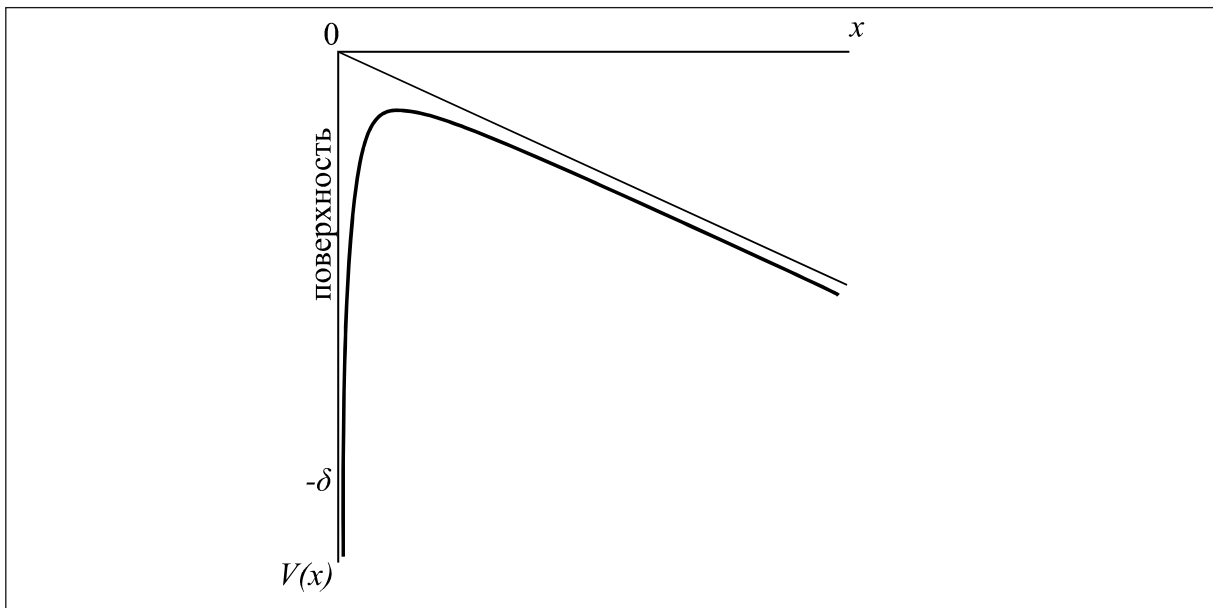


Рис. 7. График функции $V(x)$.

где

$$v(y) = \begin{cases} \sqrt{1+y} \left[E\left(\frac{1-y}{1+y}\right) - yK\left(\frac{1-y}{1+y}\right) \right], & y \leq 1, \\ -\sqrt{\frac{y}{2}} \left[(y+1)K\left(\frac{y-1}{2y}\right) - 2E\left(\frac{y-1}{2y}\right) \right], & y > 1. \end{cases} \quad (7.14)$$

$E(k)$ и $K(k)$ – эллиптические интегралы,

$$y = \frac{\sqrt{e^3 E_F}}{|W|}. \quad (7.15)$$

Полученное выражение верно, если x_1, x_2 – действительные числа. Для этого нужно, чтобы $W \leq W_l$, где $W_l = -\sqrt{e^3 E_F}$.

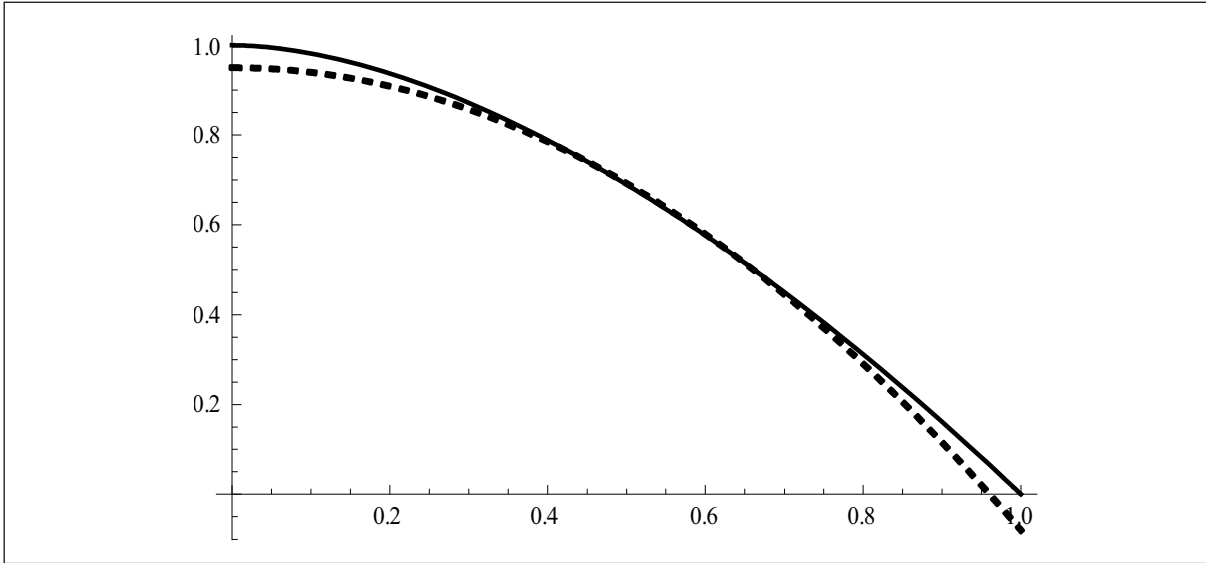


Рис. 8. Графики функции $v(y)$ (сплошной) и ее аппроксимации (прерывистый).

Для упрощения вычислений вместо функции $v(y)$ будем использовать ее аппроксимацию полиномом второй степени:

$$v(y) = 0,95 - 1,03y^2.$$

Сравнение $v(y)$ и ее аппроксимации показано на рис. 8.

Итак, формула (7.8) с учетом (7.10), (7.12)–(7.14) позволяет вычислить плотность эмиссионного тока для металлов. Теперь перейдем к полупроводниковому катоду из кремния, в котором возникают эффекты, отсутствующие в металле [35].

Во-первых, в собственном полупроводнике, каковым является кремний, нужно учитывать эмиссию электронов не только из зоны проводимости, но и из валентной зоны, отделенной от зоны проводимости запрещенной зоной, где электронов нет. Во-вторых, нужно учесть проникновение внешнего электрического поля внутрь полупроводника, что приводит к «загибанию» энергетических уровней.

Вывод плотности тока за счет эмиссии из валентной зоны в полупроводнике в целом аналогичен случаю металла, однако для валентной зоны распределение электронов по энергиям $P(W)$ не имеет максимума вблизи уровня Ферми, который находится уже внутри запрещенной зоны. Максимальный энергетический уровень, который может занимать электрон в валентной зоне, равен $-(\psi + E_g)$, где ψ – ширина зоны проводимости, а E_g – ширина запрещенной зоны. Коэффициент перехода $D(W, E_F)$ имеет максимум при $W = -(\psi + E_g)$, и экспоненциально убывает при уменьшении W .

Еще одно отличие эмиссии из валентной зоны полупроводника от эмиссии из металла – значение потенциала электростатического изображения эмитировавшего электрона. Из-за диэлектрических свойств полупроводника этот потенциал принимает вид [36]

$$V_{image}(x) = -\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \frac{e^2}{4x}, \quad (7.15)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость полупроводника. Тогда величина y в (7.15) примет вид

$$y = \sqrt{\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \frac{\sqrt{e^3 E_F}}{|W|}}, \quad (7.16)$$

и

$$W_l = -\sqrt{\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+1}}\sqrt{e^3 E_F} \quad (7.17)$$

Диэлектрическая проницаемость кремния ε равна примерно 11,9 [35], следовательно

$$\sqrt{\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+1}} \approx 0,92.$$

Формула для плотности тока, вызванного эмиссией из зоны проводимости, аналогична формуле для металлов с той разницей, что в полупроводнике минимальная энергия электронов определяется дном зоны проводимости, поэтому нижний предел интеграла по энергиям равен $-\psi$.

Запишем формулу для плотности тока с учетом распределения электронов по зонам в полупроводнике:

$$\begin{aligned} j_{em} = & \frac{4\pi emkT}{h^3} \int_{-\infty}^{-(\psi+E_g)} \ln\left(1+e^{\frac{\zeta-W}{kT}}\right) \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m|W|^3}}{3\hbar e E_F} v(y)\right) dW + \\ & + \frac{4\pi emkT}{h^3} \int_{-\psi}^{W_l} \ln\left(1+e^{\frac{\zeta-W}{kT}}\right) \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m|W|^3}}{3\hbar e E_F} v(y)\right) dW + \\ & + \frac{4\pi emkT}{h^3} \int_{W_l}^{+\infty} \ln\left(1+e^{\frac{\zeta-W}{kT}}\right) dW. \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим проникновение поля внутрь полупроводника [36]. Поле будет «изгибать» зону проводимости и валентную зону вниз вблизи поверхности, как показано на рис. 9.

