

Санкт-Петербургский государственный университет  
Факультет прикладной математики – процессов управления  
Кафедра моделирования электро-механических и компьютерных систем

*Грибкова  
Илга  
Михайловна*

**Математическое моделирование  
работы выхода  
полевого эмиссионного катода**

*Научный руководитель:  
Антонов Андрей Юрьевич*

2011

# Постановка задачи

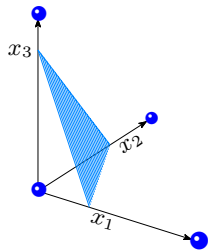
## Цель работы

Построить распределение работы выхода по поверхности полевого эмиссионного катода.

## Задачи

- ✧ Провести литературный обзор для существующих моделей зависимости работы выхода от ориентации эмиссионной поверхности.
- ✧ Создать базу данных значений работы выхода  $\Phi$ , полученных методами натурального эксперимента (на примере вольфрама, молибдена, платины и иридия).
- ✧ Проанализировать регрессионную модель для зависимости работы выхода от индексов Миллера.
- ✧ Построить математическую модель эмиссионной системы с полевым катодом.
- ✧ Провести компьютерное моделирование эмиссионных изображений.

# Индексы Миллера



$$h : k : l = \frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3}$$

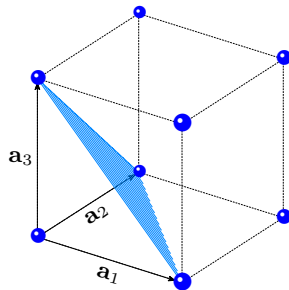
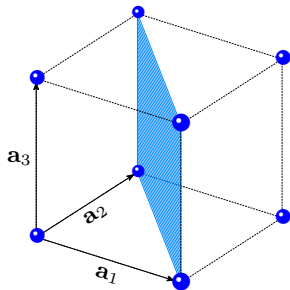
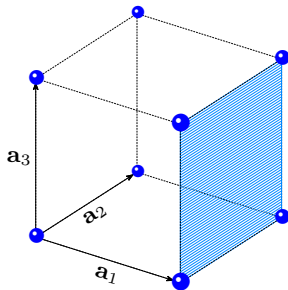


Рис. 1. Грани  $(100)$ ,  $(110)$  и  $(111)$ .

# База данных

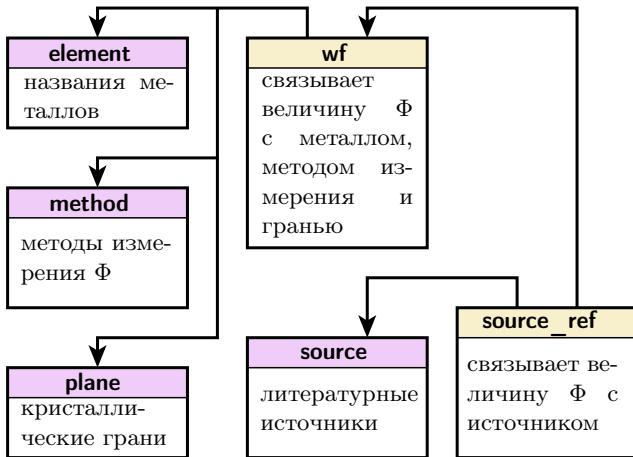


Рис. 2. Диаграмма базы данных.

# Параметр решётки

Параметр решётки:

$$\Delta t = \Delta t(h, k, l) = t^- - t^+. \quad (1)$$

Для объёмноцентрированной кубической решётки:

$$t_{\text{bcc}}^- = \frac{3\pi}{8Q^2} \frac{h+k+l}{(h^2+k^2+l^2)^{\frac{3}{2}}},$$

$$t_{\text{bcc}}^+ = \begin{cases} \frac{0.472}{Q^2} \frac{l}{(h^2+k^2+l^2)^{\frac{3}{2}}}, & \text{если } l-k-h > 0, \\ \frac{0.236}{Q^2} \frac{h+k+l}{(h^2+k^2+l^2)^{\frac{3}{2}}}, & \text{если } l-k-h \leq 0. \end{cases}$$

Для гранецентрированной кубической решётки:

$$t_{\text{fcc}}^- = \frac{\pi}{Q^2} \frac{(l+k)}{(h^2+k^2+l^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad t_{\text{fcc}}^+ = \frac{0.215}{Q^2} \frac{(2l+k)}{(h^2+k^2+l^2)^{\frac{3}{2}}},$$

$$Q = \begin{cases} 1, & \text{если } h+k+l - \text{чётное}, \\ 2, & \text{если } h+k+l - \text{нечётное}. \end{cases}$$

# Регрессионная модель

Зависимость работы выхода от индексов Миллера<sup>1</sup>:

$$\Phi = A + B\Delta t. \quad (2)$$

Параметры  $A$  и  $B$  находятся методом наименьших квадратов.

