ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2023, том 63, № 8, с. 1354–1366

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.63

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭМИССИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

© 2023 г. Т. А. Кудряшова[1,*], С. В. Поляков[1,**], Н. И. Тарасов[1,***]

[1] 125047 Москва, Миусская пл., 4, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Россия

*e-mail: kudryashova@imamod.ru

**e-mail: polyakov@imamod.ru

***e-mail: nikita_tarasov@imamod.ru

Поступила в редакцию 25.02.2023 г.
Переработанный вариант 14.03.2023 г.
Принята к публикации 28.04.2023 г.

Рассмотрена проблема расчета процессов электронной эмиссии с поверхности металлов при сильных электромагнитных полях с учетом релятивистских эффектов. Одним из методов моделирования в данной области является метод частиц, сочетающийся с сеточным расчетом полей на основе уравнений Максвелла. Подобные методики развиваются с 1960-х годов по настоящее время. При этом существующие подходы все еще имеют определенные ограничения. В настоящей работе для аксиально-симметричной геометрии, генерирующей системы, представлена новая численная методика моделирования процессов эмиссии электронов с поверхности металлических катодов. Методика использует представление крупных сглаженных гауссовых частиц и реализует расчеты электромагнитных полей на декартовых пространственных сетках. Программная реализация ориентирована на параллельные вычисления. Целью численных экспериментов было определение параметров электронной эмиссии. В качестве тестовых задач были выбраны диодные и триодные цилиндрические системы. В численных расчетах получены пространственно-временные характеристики релятивистских электронных пучков, порождаемых эмиссионными процессами, в том числе воспроизведен ток Чайлда–Ленгмюра. Разработанная численная методика подтвердила свою корректность и эффективность. Библ. 42. Фиг. 7.

Ключевые слова: электронная эмиссия, сильные электромагнитные поля, сеточные методы, методы частиц, параллельные вычисления.

DOI: 10.31857/S0044466923080100, **EDN:** WSWCXJ

ВВЕДЕНИЕ

Традиционно большой интерес представляют задачи о строении веществ и композитных материалов на их основе (см. [1, 2]). Один из экспериментальных способов исследования новых перспективных материалов основывается на воздействии пучка заряженных частиц на изучаемое вещество. В рамках этой технологии используется интенсивное импульсное воздействие на материал. В связи с этим разрабатываются генераторы сильноточных пучков и приборы на их основе (см., например, [3–6]). Наиболее востребованными являются коротко-импульсные генераторы релятивистских электронных пучков (РЭП) с длительностью импульса в диапазоне микро- и наносекунд (см. [7, 8]), которые не разрушают структуру материала.

Генерация РЭП часто основывается на явлении взрывной эмиссии электронов (ВЭЭ) (см. [9, 10]), которая существенно превосходит по энергии выхода как термоэлектронную (см. [11]), так и полевую автоэлектронную эмиссии (см. [12, 13]). Экспериментальному и теоретическому анализам этого явления посвящена обширная литература (см. [6]). Однако наряду с уже известными закономерностями остаются еще вопросы реализации конкретных приборов на основе ВЭЭ. Они решаются в том числе с помощью методов математического и компьютерного моделирования.

Для математического моделирования процессов, составляющих основу сильноточной электроники, с 70-х годов прошлого века создавались необходимые вычислительные основы (см., например, [14–18]) и соответствующие пакеты программ COMSOL (см. [19]), Ansys (см. [20]), КАРАТ (см. [21]), MEEP (см. [22]) и др. Общий тренд численного анализа данного класса задач базируется на применении сеточных методов контрольных объемов или конечных элементов в пространстве-времени FDTD (Finite Difference Time Domain) к решению уравнений Максвелла (см. [16, 21–24]). В дополнение применяются методы частиц в различных модификациях (см., например, [25–32]).

Современный технический потенциал, увеличение возможностей натурных и компьютерных экспериментов, а также широкие перспективы практического использования результатов фундаментальных исследований привели к бурному развитию сильноточного приборостроения. С внедрением этого оборудования в научных лабораториях и на производстве возник интерес к более детальному изучению эмиссионных процессов. В частности, это связано с использованием мощных электронных и ионных пучков в задачах напыления тонких пленок и установках нанолитографии.

Как известно, общей задачей практического применения эффекта эмиссии является создание источников электромагнитного излучения для технологических и хозяйственных целей. Среди типов источников различают электронные, ионные, оптические, смешанные и специальные. Одним из массово используемых механизмов эмиссии является электронная эмиссия, которая чаще всего принимает следующие формы:

• термоэлектронная эмиссия, при которой дополнительная энергия сообщается электронам в результате нагрева катода;

• фотоэлектронная эмиссия, при которой на поверхность катода воздействует электромагнитное излучение;

• полевая эмиссия, при которой сильное электрическое поле у поверхности катода создает силы, способствующие выходу электронов за его пределы;

• взрывная эмиссия – это электронно-ионный вариант в сильных полях, явление вырывания ионов с поверхности твердого тела под действие потоков электронов.

В ряде случаев различные механизмы эмиссии реализуются одновременно. Например, при действии тлеющего разряда на катод одновременно возникают четыре вида эмиссии: ионно-электронная, фотоэлектронная и эмиссия под действием быстрых невозбужденных атомов. Комбинация вторичной электронной эмиссии и эмиссии, возникающей в результате действия сильного электрического поля в тонком слое диэлектрика или полупроводника, называется эффектом Мальтера.