Из [35] известно, что «загиб» зоны вблизи поверхности полупроводника приблизительно равен $\nu E_F^{4/5}$, где $\nu = 4,5 \cdot 10^{-7} \varepsilon^{-2/5}$. Модифицируем формулу для плотности эмиссионного тока в полупроводнике с учетом этого эффекта:

$$\begin{aligned} j_{em} = & \frac{4\pi emkT}{h^3} \int_{-\infty}^{-(\psi+\nu E_F^{4/5}+E_g)} \ln\left(1+e^{\frac{\zeta-W}{kT}}\right) \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m|W|^3}}{3\hbar e E_F} v(y)\right) dW + \\ & + \frac{4\pi emkT}{h^3} \int_{-(\psi+\nu E_F^{4/5})}^{W_l} \ln\left(1+e^{\frac{\zeta-W}{kT}}\right) \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m|W|^3}}{3\hbar e E_F} v(y)\right) dW + \\ & + \frac{4\pi emkT}{h^3} \int_{W_l}^{+\infty} \ln\left(1+e^{\frac{\zeta-W}{kT}}\right) dW \end{aligned} \quad (7.18)$$

где y подставляется из формулы (7.16), а ζ - уровень Ферми.

Наконец, учтем зависимость ширины запрещенной зоны от температуры. Известно, что зависимость ширины запрещенной зоны E_g от температуры T находится с помощью соотношения Варшни:

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha_1 T^2}{\alpha_2 + T}, \quad (7.19)$$

где E_0 – ширина запрещенной зоны при температуре 0 К, α_1 и α_2 – константы. Для кремния $E_0 = 1,16$ эВ, $\alpha_1 = 7,021 \cdot 10^{-4}$ эВ/К, $\alpha_2 = 1108$ К. Так как уровень Ферми всегда находится в середине запрещенной зоны [37], то

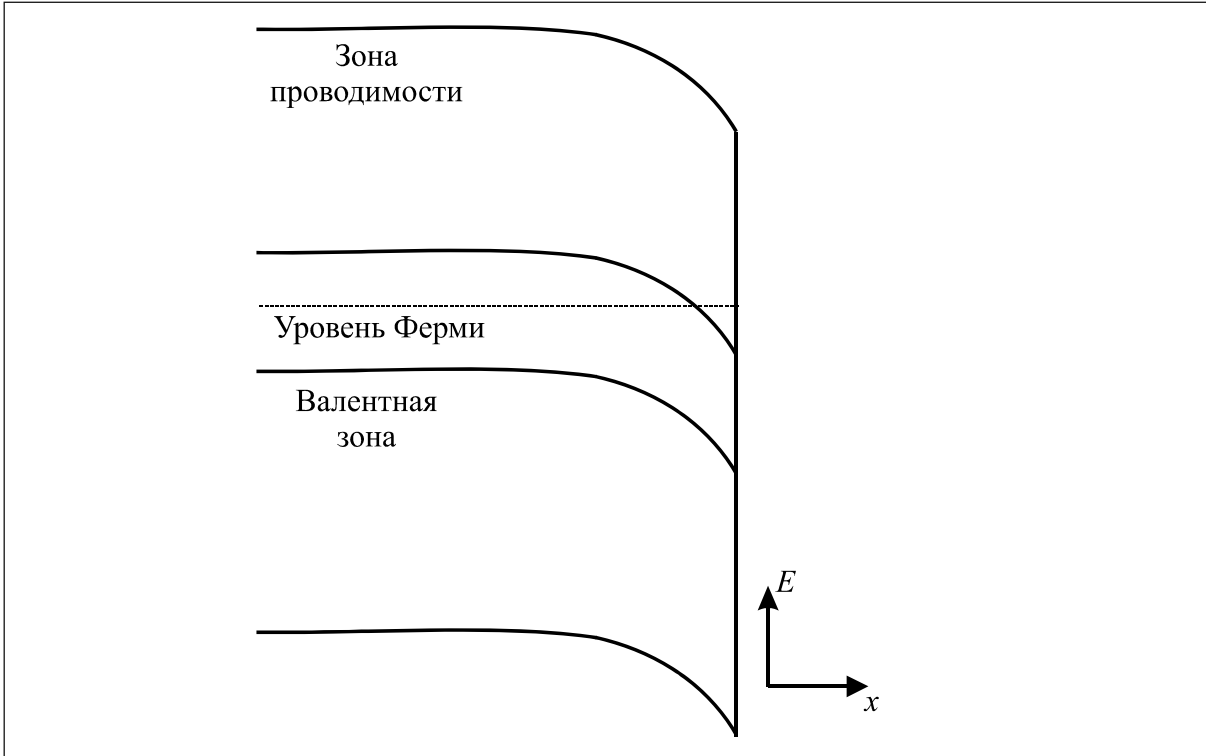


Рис. 9. Изгибание зон в полупроводнике под воздействием внешнего электрического поля.

$$\zeta(T) = - \left(\psi + \frac{1}{2} \left(E_0 - \frac{\alpha_1 T^2}{\alpha_2 + T} \right) \right) \quad (7.19a)$$

Таким образом, окончательная формула для плотности тока получается подстановкой формул (7.17), (7.19), (7.19a) в (7.18), и плотность тока зависит от напряженности внешнего поля и температуры. В нашем напряженность поля на острие катода получилась порядка $10^6 \frac{В}{см}$.

Второй проблемой является вычисление энергии эмитирующих электронов E в формуле (2.9). Напомним, что слагаемое, содержащее энергию E в краевом условии (2.9), отвечает действию эффекта Ноттингама. Для вычисления энергии мы используем приближенную формулу из [1]

$$E = \begin{cases} -0.0589529\theta \operatorname{ctg}(14.6137\theta), & \theta \leq \theta^*, \\ 4.42871 + 0.0417038\theta + \frac{-21.8518 + 0.25058\theta}{4.92306 + (-1 + 9.30338\theta)^{3.48481}}, & \theta > \theta^*. \end{cases} \quad (7.20)$$

Здесь $\theta^* = \frac{c}{l} T^*$, где T^* – инверсионная температура (реальная). В нашем случае

$$T^* \approx 51K.$$

В соответствии с формулой (7.20), если температура катода меньше инверсионной температуры, то эффект Ноттингама нагревающий, а если температура катода больше инверсионной температуры, то эффект Ноттингама охлаждающий. В нашем случае, вблизи температуры плавления, эффект Ноттингама – охлаждающий.

8. Алгоритм вычислений. Разностная схема

Область, в которой производится моделирование, аксиально симметрична. Будем считать, что (заданное) распределение тока в катоде не зависит от угла $\vartheta \in [0, \Theta]$. Этот факт и форма краевых условий приводят к аксиальной симметрии всей задачи. При прохождении тока через катод возможно частичное расплавление катода. Ясно, что, в силу указанной симметрии, зоны с одинаковой фазой будут располагаться слоями внутри катода.

Если на боковой поверхности конуса есть теплоотвод (например, за счет излучения), то жидкая фаза вначале образуется внутри катода с последующим (возможно) выходом свободной границы на боковую поверхность. Конечно, в момент времени и в точке контакта свободной границы с границей области краевое условие на функцию порядка

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\Gamma} = 0 \quad (8.1)$$

не может быть выполнено. Но, пренебрегая силой тяжести мы, все-таки, можем предположить, что зона проплавления трансформируется в слой $0 < R_0 \leq r \leq R$, на границах которого уже выполнено условие (8.1). Такой жидкий слой и его эволюция в первом приближении моделирует реальную эволюцию, начинающуюся с расплавления строго внутри катода.

Перейдем к разностной схеме. Систему (4.9), (4.10) мы решаем численно по следующему алгоритму. На временном шаге k имеем две сеточные функции $\varphi_{i,j,l}^{k,0}$ и $\theta_{i,j,l}^{k,0}$. Вначале решается уравнение (6.10), которому соответствуют следующие разностные уравнения.

$$\begin{aligned} \varepsilon \tilde{\alpha} \frac{\varphi_{i,j,l}^{k,n+1/3} - \varphi_{i,j,l}^{k,n}}{\tau} - \varepsilon \beta \frac{1}{(h_r i)^2} \frac{1}{h_r^2} \left[(h_r(i+1/2))^2 (\varphi_{i+1,j,l}^{k,n+1/3} - \varphi_{i+1,j,l}^{k,n}) - \right. \\ \left. - (h_r(i-1/2))^2 (\varphi_{i,j,l}^{k,n+1/3} - \varphi_{i-1,j,l}^{k,n+1/3}) \right] = \\ = \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - (\varphi_{i,j,l}^{k,n})^2 \right) \varphi_{i,j,l}^{k,n+1/3} + \chi \left(1 - (\varphi_{i,j,l}^{k,n})^2 \right) \left(\theta_{i,j,l}^{k,n} - \frac{c}{l} T_0 \right), \\ i = 2, \dots, I-1, \quad j = 1, \dots, J, \quad l = 1, \dots, L. \end{aligned} \quad (8.5)$$

Этим уравнениям ставятся в соответствие граничные условия

$$\varphi_{1,j,l}^{k,n+1/3} = \varphi_{2,j,l}^{k,n+1/3}, \quad \varphi_{I-1,j,l}^{k,n+1/3} = \varphi_{I-2,j,l}^{k,n+1/3}.$$

Уравнения (6.1) относительно функции $\varphi_{i,j,l}^{k,n+1/3}$ решаются методом прогонки.

Затем решаются разностные уравнения, соответствующие производной по углу ϕ

$$\begin{aligned} \varepsilon \tilde{\alpha} \frac{\varphi_{i,j,l}^{k,n+2/3} - \varphi_{i,j,l}^{k,n+1/3}}{\tau} - \varepsilon \beta \frac{1}{(h_r i)^2} \frac{1}{h_\phi^2 \sin^2(lh_\phi)} \left[\varphi_{i,j+1,l}^{k,n+2/3} - 2\varphi_{i,j,l}^{k,n+2/3} + \varphi_{i,j-1,l}^{k,n+2/3} \right] = \\ = \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - (\varphi_{i,j,l}^{k,n+1/3})^2 \right) \varphi_{i,j,l}^{k,n+2/3} + \chi \left(1 - (\varphi_{i,j,l}^{k,n+1/3})^2 \right) \left(\theta_{i,j,l}^{k,n} - \frac{c}{l} T_0 \right), \\ i = 1, \dots, I, \quad j = 2, \dots, J-1, \quad l = 1, \dots, L. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Этим уравнениям соответствуют граничные условия

$$\varphi_{i,1,l}^{k,n+2/3} = \varphi_{i,J,l}^{k,n+2/3}.$$

Уравнения (8.6) решаются методом прогонки.