Остатки  $\varepsilon_i$  вычисляются по формуле:

$$\varepsilon_i = \Phi_i^{\text{exp}} - \Phi_i^{\text{lin}},$$

где

$$\Phi_i^{\text{lin}} = A + B\Delta t(h_i, k_i, l_i),$$

$\Phi_i^{\text{exp}}$  — данные экспериментов.

---

<sup>1</sup>Surma S. A. Correlation of electron work function and surface-atomic structure of some transition metals // Physica Status Solidi A, Vol. 183, №2, 2001, pp. 307–322.

# Ошибки

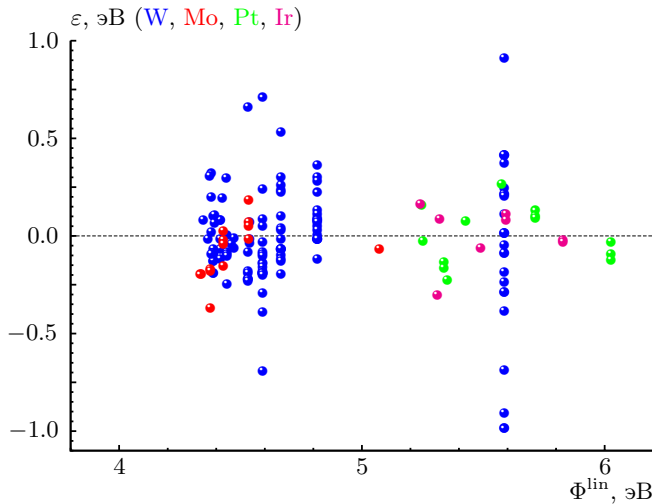


Рис. 3. Распределение ошибок регрессионной модели.

# Исследование распределения ошибок

		W	Mo	Pt	Ir	проверка
Краскал–Уоллис		✓				однородность
Манн–Уитни (Уилкоксон)	W		✓	✓	✓	
	Mo	✓		✓	✓	
	Pt	✓	✓		✓	
	Ir	✓	✓	✓		
Шапиро–Уилк		✓	✓	✓	✓	нормальность
Колмогоров–Смирнов		✓	✓	✓	✓	
Филлибен			✓	✓	✓	
Бартлетт		✓				равенство дисперсий
Самиуддин		✓				
Фишер	W		✓	✓	✓	
	Mo	✓		✓	✓	
	Pt	✓	✓		✓	
	Ir	✓	✓	✓		

Таблица 1. Статистический анализ остатков регрессии.



# Оценки дисперсий

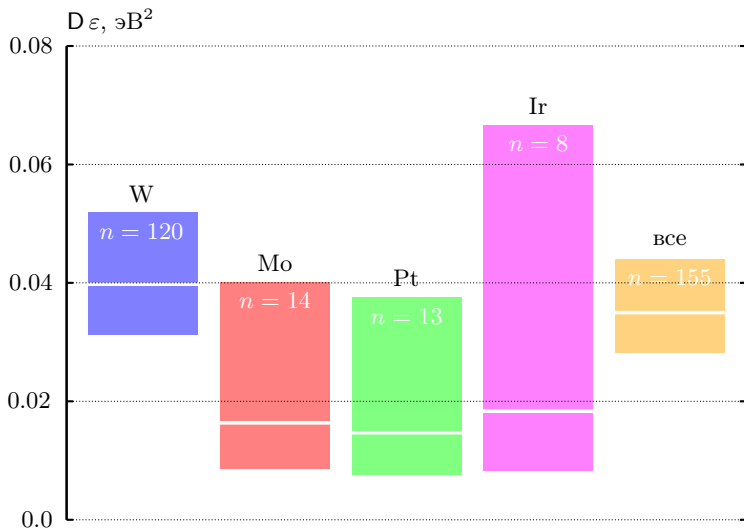


Рис. 4. Интервальные и точечные оценки дисперсий.

