

Разработка алгоритма и программы расчета автоэмиссионного тока

В самое последнее время повышенный интерес при разработке электронно-оптических систем представляет создание автоэлектронных катодов. Связано это с преимуществами автоэмиссионных катодов по сравнению с другими видами источников свободных электронов, такими как:

- безинерционность;
- отсутствие накала;
- высокая плотность тока автоэмиссии;
- экспоненциально высокая крутизна вольтамперных характеристик.

Данные преимущества ставят перед электронной оптикой задачу точного определения катодного тока пушек с автоэмиссионными катодами. Основные пакеты прикладных программ ориентированы на использование в математической модели закона Фаулера-Нордгейма с неким весовым коэффициентом, определение которого предполагает известную из опыта величину катодного тока. Наличие весового коэффициента в 3D моделях, значения которого колеблется от 1 до 10, оставляет существенную брешь в расчетах оптических систем. Данный коэффициент не имеет никакого отношения к так называемому коэффициенту усиления поля на микроострие, поскольку задача расчета полей в пакетах программ решается строго и не требует корректировок, которые используют в эксперименте, определяя величину напряженности электрического поля исходя из модели плоского конденсатора.

Плотность тока можно найти по формуле $J = \frac{4\pi emkT}{h^3} * \int_0^\infty D(E_x) \ln \left[1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right) \right] dE_x$. Основную сложность в этом расчете представляет нахождение коэффициента прозрачности $D(E)$ потенциального барьера. Для произвольной потенциальной функции эта задача может быть решена прямым численным интегрированием уравнения Шредингера.

В настоящий момент существует два наиболее широко известных численных метода, посвященные расчету автоэмиссионного тока катодов. Эти методы представлены в статье Петрина А.Б. «Термополевая эмиссия электронов из металла и взрывная эмиссия из микроострий» и статье французских ученых V.Semet. Ch. Adessi. T. Capron. в журнале PHYSICAL REVIEW B **75** «Low work-function cathodes from Schottky to field-induced ballistic electron emission: Self-consistent numerical approach».

В решение уравнения Шредингера основной сложностью является постановка граничных условий: действительно, невозможно наперед определить значение волновой функции ни в металле, ни в вакууме. Проблема граничных условий в двух работах решена по разному. В работе французских ученых использована функция Грина, уже однозначно

определяющая граничные условия для задачи с барьером более простой формы, а решение проводится с использованием метода малых возмущений.

В работе Петрина А.Б. использовано представление волновой функции с двух сторон от барьера в виде прямой и встречной волны и проведена перенормировка граничных условий на конечно-разностной сетке.

В данной работе решается задача определения данного коэффициента на основе квантово-механического рассмотрения процесса автоэмиссии и нового численного метода решения уравнения Шредингера.

Математическая модель для нахождения коэффициента прозрачности потенциального барьера

Как уже было сказано, для того, чтобы найти ток автоэлектронной эмиссии, требуется, для начала, вычислить коэффициент прозрачности потенциального барьера. Коэффициент прозрачности для барьера сложной формы вычисляется путем аппроксимации потенциального барьера конечным числом прямоугольников. На рисунке 1 представлен потенциальный барьер сложной формы в виде множества узких прямоугольных барьеров, постоянная распространения в которых имеет вид:

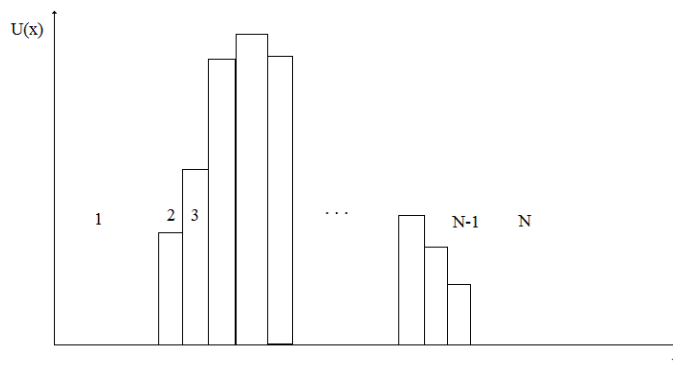


Рисунок 1

$$\gamma_l = \frac{2 \cdot \pi}{h_p} \cdot \sqrt{2 \cdot m_e \cdot (U_l - W)} \quad (1)$$