На третьем шаге решаются разностные уравнения, соответствующие производной по углу ϑ

$$\begin{aligned}
\varepsilon \tilde{\alpha} \frac{\varphi_{i,j,l}^{k,n+1} - \varphi_{i,j,l}^{k,n+2/3}}{\tau} - \varepsilon \beta \frac{1}{(h_r i)^2} \frac{1}{h_\varphi^2 \sin(lh_\varphi)} & \left[\sin((l+1/2)h_\varphi) (\varphi_{i,j,l+1}^{k,n+1} - \varphi_{i,j,l}^{k,n+1}) - \right. \\
& \left. - \sin((l-1/2)h_\varphi) (\varphi_{i,j,l}^{k,n+1} - \varphi_{i,j,l-1}^{k,n+1}) \right] = \\
= \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - (\varphi_{i,j,l}^{k,n+2/3})^2 \right) \varphi_{i,j,l}^{k,n+1} + \chi \left(1 - (\varphi_{i,j,l}^{k,n+2/3})^2 \right) & \left(\theta_{i,j,l}^{k,n} - \frac{c}{l} T_0 \right), \\
i = 1, \dots, I, \quad j = 1, \dots, J, \quad l = 2, \dots, L-1. &
\end{aligned} \tag{8.7}$$

Этим уравнениям соответствуют граничные условия

$$\varphi_{i,j,1}^{k,n+1} = \varphi_{i,j,2}^{k,n+1}, \quad \varphi_{i,j,L}^{k,n+1} = \varphi_{i,j,L-1}^{k,n+1}.$$

Уравнения (8.7) решаются методом прогонки.

В конце описанной процедуры мы получаем функцию $\varphi_{i,j,l}^{k,n+1}$. Цикл указанных вычислений осуществляется по фиктивным временным шагам $n = 0, \dots, N-1$. Такая процедура позволяет отыскать численное стационарное решение уравнения (6.10) – функцию $\varphi_{i,j,l}^{k+1,0} = \varphi_{i,j,l}^{k,N}$ при заданной температуре $\theta_{i,j,l}^{k,0}$.

Вторым этапом вычислений является нахождение температуры $\theta_{i,j,l}^{k+1,0}$ по найденному значению функции порядка $\varphi_{i,j,l}^{k+1,0}$. Для этого мы используем разностную аппроксимацию для уравнения теплопроводности (6.9). Вначале производим вычисление производной по координате r :

$$\begin{aligned}
\frac{\theta_{i,j,l}^{k,m+1/3} - \theta_{i,j,l}^{k,m}}{\tau} - \frac{\tilde{k}}{(h_r i)^2} \frac{1}{h_r^2} & \left[(h_r(i+1/2))^2 (\theta_{i+1,j,l}^{k,m+1/3} - \theta_{i,j,l}^{k,m+1/3}) - \right. \\
& \left. - (h_r(i-1/2))^2 (\theta_{i,j,l}^{k,m+1/3} - \theta_{i-1,j,l}^{k,m+1/3}) \right] = -\frac{1}{2} \frac{\varphi_{i,j,l}^{k+1,0} - \varphi_{i,j,l}^{k,0}}{\tau} + \gamma F_{i,j,l}^k, \\
i = 2, \dots, I-1, \quad j = 1, \dots, J, \quad l = 1, \dots, L. &
\end{aligned} \tag{8.8}$$

При этом $F_{i,j,l}^k = \frac{t_0}{l\rho} \frac{(j_{i,j,l}^k)^2}{\sigma}$, где сеточная функция $j_{i,j,l}^k$ на каждом временном шаге

находится численно исходя из уравнения (7.18).

Уравнениям (8.8) соответствуют граничные условия

$$\frac{\theta_{2,j,l}^{k,m+1/3} - \theta_{1,j,l}^{k,m+1/3}}{h_r} = \frac{c}{l} \frac{r_0}{\lambda} \frac{j_{em}^k}{e} E_{j,l}^k - \psi \sigma_{SB} \left(\frac{l}{c} \right)^3 \frac{r_0}{\lambda} (\theta_{1,j,l}^{k,m})^4, \quad \theta_{I,j,l}^{k,m+1/3} = -h_r s \left(\frac{c}{l} T_R - \theta_{I-1,j,l}^{k,m+1/3} \right).$$

Для вычисления энергии эмитируемых электронов $E_{j,l}^k$ мы использовали аппроксимационную формулу (5.24), а для вычисления плотности тока эмиссии j_{em} формулу (5.21), которая табулируется.

Уравнения (6.4) решаются методом прогонки.

Производной по углу ϕ соответствуют разностные уравнения

$$\begin{aligned}
\frac{\theta_{i,j,l}^{k,m+2/3} - \theta_{i,j,l}^{k,m+1/3}}{\tau} - \frac{\tilde{k}}{(h_r i)^2} \frac{1}{h_\varphi^2 \sin(lh_\varphi)} & \left[\theta_{i,j,l+1}^{k,m+2/3} - 2\theta_{i,j,l}^{k,m+2/3} + \theta_{i,j,l-1}^{k,m+2/3} \right] = 0, \\
i = 1, \dots, I, \quad j = 2, \dots, J-1, \quad l = 1, \dots, L, &
\end{aligned} \tag{8.9}$$

которым соответствуют граничные условия

$$\theta_{1,j,l}^{k,n+2/3} = \theta_{I,j,l}^{k,n+2/3}.$$

Уравнения (8.9) решаются методом прогонки.

Производной по углу ϑ соответствуют разностные уравнения

$$\frac{\theta_{i,j,l}^{k,m+1} - \theta_{i,j,l}^{k,m+2/3}}{\tau} - \frac{\tilde{k}}{(h_{,i})^2} \frac{1}{h_{\vartheta}^2 \sin(lh_{\vartheta})} \left[\sin((l+1/2)h_{\vartheta}) (\theta_{i,j,l+1}^{k,m+1} - \theta_{i,j,l}^{k,m+1}) - \right. \\ \left. - \sin((l-1/2)h_{\vartheta}) (\theta_{i,j,l}^{k,m+1} - \theta_{i,j,l-1}^{k,m+1}) \right] = 0, \\ i = 1, \dots, I, \quad j = 1, \dots, J, \quad l = 2, \dots, L-1. \quad (8.10)$$

Этим уравнениям соответствуют граничные условия

$$\theta_{i,j,1}^{k,m+1} = \theta_{i,j,2}^{k,m+1}, \quad \theta_{i,j,L}^{k,m+1} = \theta_{i,j,L-1}^{k,m+1}.$$

Уравнения (8.10) так же решаются методом прогонки.

Таким образом, данный алгоритм позволяет расцепить систему (6.9), (6.10) – вначале решается уравнение (6.10) и по найденному значению функции порядка определяется температура из уравнения (6.9).

Кроме того, в алгоритм вычислений введена процедура отыскания стационарного решения (введение фиктивных шагов по времени). Сделано это потому, что, как отмечалось выше, коэффициент \tilde{k} в нашем случае имеет очень большое значение. Этот факт и означает, что уравнение (6.9) вырождается в стационарное уравнение Пуассона.

Также в работу алгоритма мы вводим образование зародыша жидкой фазы. Именно, в области, где температура превышает температуру плавления мы задаем значение функции порядка $\varphi = 0$. Как говорилось ранее, положение равновесия системы в окрестностях точек $\varphi = \pm 1$ является устойчивым, а положение системы при $\varphi = 0$ – неустойчивое. Таким образом, при росте температуры (большей температуры плавления) значение функции порядка в окрестности нуля должно из неустойчивого положения сместиться в устойчивое $\varphi = 1$.

9. Результаты численных экспериментов

Приведем картинку наиболее интересных моментов моделирования: образования жидкой фазы и затвердевания. Далее в этом разделе на всех графиках используется безразмерная температура θ , точка отсчета которой совпадает с безразмерной температурой плавления катода θ_0 .

Рис. 12 иллюстрирует образование зоны проплавления, на нем изображены графики функции порядка φ до образования зоны проплавления (твердая фаза во всей области в момент времени t_0 , $\varphi = -1$), в момент t_1 образования зародыша жидкой фазы (внутри области есть отрезок, на котором функция порядка больше нуля, но меньше единицы) и график для окончательно сформированной области проплавления в момент t_2 (в этой области функция порядка равна единице). Соответствующие графики температуры показаны на рис. 13.

Рис. 14 показывает всю динамику движения свободных границ вплоть до их слияния и исчезновения области жидкой фазы. Соответствующие графики функции порядка приведены на рис. 15. Моменты времени t_0, t_1, t_2, t_3 соответствуют начальным данным, образованию жидкой фазы, моменту, в котором зона проплавления максимальна, исчезновению жидкой фазы соответственно.

Заметим, что описанное поведение модели с явлением затвердевания обнаруживается при наборе параметров, отличном от известного по данным экспериментов [30, 38].