# Линейная регрессия

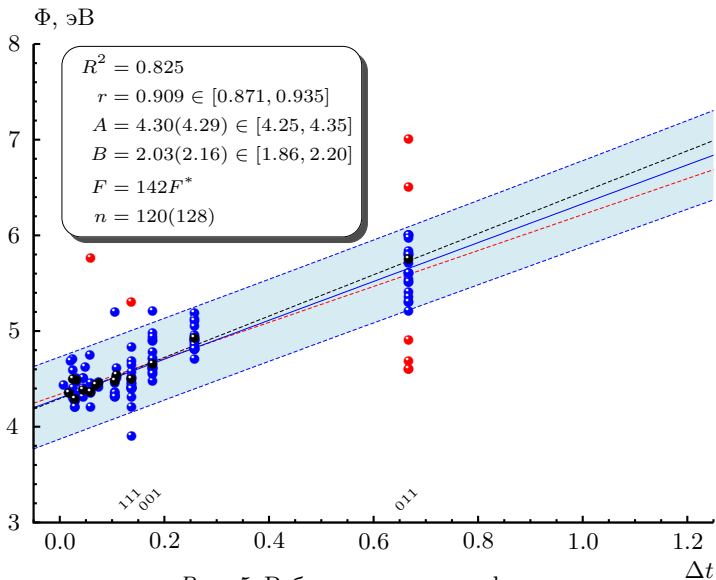


Рис. 5. Работа выхода вольфрама.

# Линейная регрессия

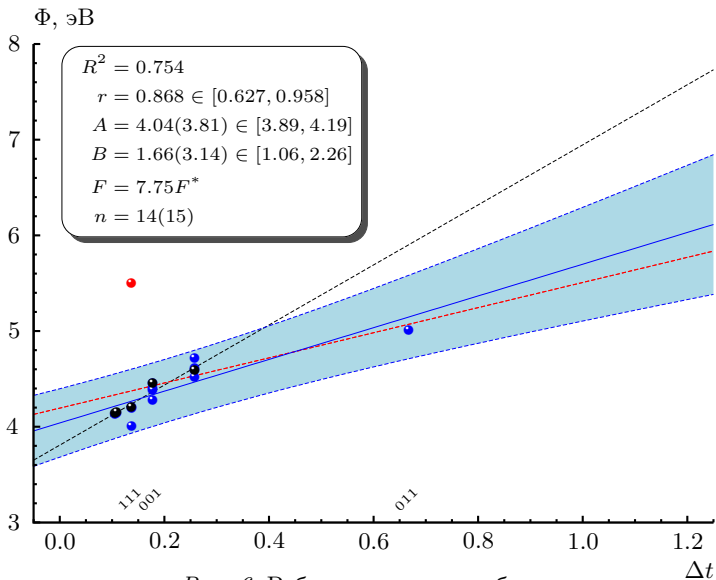


Рис. 6. Работа выхода молибдена.

# Линейная регрессия

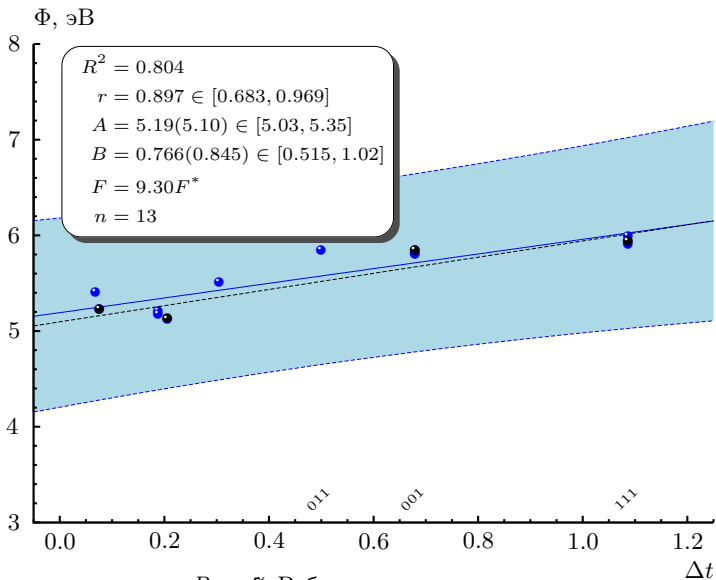


Рис. 7. Работа выхода платины.