Падающая и отраженная волны в каждой частичной области, соответственно, будут равны:

$$A_l = a_l \cdot e^{\gamma_l \cdot x_l} \quad , \quad B_l = b_l \cdot e^{-\gamma_l \cdot x_l}$$

Используя граничные условия $\psi(-0) = \psi(+0)$, $\psi'(-0) = \psi'(+0)$ получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} A_l + B_l = A_{l+1} + B_{l+1} \\ \gamma_l \cdot A_l - \gamma_l \cdot B_l = \gamma_{l+1} \cdot A_{l+1} - \gamma_{l+1} \cdot B_{l+1} \end{cases} \quad (2)$$

Решая систему (2) найдем матрицы перехода S_l для каждой границы прямоугольных областей относительно амплитуд.

$$\begin{cases} A_l + B_l = A_{l+1} + B_{l+1} \\ \frac{\gamma_{l+1}}{\gamma_l} \cdot A_{l+1} - \frac{\gamma_{l+1}}{\gamma_l} \cdot B_{l+1} = A_l - B_l \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_{l+1} \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) + B_{l+1} \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) = A_l \\ A_{l+1} \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) + B_{l+1} \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) = B_l \end{cases}$$

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) e^{\gamma_{l+1} x_l} & \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) e^{-\gamma_{l+1} x_l} \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) e^{\gamma_{l+1} x_l} & \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) e^{-\gamma_{l+1} x_l} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} A_{l+1} \\ B_{l+1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_l \\ B_l \end{vmatrix}$$

В общем виде матрица перехода всей области может быть представлена следующим образом:

$$S_l = \begin{vmatrix} \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) \cdot e^{(\gamma_{l+1} - \gamma_l) x_l} & \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) \cdot e^{-(\gamma_{l+1} + \gamma_l) x_l} \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) \cdot e^{(\gamma_{l+1} + \gamma_l) x_l} & \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma_{l+1}}{2 \cdot \gamma_l} \right) \cdot e^{(\gamma_l - \gamma_{l+1}) x_l} \end{vmatrix} \quad (3)$$

$$|S_1| \cdot \begin{vmatrix} A_2 \\ B_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \end{vmatrix}, \quad |S_2| \cdot \begin{vmatrix} A_3 \\ B_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_2 \\ B_2 \end{vmatrix}, \quad \dots$$

$$\|S\| = \prod_{l=1}^{N-1} \|S_l\|$$

$$\|S\| \cdot \begin{vmatrix} A_N \\ B_N \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \end{vmatrix} \quad (4)$$

Из граничных условий и условий нормировки имеем: $A_l = 1$, а $B_N = 0$. Коэффициент проницаемости определяется в виде $D = |A_N|^2$, тогда подставляя значения A_1 и B_N в формулу (4) получаем для нахождения D :

$$D = \left| \frac{1}{S_{11}} \right|^2 \quad (5)$$

Таким образом, решение уравнения Шредингера сведено к процессу вычисления матрицы перехода полной области решения, которая, в свою очередь, формируется из матриц частичных областей простой формы, для которых решения уравнения Шредингера могут быть представлены в аналитическом виде. Физически предлагаемый метод близок к

методам расчета распространения электромагнитных волн в слоистых средах, или к решению телеграфных уравнений для длинных линий со скачками волновых сопротивлений. Математически же реализованный алгоритм ни что иное, как метод конечных элементов: выбор решения в виде прямой и встречной волны эквивалентен выбору базисных функций конечно элементного метода, а выбор области в виде прямоугольника и есть конечный элемент.

Предложенная модель была реализована в виде программного кода в среде Visual Fortran. Основной погрешностью предложенного метода будет являться арифметическая погрешность, т.е. накопление ошибки при умножении матриц передачи, а так же выбор числа разбиений. Построить аналитическую оценку погрешности не представляется возможным, в связи с чем, было проведено решение методической задачи о прохождении частицы через прямоугольный потенциальный барьер и сопоставлены результаты аналитического решения и численной модели.

Сравнение значений коэффициента прозрачности, полученных аналитически с помощью пакета MATHCAD и в программе (Fortran)

Аналитический расчет	Fortran	Относительная погрешность %
$0.727659 \cdot 10^{-4}$	$0.726535 \cdot 10^{-4}$	0.15