Трудности наблюдения подобного явления в эксперименте могут быть связаны также с тем, что из-за высокой теплопроводности кремния и малых размеров тепло распространяется и выравнивается по всему катоду очень быстро. Поэтому очень трудно экспериментально зафиксировать существенную разницу температур внутри катода, т.е. увидеть границу образования области проплавления: катод как бы плавится и за-

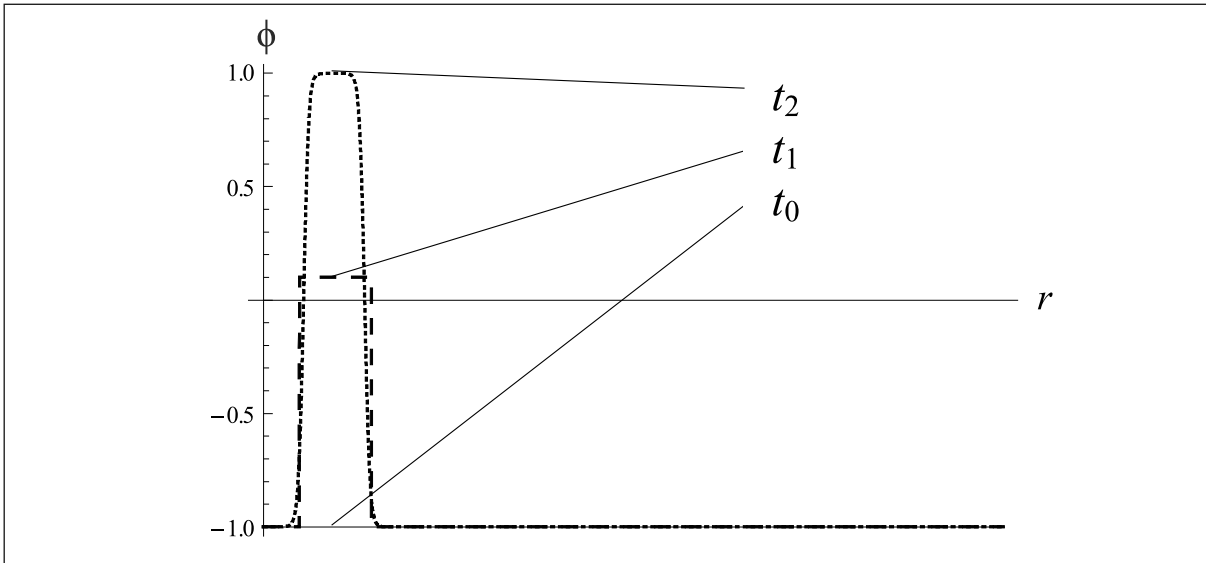


Рис. 12.

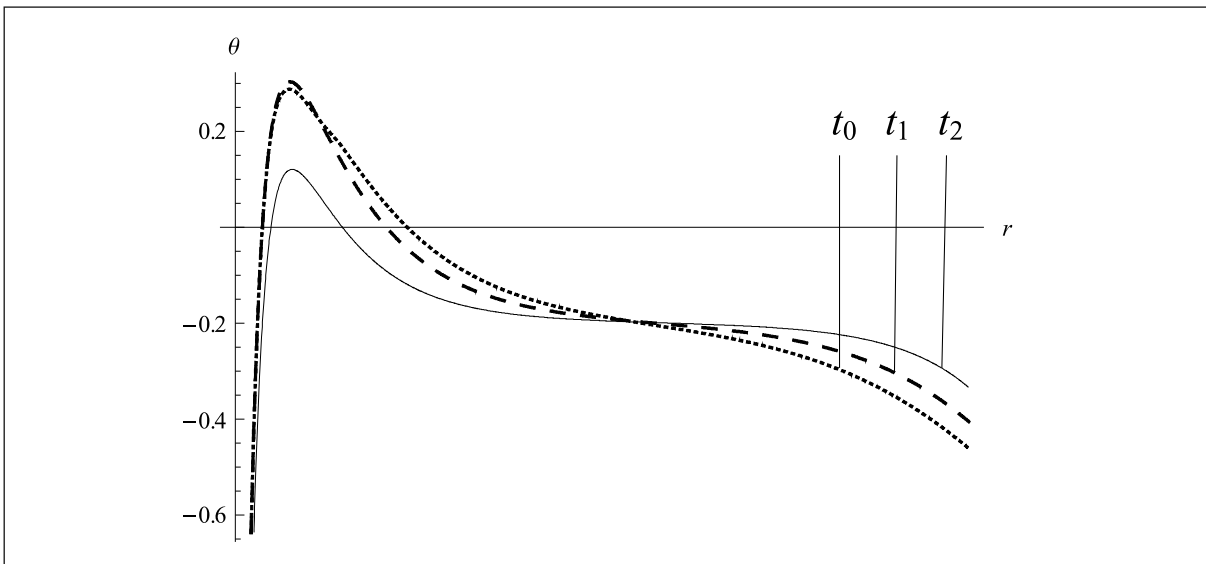


Рис. 13.

твердевает целиком. Это хорошо демонстрируют графики температуры, которые получены при вычислениях с реальными значениями параметров для различных моментов времени $t_0 < t_1 < t_2$ и приведены на рис. 16. На этом рисунке, несмотря на выбор достаточно малого шага, вообще не обнаруживается особое поведение температуры вблизи «острия» (верхнего основания) катода. Там поведение температуры имеет характер пограничного слоя вследствие эффекта Ноттингама. Амплитуда этого пограничного слоя мала, типичный график при $t = t_2$ показан на рис. 17. Графики для остальных моментов времени имеют такой же характер.

Заметим, что распределение температуры одинаково на оси катода, и на его поверхности (рис. 18, 19).

Для того, чтобы в используемой модели образовалась зона проплавления, необходимо выполнение следующих условий: положительная относительная температура внутри области для образования зародыша зоны проплавления и отрицательная относительная температура по краям области. Для того, чтобы зона проплавления не распространилась на весь катод, в двух точках с разных сторон от зоны проплавления

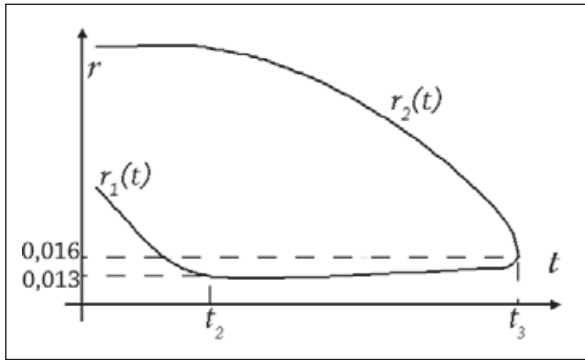


Рис.14.

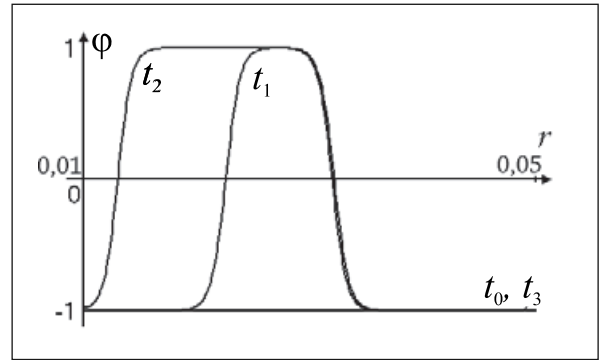


Рис.15.

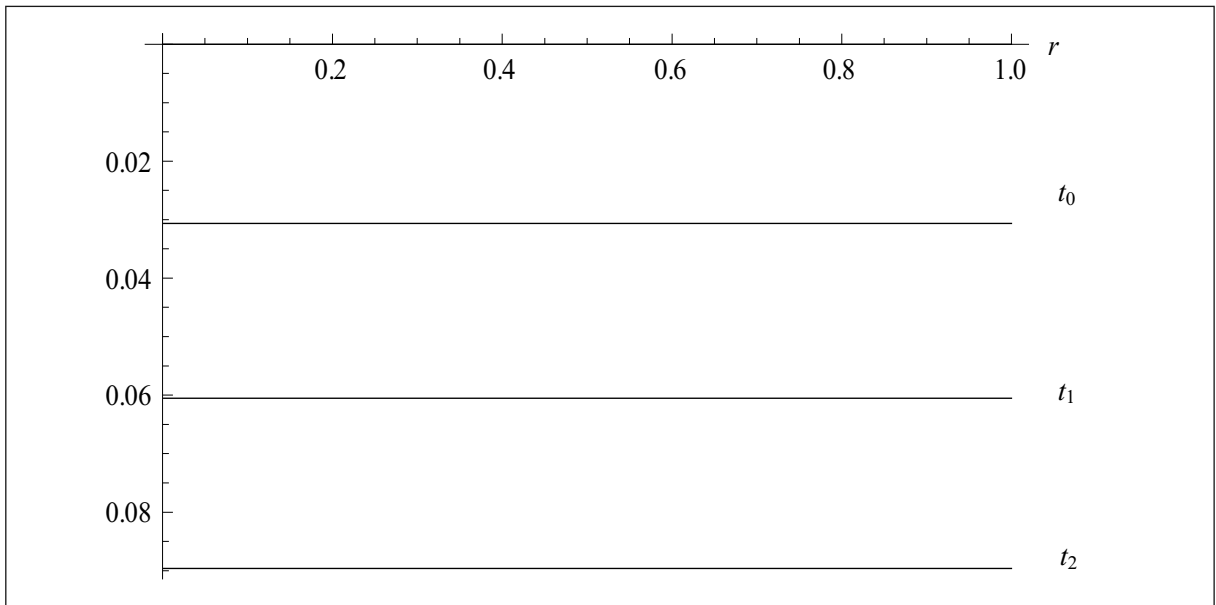


Рис.16. Графики температуры для различных моментов времени при физических параметрах.