# Линейная регрессия

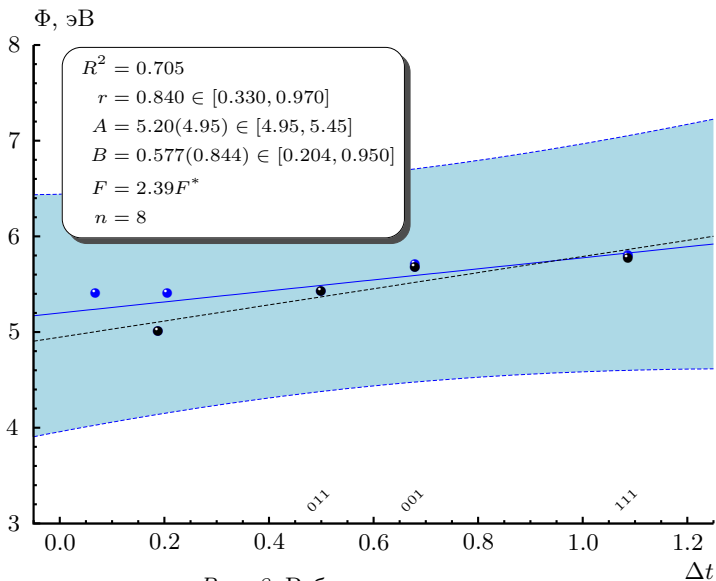


Рис. 8. Работа выхода иридия.

# Доверительные интервалы

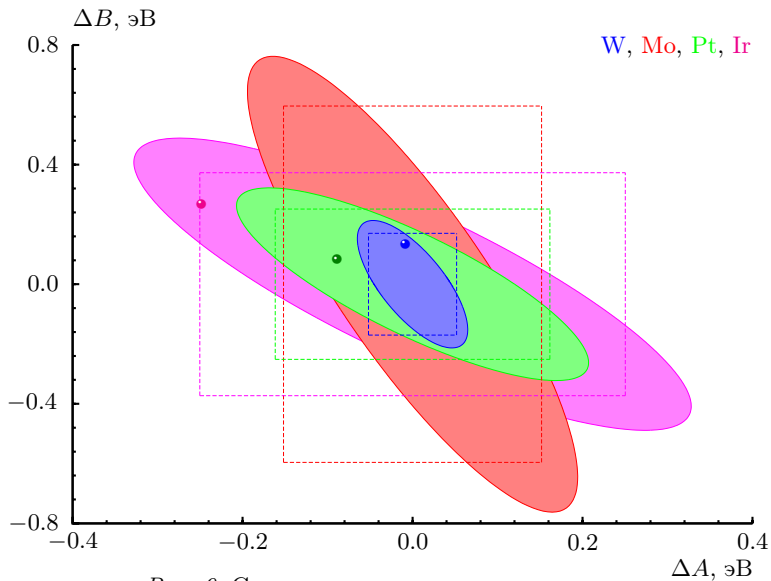


Рис. 9. Совместные доверительные интервалы.

# Математическая модель

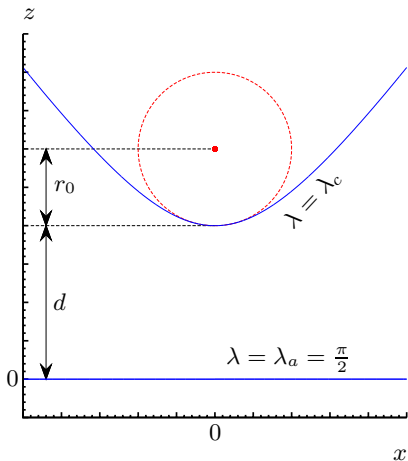


Рис. 10. К определению геометрических параметров катода.