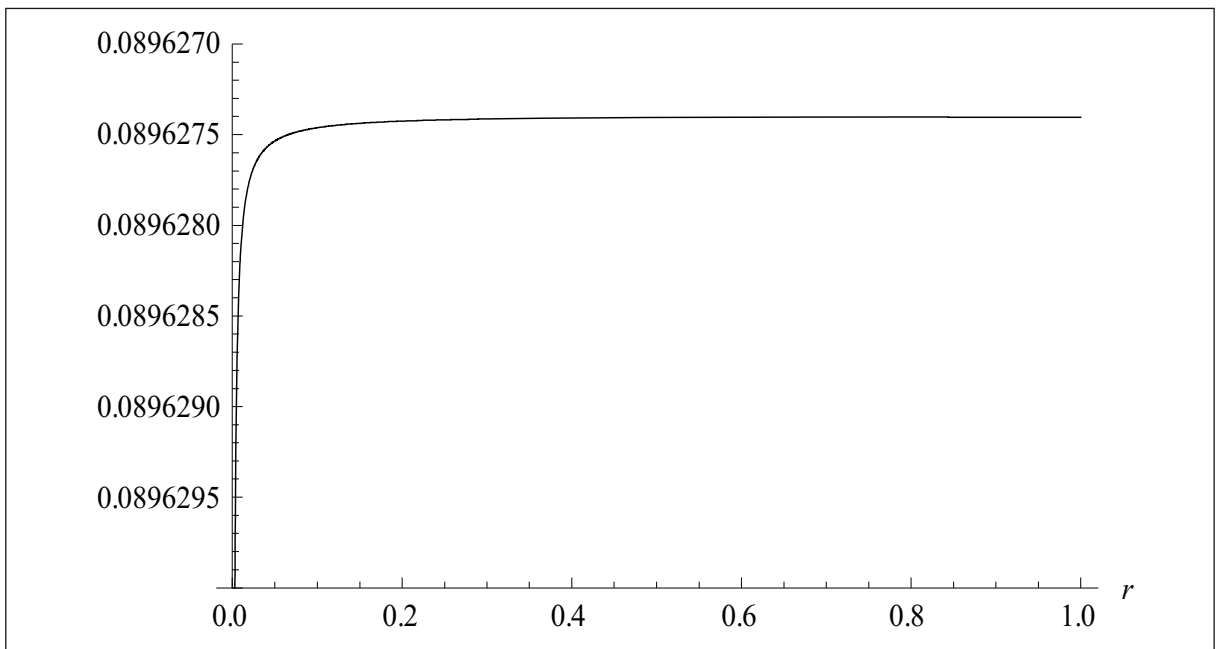


Рис. 17. График температуры для момента времени t_2 при физических параметрах, крупный масштаб.

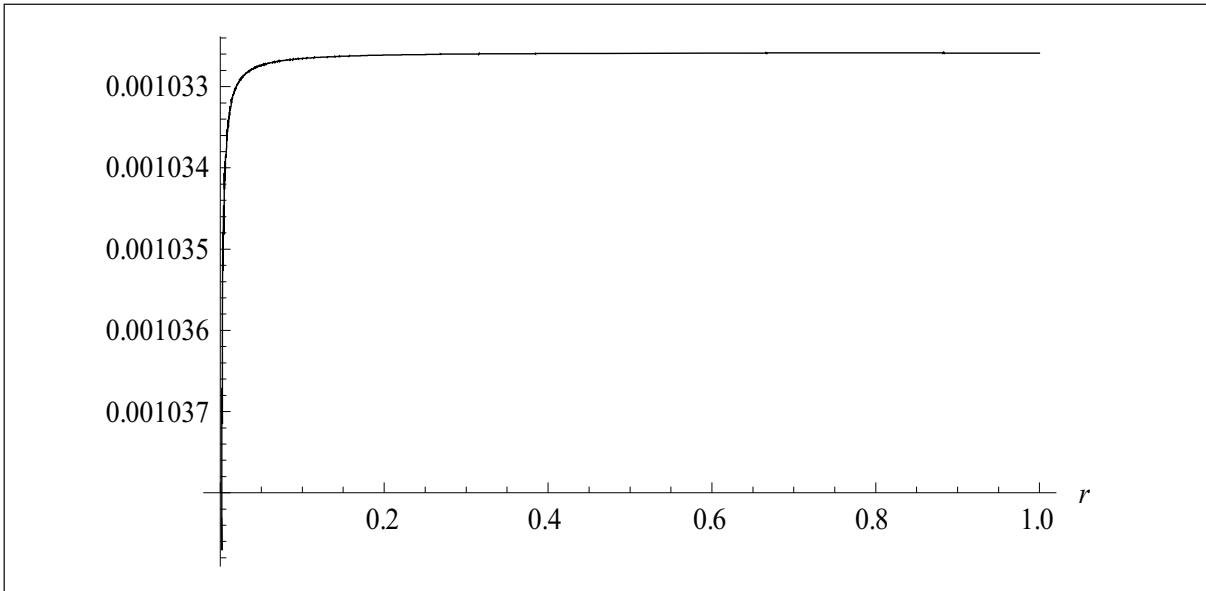


Рис. 18. График температуры на оси катода.

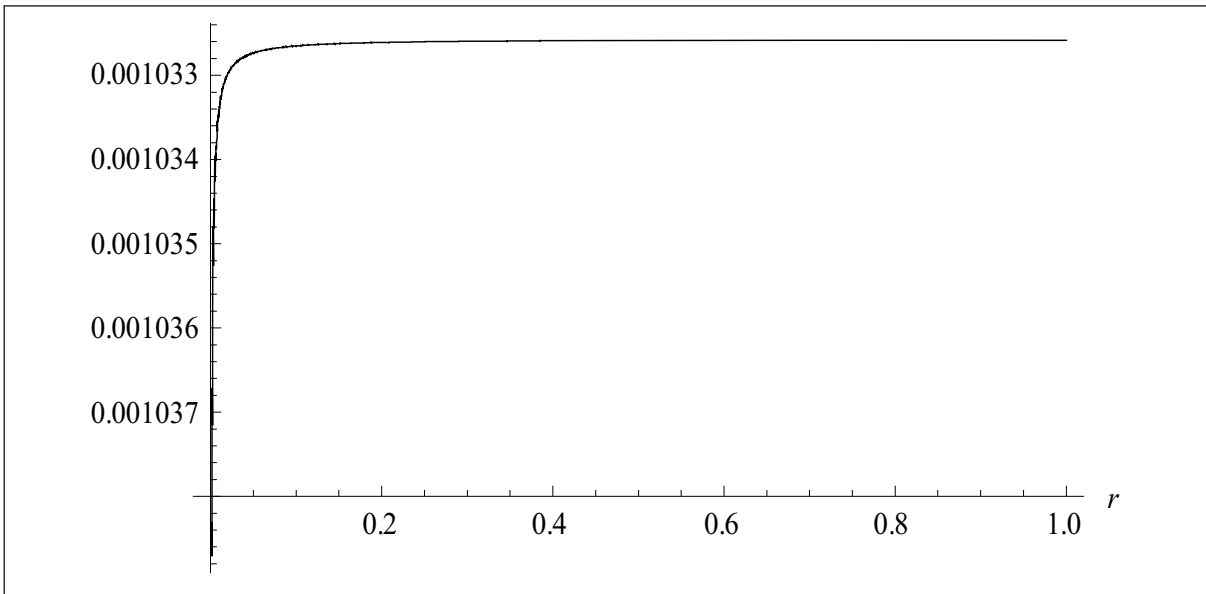


Рис. 19. График температуры на поверхности катода.

должно выполняться условие (4.5) при $r'_i(t) = 0$. В свою очередь, чтобы это условие выполнилось необходимо, чтобы относительная температура была более $-0,0885$ в какой-нибудь точке слева от зоны проплавления, и менее $-0,00133$ справа от зоны проплавления при используемых физических параметрах.

Оценим влияние параметров на изменение поведения модели.

Угол при вершине катода и проводимость катода практически не оказывают влияния на эволюцию температуры.

Зависимость температуры от безразмерного коэффициента \hat{k} при операторе Лапласа (4.3) в уравнении теплопроводности более существенная и приведена на рис. 20.

Имеется сильная нелинейная зависимость температуры от напряжения, приложенного к катоду. Напряжение влияет на плотность тока внутри катода и напряженность поля, которое, в свою очередь, влияет на ток эмиссии, и охлаждение вследствие эффекта Ноттинггама, см. рис. 21.