Система координат вытянутого эллипсоида вращения:

$$\begin{cases} x = a_0 \sin \lambda \operatorname{sh} \mu \cos \varphi, \\ y = a_0 \sin \lambda \operatorname{sh} \mu \sin \varphi, \\ z = a_0 \cos \lambda \operatorname{ch} \mu, \end{cases} \quad (3)$$

$$\lambda \in [0, \pi], \mu \in [0, \infty), \varphi \in [0, 2\pi).$$

Фокусное расстояние и координата поверхности катода:

$$a_0 = \sqrt{d(d + r_0)}, \quad (4)$$

$$\lambda_c = \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{r_0}{d}}. \quad (5)$$

# Математическая модель

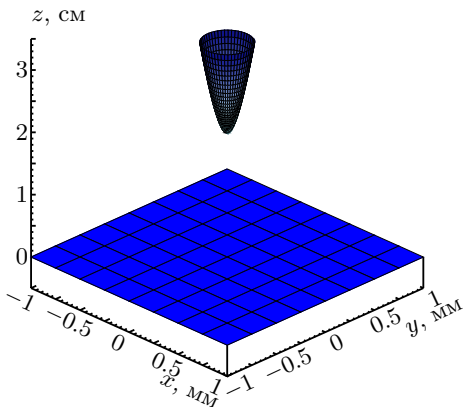
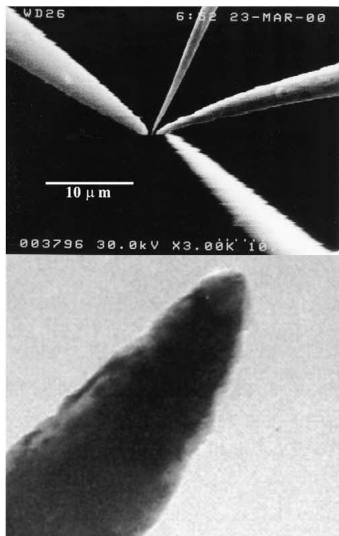


Рис. 11. Диодная система с геометрическими параметрами  $d = 2.0 \cdot 10^{-2}$  м,  $r_0 = 1.0 \cdot 10^{-6}$  м.



# Работа выхода в заданной точке

Имеются данные численного эксперимента по работе выхода для металла:

$$\Phi_i = \Phi(h_i, k_i, l_i),$$

$(h_i, k_i, l_i)$  — индексы Миллера.

Соответствующая нормаль:

$$\mathbf{n}_i^{hkl} = \frac{h_i}{\sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}} \mathbf{e}_x + \frac{k_i}{\sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}} \mathbf{e}_y + \frac{l_i}{\sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}} \mathbf{e}_z. \quad (6)$$

Нормаль к поверхности катода (гиперболоиду)  $\mathbf{n}^{xyz} = (n_x, n_y, n_z)$ :

$$\mathbf{n}^{xyz} = \frac{\cos \lambda_c \operatorname{sh} \mu \cos \varphi}{\sqrt{\sin^2 \lambda_c + \operatorname{sh}^2 \mu}} \mathbf{e}_x + \frac{\cos \lambda_c \operatorname{sh} \mu \sin \varphi}{\sqrt{\sin^2 \lambda_c + \operatorname{sh}^2 \mu}} \mathbf{e}_y + \frac{\sin \lambda_c \operatorname{ch} \mu}{\sqrt{\sin^2 \lambda_c + \operatorname{sh}^2 \mu}} \mathbf{e}_z. \quad (7)$$

Угол  $\vartheta$  между нормальями:

$$(\mathbf{n}_i^{hkl}, \mathbf{n}^{xyz}) = \cos \vartheta.$$

# Работа выхода в заданной точке

Сопоставление нормали и индексов Миллера:

$$J_1(h_i, k_i, l_i) = \max\{|h_i - n_x s_{hkl}|, |k_i - n_y s_{hkl}|, |l_i - n_z s_{hkl}|\}, \quad (8-a)$$

$$J_2(h_i, k_i, l_i) = (h_i - n_x s_{hkl})^2 + (k_i - n_y s_{hkl})^2 + (l_i - n_z s_{hkl})^2, \quad (8-b)$$

$$J_3(h_i, k_i, l_i) = |h_i - n_x s_{hkl}| + |k_i - n_y s_{hkl}| + |l_i - n_z s_{hkl}|, \quad (8-b)$$

$$J_4(h_i, k_i, l_i) = |n_x h_i + n_y k_i + n_z l_i - s_{hkl}|, \quad (8-г)$$

где  $s_{hkl} = \sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}$ .