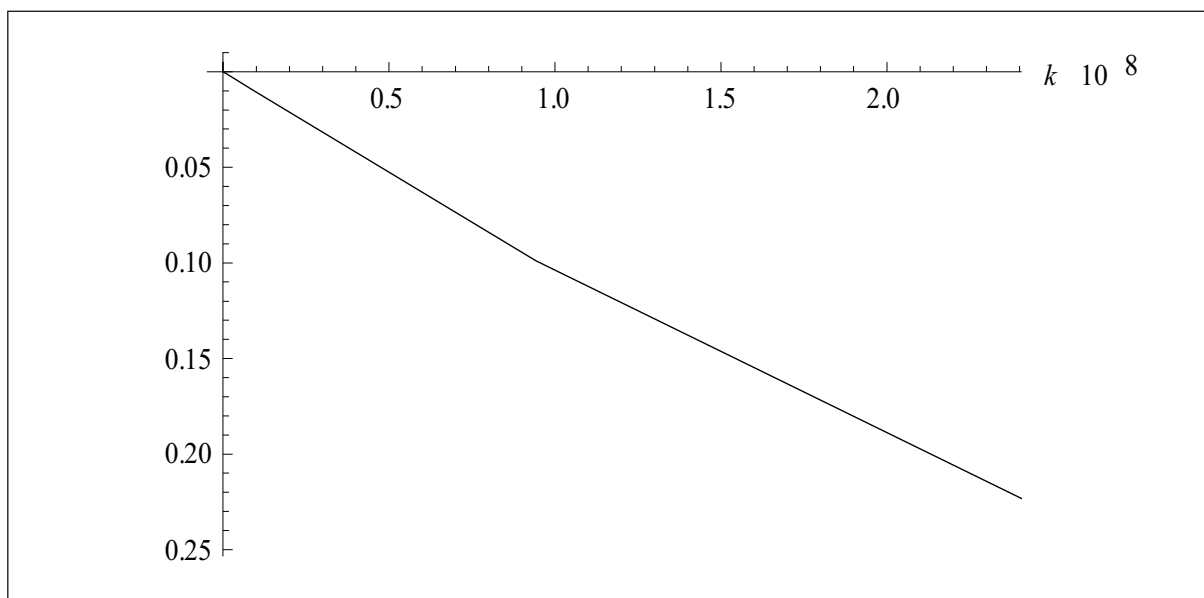


Рис. 20. Зависимость относительной температуры¹ верхнего основания от \hat{k} .

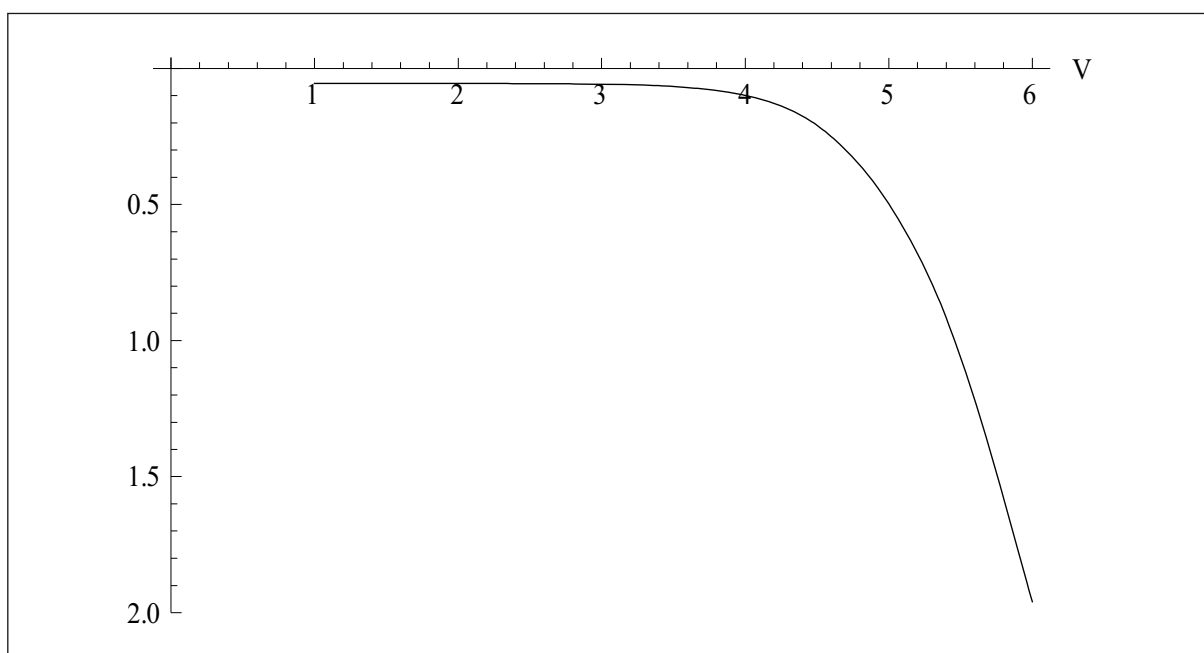


Рис.21. Зависимость относительной температуры верхнего основания от напряжения.

Линейное изменение плотности эмиссионного тока влияет на температуру почти линейно, см. рис. 22. Также существенное влияние оказывает и охлаждение на нижнем основании (рис. 23). Граничное условие на нижнем основании определено как

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial r} \right|_{r=r_{\max}} = -\gamma.$$

Наконец, радиус скругления острия тоже имеет большое значение (рис. 24). В заключение, приведем график потенциала (рис. 25).

¹ На всех графиках зависимости температуры от параметров изображена относительная безразмерная температура на верхнем основании катода.

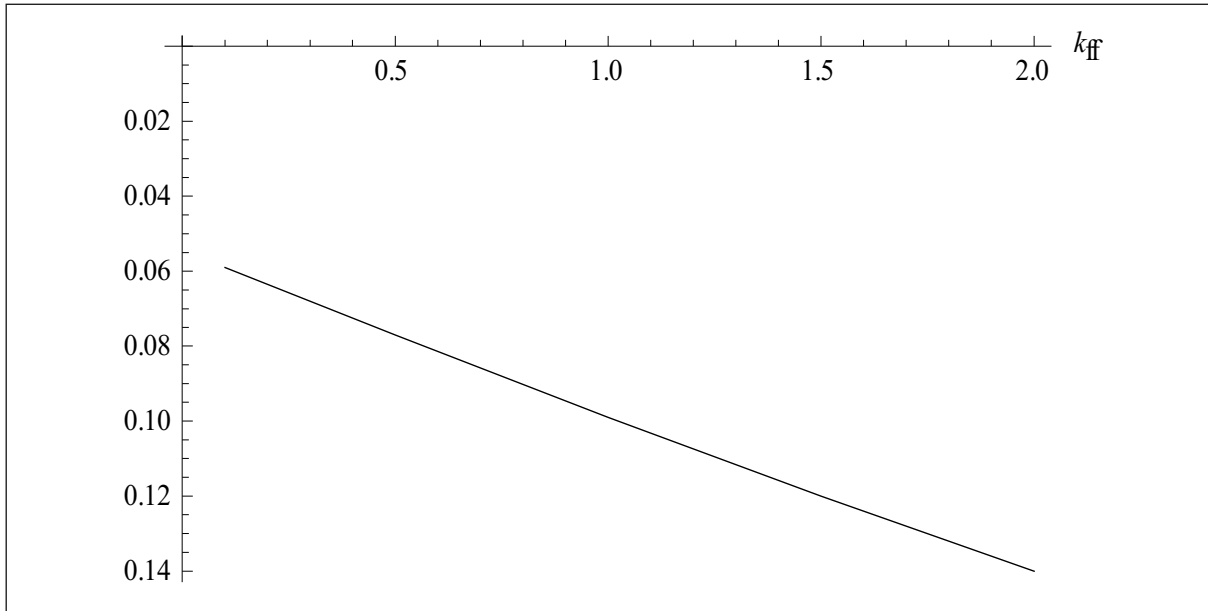


Рис. 22. Зависимость относительной температуры верхнего основания от «форм-фактора» острия².

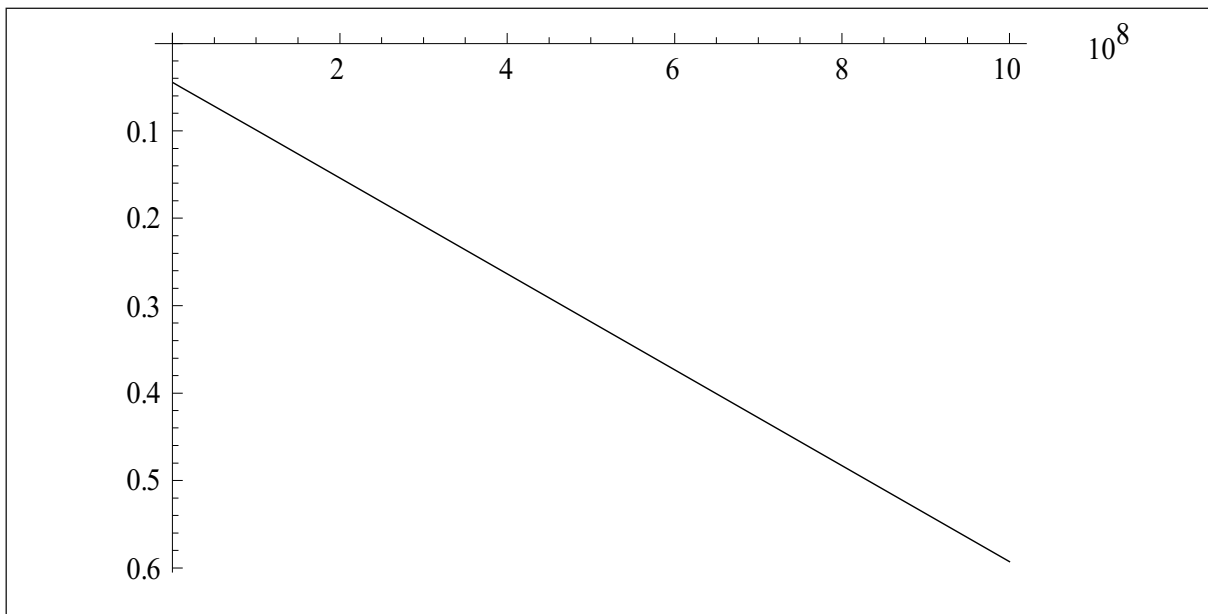


Рис. 23. Зависимость относительной температуры верхнего основания от коэффициента в правом граничном условии, задающего охлаждение нижнего основания.

10. Заключение

В работе предложена система уравнений, описывающая распространение тепла в мало(нано)размерном катоде. Эта система была приведена к безразмерной форме с учетом реальных физических параметров задачи. Оказалось, что (в силу малых размеров и относительно высокой теплопроводности кремния) температура быстро выравнивается в теле катода, за исключением вершины (области эмиссии), где происходит интенсивное охлаждение, обусловленное эффектом Нотингама.

² Поскольку плотность тока эмиссии вычислялась для плоской поверхности, а не острия, вводится поправочный коэффициент, и при расчетах плотность тока определяется как $j_{eval} = k_{ff} \cdot j$, где j_{eval} – плотность тока эмиссии, используемая для моделирования, k_{ff} – поправочный коэффициент («форм-фактор»), j – расчетная плотность тока, найденная по формуле (5.21).

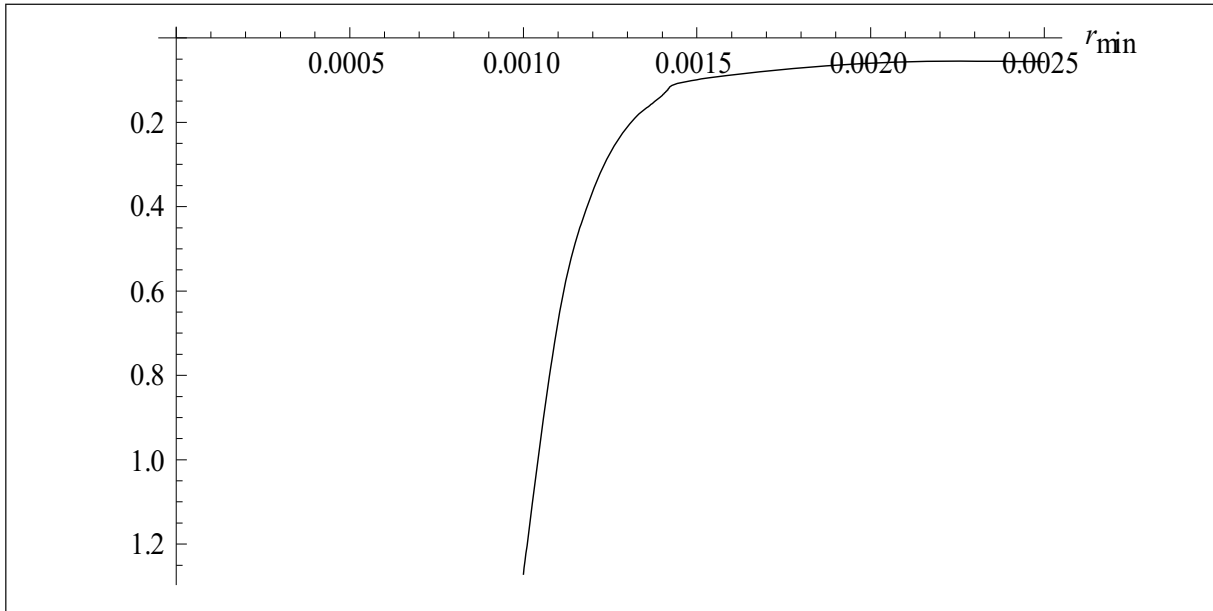


Рис. 24. Зависимость относительной температуры верхнего основания от радиуса скругления острия.

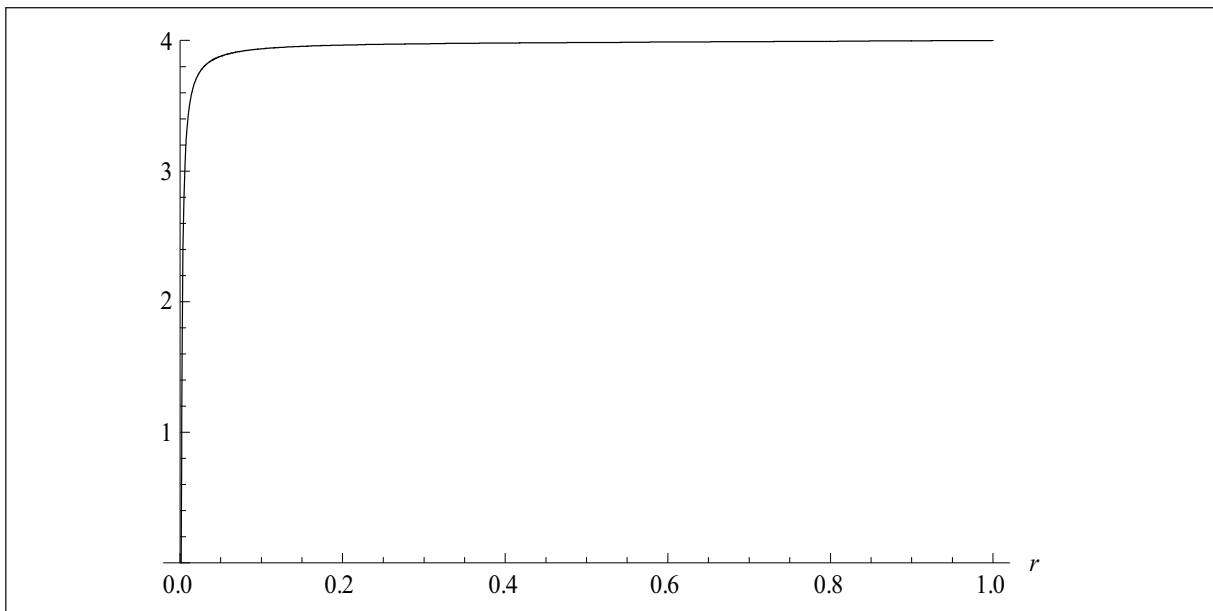


Рис. 25. График потенциала $\Psi(r)$.

В работе выявлены величины, существенно влияющие на характер процесса (напряжение, приложенное к катоду; коэффициент \hat{k} ; радиус скругления острия; охлаждение на нижнем основании; «форм-фактор» острия), а также те, влияние которых не столь велико (угол при вершине катода; проводимость катода). Эта классификация может оказаться важной для последующих экспериментальных работ.

Обезразмеривание показывает, что малые размеры катода приводят к необходимости учитывать кривизну границы раздела фаз (в случае появления жидкой фазы, проплавления). В макросистемах этой величиной, как правило, пренебрегают, рассматривая, классические условия Стефана на границе раздела фаз. Здесь же кривизна определяет положение границы раздела фаз: на границе температура пропорциональна кривизне. Вообще говоря, при малом радиусе верхнего основания, граница не может "до-

браться" до вершины катода (зоны эмиссии), охлаждаемой в силу эффекта Нотингама. Однако, в условиях, которые воспроизводят доступные нам скудные экспериментальные данные, эффект Нотингама плюс выравнивание температуры приводили к тому, что зона проплавления вообще не возникала.

Есть еще один очевидный резерв для борьбы с проплавлением-охлаждением подложки, как это обычно делается в микроэлектронике.

Интересно отметить здесь конкуренцию механизмов охлаждения-проплавления, см. ниже. Меньший диаметр нижнего основания ухудшает охлаждение через подложку, но увеличивает устойчивость относительно проплавления средней зоны.

Также приведем предварительные соображения, которые показывают, что задача моделирования автоэмиссии из нанокатодов должна решаться с учетом геометрии катода, которая может играть существенную роль в тепловом балансе. Переход к безразмерным величинам ниже показывает, что на свободных границах в случае конического острейного катода выполняются условия (6.8). Это значит, что верхняя свободная граница останавливается в области, где отклонение температуры катода от температуры плавления отрицательно (т.е. там, где катод переохлажден). То есть геометрия "помогает" проплавлению, т.к. зона расплава движется в область, где температура меньше температуры плавления.

На рис.26 переход при $r = r_1(t)$ от -1 к $+1$ описывается формулой

$$\varphi \approx \omega \left(\frac{r - r_1(t)}{\varepsilon} \right),$$

где функция ω введена выше. Этому переходу отвечает условие

$$(\bar{\theta} - \bar{\theta}_0) \Big|_{r=r_1(t)} = -\hat{\beta} \frac{1}{r_1(t)}, \quad (10.3)$$

которое уже упоминалось выше. Переходу от $+1$ к -1 при $r = r_2(t)$ отвечает следующее выражение для φ

$$\varphi \approx \omega \left(\frac{r_2(t) - r}{\varepsilon} \right),$$

и ему отвечает граничное условие

$$(\bar{\theta} - \bar{\theta}_0) \Big|_{r=r_2(t)} = \hat{\beta} \frac{1}{r_2(t)}. \quad (10.4)$$

В отличие от условия (10.3), условие (10.4) означает, что зона проплавления останавливается при температуре выше температуры плавления, т.е. условие Гиббса-Томсона мешает проплавлению.