Ограничения на значения  $h$ ,  $k$  и  $l$ :

$$\max\{h_i, k_i, l_i\} \leq i_{\max}, \quad (9-a)$$

$$\sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2} \leq i_{\max}, \quad (9-b)$$

$$h_i + k_i + l_i \leq i_{\max}. \quad (9-b)$$

# Карта работы выхода

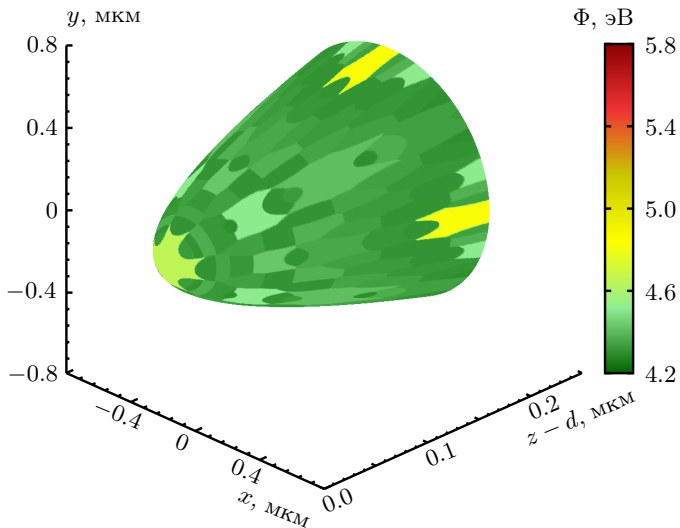


Рис. 12. Карта работы выхода для вольфрама.

# Определение плотности тока эмиссии

Плотность тока (формула Фаулера—Нордгейма):

$$j(E, \Phi) = \frac{e^3}{8\pi h \Phi t^2(y_0)} E^2 \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e E} \Phi^{\frac{3}{2}} v(y_0)\right), \quad (10)$$

$$y_0 = \frac{e}{\Phi} \sqrt{\frac{eE}{4\pi\epsilon_0}},$$

$$v(y) \approx 1 + \frac{y^2(\ln y - 3)}{3}, \quad t(y) \approx 1 + \frac{y^2(1 - \ln y)}{9}.$$

Напряжённость поля:

$$E(\mu) = \frac{V_0}{a_0 \sin \lambda_c \ln \operatorname{ctg} \frac{\lambda_c}{2}} \frac{1}{\sqrt{\sin^2 \lambda_c + \operatorname{sh}^2 \mu}}. \quad (11)$$

Характерные значения напряжённости и напряжения:

$$E(0) = 3.5 \cdot 10^9 \text{ В/м}, \quad V_0 \approx 20 \text{ кВ}.$$

# Эмиссионные изображения

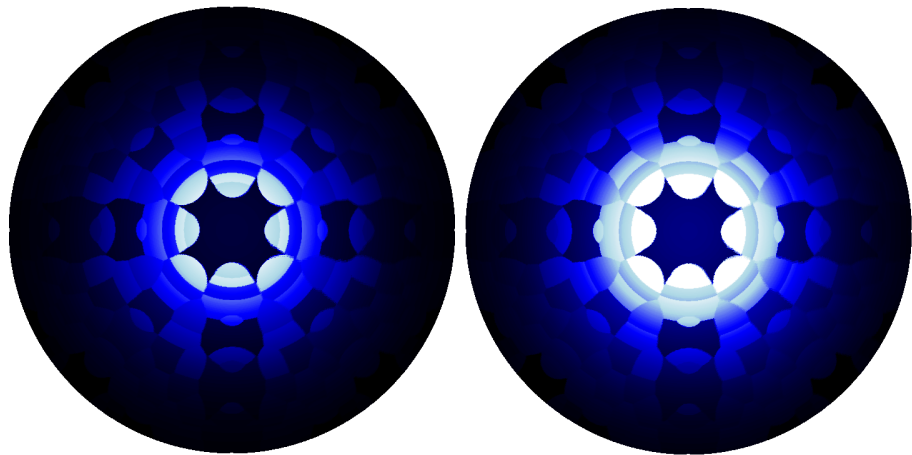
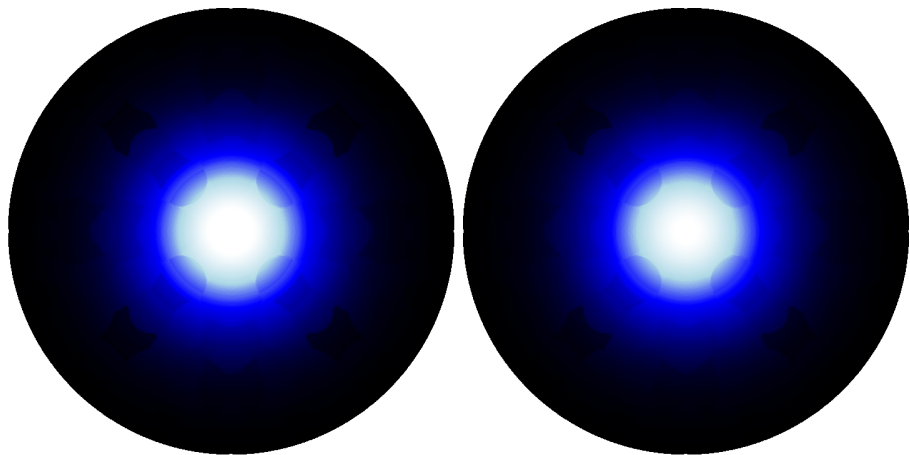


Рис. 13. Эмиссионные изображения для металлов с о. ц. к. решёткой: W и Mo.

# Эмиссионные изображения



*Рис. 14.* Эмиссионные изображения для металлов с г. ц. к. решёткой: Pt и Ir.

# Ориентация катода

Матричные преобразования для поворота монокристалла:

$$\mathbf{T}_\vartheta = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & 0 & \sin \vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \vartheta & 0 & \cos \vartheta \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$\mathbf{T}_\varphi = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$\mathbf{n}_{h_t k_t l_t}^{xyz} = \mathbf{T}_\varphi \mathbf{T}_\vartheta \mathbf{n}_{001}^{xyz}. \quad (14)$$

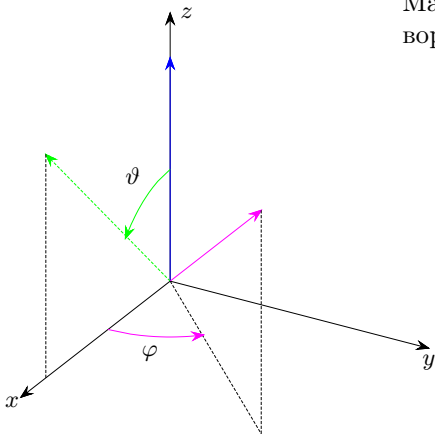


Рис. 15. Поворот нормали.

# Эмиссионные изображения

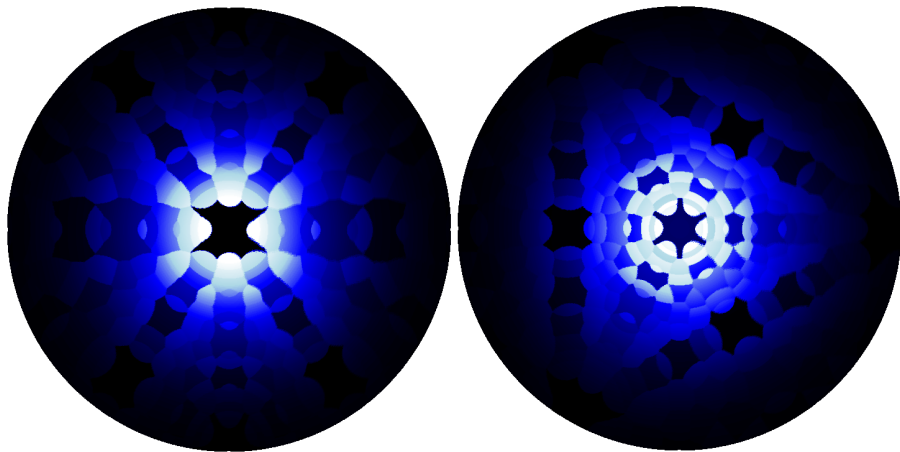


Рис. 16. Эмиссионные изображения для  $[011]$  и  $[111]$ .



# Результаты работы

- ✓ Создана база данных по экспериментальным значениям работы выхода для вольфрама, молибдена, платины и иридия.
- ✓ Построена регрессионная модель зависимости работы выхода от индексов Миллера.
- ✓ Проведён статистический анализ модели. Реализованы алгоритмы критериев однородности и нормальности отклонений опытных данных по работе выхода от прогнозируемых.
- ✓ Построена математическая модель диодной эмиссионной системы с левым катодом.
- ✓ Получено распределение работы выхода по поверхности острия гиперболоидальной формы.
- ✓ Проведено моделирование распределения плотности тока полевой электронной эмиссии по поверхности анода (построение эмиссионных изображений).

Спасибо за внимание!