Можно предположить другую геометрию, например, как на рис.27. В этом случае переход от -1 к $+1$ при $r = r_1(t)$ описывается формулой

$$\varphi \approx \omega \left(\frac{r_1(t) - r}{\varepsilon} \right)$$

и условие Гиббса-Томсона на свободной границе имеет вид

$$(\bar{\theta} - \bar{\theta}_0) \Big|_{r=r_1(t)} = \hat{\beta} \frac{1}{r_1(t)},$$

а при $r = r_2(t)$ аналогично получим

$$\varphi \approx \omega \left(\frac{r - r_2(t)}{\varepsilon} \right)$$

и

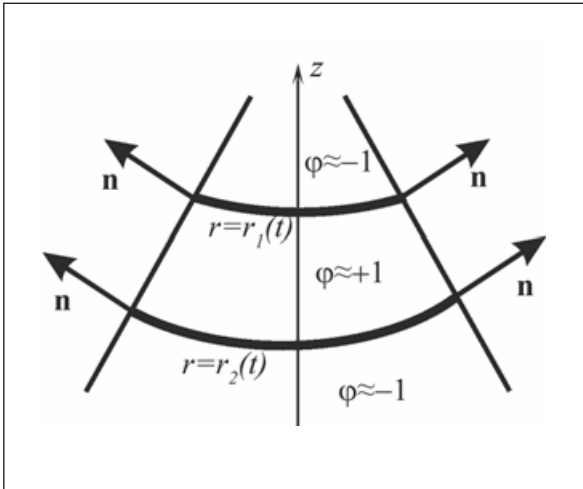


Рис. 26

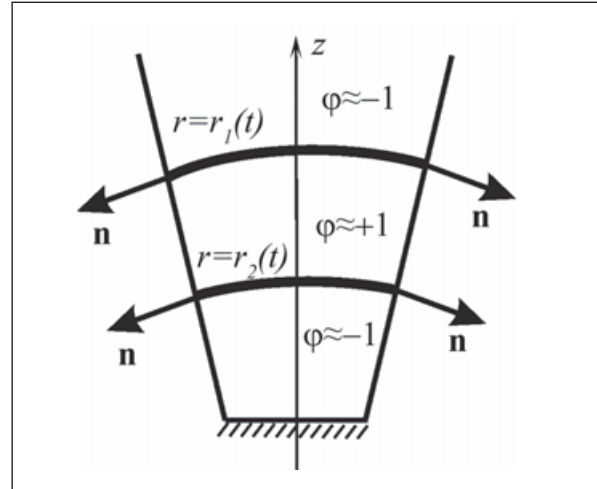


Рис. 27

$$(\bar{\theta} - \bar{\theta}_0) \Big|_{r=r_2(t)} = -\hat{\beta} \frac{1}{r_2(t)}.$$

Таким образом, границы «поменялись» местами по сравнению с рис. 26 и на верхней свободной границе условие Гиббса-Томсона теперь мешает проплавлению. Ясно, что на нижней границе ситуация также поменялась (на худшую), но нижняя граница не участвует в эмиссии и теплоотвод с нижнего основания относительно легко обеспечить, не влияя на эмиссию. Таким образом, можно осуществить теплоотвод от основания катода не влияя на эмиссию электронов и обеспечить более благоприятные условия для работы прибора.

Разумеется, представленные результаты далеко не окончательные. При более детальном исследовании необходимо включить в рассмотрение механические напряжения, возникающие в катоде и определить оптимальную его форму (это реально можно сделать, ограничиваясь, например, телами вращения).

Литература

1. Paulini J., Klein T. and Simon G. Thermo-field emission and the Nottingham effect // J. Phys. D: Appl. Phys., 1993, 26, 1310-1315.
2. Flüge S. Encyclopedia of Physics: Electron-Emission and Gas Discharges // Berlin: Springer, 1956.
3. Murphy E. L. and Good R. H. Thermionic emission, field emission and the transition region // Phys. Rev., 1956, 102, 1464-73.
4. Miller S. C. and Good R. H. A wkb-type approximation to the Schrödinger equation // Phys. Rev., 1953, 91, 174-9.
5. Christov S. G. General theory of electron emission from metals // Phys. Smtw Solidi, 1966, 17, 11-26.
6. Lafferty J. M. Vacuum Arcs; Theory and Application // New York: Wiley, 1980.
7. Lee T. H. T-F theory of electron emission in high-current arcs // J. Appl. Phys., 1959, 30, 166-71.
8. Hantzsche E. Theory of cathode spot phenomena // Physica, 1981, 104C, 3-16.
9. Hantzsche E. The state of the theory of vacuum arc cathodes // Beitrage zur Plasmaphysik, 1983, 23, 77-94.
10. Rakhovsky V. I. State of the art of physical models of vacuum arc cathode spots // IEEE Trans. Plasma Sci., 1987, 15, 481-7.
11. Cohen E. R. and Giacomo P. Symbols, units, nomenclature and fundamental constants in physics // Physica, 1987, 146A, 167.
12. Hantzsche E. The thermo-field emission of electrons in arc discharges // Beitrage zur Plasmaphysik, 1982, 22, 325-46.
13. Abramowitz M. and Stegun I. A. Handbook of Mathematical Functions // US Department of Commerce, 1964.

14. *Gibbs J.W.* Collected Works // Yale University Press, New Haven, 1948.
15. *Chalmers B.* Principles of Solidification // Krieger, NY, 1964.
16. *Elliot C.M. and Ockendon J.R.* Weak and Variational Methods for Moving Boundary Problems // Pitman, Boston, 1982.
17. *Gaginalp G. and Chadam J.* Rocky Mount. J. Math.
18. *Holunbery P.C. and Halperin B.I.* Theory of dynamic critical phenomena // Rev. Modern Phys., 1977, **49**(3), 435-476.
19. *Gaginalp G.* //Arc. Rational Mech. Anal., 92, 205 (1986).
20. *Gaginalp G.* //in Applications of Field Phase Theory to Statistical Mech. of Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin, 216, p.216.
21. *Danilov V.G., Omel'yanov G.A., Radkevich E.V.* Hugoniot type conditions and weak solutions to the phase field system // Eur. Journ. Appl. Math., 1999, 10, 55-77.
22. *Karma A. and Rappel W.-J.* Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics // Phys. Rev. E, 1996, **53**(4), pp. R3017-R3020.
23. *Лаушин А.М.* Исследование динамики фазовых переходов первого рода в процессе направленной кристаллизации чистого металла в переохлажденный расплав на базе модели фазового поля // Препринт ИПМат. им. М.В. Келдыша, 2001.
24. *Howinson S.D.* Cusp Development in Hele-Shaw flow with a free surface // SIAM Journ. on Appl. Math., 1986, **64**(1), 3-29.
25. *Danilov V.G.* On the relation between the Maslov-Whitham method and the weak asymptotics method. Linear and non-linear theory of generalized functions and its applications, // Banach Center Publ., 88, Polish Acad. Sci. Inst. Math., Warsaw, 2010, 55-65
26. *Danilov V.G., Omel'yanov G.A., Radkevich E.V.* Asymptotic behavior of the solution of a phase field system, and a modified Stefan problem // (Russian) Differential'nye Uravneniya, 1995 **31**(3) 483-491, 551; translation in Differential Equations **31** (1995), no. 3, 446-454,
27. *Danilov V.G., Omel'yanov G.A., Shelkovich V.M.* Weak asymptotics method and interaction of non-linear waves. //Asymptotic methods for wave and quantum problems, 33-163, Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2, 208, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2003.
28. *Глазанов Д.В., Баскин Л.М., Фурсей Г.Н.* Кинетика импульсного нагрева острых автокатодов реальной геометрии эмиссионным током высокой плотности // Журнал технической физики, **59**(5), 60-68.
29. *Lax P.D.* Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves // Comm. Pure Appl. Math., 1968, 21, 467-490.
30. *Дюжев Н.А., Махиборода М.А., Кретов В.И., Руднев В.Ю., Чурилин М.Н.* Исследование тепловой деградации кремниевого автоэмиссионного катода как двухфазной системы // Известия вузов, ЭЛЕКТРОНИКА, 2011, **4**(90), 23-29.
31. *Danilov V.G., Rudnev V.Yu., 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, 94.
32. *Danilov V.G., Rudnev V.Yu., Kretov V.I.* Simulation of the heat transfer in the nanocathode // Open Journal of Applied Sciences, 2012, 2, pp. 78-81.
33. *Chen X. and Reitich F.* Local existence and uniqueness of solutions of the Stefan problem with surface tension and kinetic undercooling // IMA Preprint Series, November 1990, 715.
34. *Елинсон М.И., Васильев Г.Ф.* Автоэлектронная эмиссия // М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1958.
35. *Ding M.* Field Emission from Silicon // Massachusetts Institute of Technology, 2001.
36. *Stratton R.* Theory of Field Emission from Semiconductors // Phys. Rev., 1962, **125**(1), 67 - 82.
37. *Бонч-Бруевич В.Л., Калашиников С.Г.* Физика полупроводников // М.: Наука, 1977.
38. *Дюжев Н.А., Гудкова С.А., Махиборода М.А., Федирко В.А.* Исследование эмиссионных свойств кремниевых катодов различной геометрии // Вакуумная наука и техника, материал XII научно-технической конференции с участием зарубежных специалистов (под ред. В.А. Быкова), МИЭМ, Москва, 2005, 221-224.
39. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая механика. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. // М.:Наука, 1989, 768 стр.

**MATHEMATICAL DESCRIPTION
OF THE “MELTING-SOLIDIFICATION” REGIME
IN THE THERMO-FIELD EMISSION CATHODE
IN THE CASE OF NOTTINGHAM EFFECT**

V.G. Danilov, V.Yu. Rudnev, V.I. Kretov, R.K. Gaydukov

*Laboratory for mathematical methods in natural sciences
of National Research University HSE*

vgdanilov@mail.ru

Received 14.08.2012

We introduce a new method for modeling of heat transfer in the thermo-field emission nanocathode. The base of our model is the modified Stefan problem with the special conditions on the free boundary and on the tip of the cathode (Nottingham effect). We use a modification of the phase field system for the numerical simulation. Using numerical simulation we analyze the Nottingham effect influence on the propagation of the interface between the phases in the cathode.