В настоящей работе исследуется взрывная эмиссия, сопровождаемая образованием плазмы и пучков релятивистских электронов (РЭП). Общей целью работы является разработка вычислительной технологии и комплекса параллельных программ для моделирования эмиссионных процессов взрывного типа, а в перспективе – численный анализ взаимодействия пучков частиц с различными средами и материалами. Технология включает разработку комплексной математической модели, множества численных методов, параллельных алгоритмов, комплекса расчетных программ для вычислительных кластеров и суперкомпьютеров, цифровой платформы для проведения детальных численных экспериментов. Для верификации разработанной численной методики использовались данные из [33–35].

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В математической модели необходимо иметь минимально два уровня описания – сплошная среда для полей (электрических, магнитных, тепловых) и описание в рамках моделей частиц. Мотивацией такого подхода является то, что модели сплошной среды позволяют рассматривать системы произвольного размера, которые актуальны для приложений, а модели частиц позволяют исследовать тонкие эффекты, связанные со свойствами сред и материалов.

Итоговым выбором для математического описания проблемы на первом этапе исследования явились: полная система уравнений Максвелла для электромагнитных полей, уравнение теплопроводности в твердых материалах, уравнения гидродинамики как альтернатива моделям частиц и описание крупных частиц, дополняемое при необходимости моделями молекулярной динамики.

В настоящей работе использованы уравнения Максвелла и специальная модель крупных сглаженных частиц. Последняя имеет тесные связи с методами частиц в ячейках (PiC – Particles in Cells) (см. [25–27]), крупных частиц (LPM – Large-Particle Method) (см. [28, 29]), облаков в ячейках (CIC – Cloud In Cell) (см. [30]), сглаженных частиц в гидродинамике (SPH, SPE –

Smoothed-Particles in Hydrodynamics) и электродинамике (Smoothed-Particles in Electrodynamics) (см. [31, 32]). Поясним эти связи.

Во-первых, рассматриваемая нами проблема эмиссии связана с фактом рождения отдельных заряженных частиц (электронов). Появление этих частиц стимулируется средним полем, отнесенным к ячейке сетки, примыкающей к эмиссионной поверхности. Размер ячейки определяет количество рождаемых частиц. Первоначальная форма частиц также зависит от размера ячейки. В этом смысле применяется метод PiC.

Во-вторых, объединение отдельных заряженных частиц в макрочастицу (облако) и дальнейший анализ ее эволюции описываются уже методом крупных частиц, похожим на LPM. Однако специфика этого метода предполагает чередование эйлеровых и лагранжевых расчетных алгоритмов. Нами же используется несколько иной подход, в рамках которого макрочастицы движутся на фоне неподвижной эйлеровой сетки в условиях сохранения массы и заряда макрочастиц на этой сетке. Также нами предполагается возможность туннелирования одних частиц через другие, что не соответствует LPM, но находится в согласии с волновой природой зарядов.

В-третьих, форма частицы в свободной от границ зоне расчетной области имеет гауссов профиль, выходящий за рамки одной ячейки. Такой подход соответствует методу CIC. Однако при приближении к границам форма макрочастицы может искажаться (в методах CIC она обычно фиксирована). Например, при соприкосновении с металлической поверхностью включается механизм поглощения, и часть макрочастицы исчезает. При соприкосновении с диэлектрической поверхностью макрочастица может растекаться вдоль нее или частично отразиться. Таким образом, здесь присутствует аналогия с методами сглаженных частиц SPH и SPE.

Далее в работе обсуждаются основные компоненты модели, численные подходы для их реализации и результаты модельных расчетов.

1.1. Уравнения Максвелла

Основу модели составляют уравнения Максвелла, которые в СИ вместе с материальными уравнениями имеют вид

$$\begin{aligned} &\operatorname{div}\mathbf{D} = \rho, \quad \operatorname{div}\mathbf{B} = 0,\\ &\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t},\\ &\mathbf{D} = \varepsilon_a\mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_a\mathbf{H}. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{D}$ и $\mathbf{B}$ — векторы электрической и магнитной индукций, $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ — векторы напряженности электрического и магнитного полей, $\rho = \rho_- + \rho_+$ — объемная плотность зарядов, $\rho_- = q_-n_-$ и $\rho_+ = q_+n_+$ — плотности отрицательно и положительно заряженных частиц, $q_- < 0$ и $q_+ > 0$ — заряды частиц, n_- и n_+ — объемные концентрации частиц, $\mathbf{j} = \mathbf{j}_- + \mathbf{j}_+$ — суммарная плотность токов частиц, $\mathbf{j}_- = \rho_-\mathbf{v}_-$ и $\mathbf{j}_+ = \rho_+\mathbf{v}_+$ — плотности токов частиц, $\mathbf{v}_-$ и $\mathbf{v}_+$ — средние скорости частиц, $\varepsilon_a = \varepsilon\varepsilon_0$ и $\mu_a = \mu\mu_0$ — абсолютные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, где μ_0 и ε_0 — магнитная и диэлектрическая проницаемости вакуума, c — скорость света.

Уравнения (1) рассматриваются в области цилиндра Ω, не занятой катодом Ω_C и анодом Ω_A, т.е. в $\Omega_D = \Omega/(\Omega_C \cup \Omega_A)$. С учетом материальных уравнений и кусочно-постоянных ε и μ из (1) можно получить

$$\begin{aligned} &\operatorname{div}(\varepsilon_a\mathbf{E}) = \rho, \quad \operatorname{div}\mathbf{B} = 0,\\ &\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot}\left(\frac{1}{\mu_a}\mathbf{B}\right) = \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_a\mathbf{E}). \end{aligned} \tag{1$'$}$$

1.2. Релятивистская динамика частиц

Как указано выше, нами используется специальный метод крупных частиц применительно к задачам эмиссионной электродинамики. В его рамках вместо классических уравнений неразрывности и импульса сплошной среды используются уравнения релятивистской динамики, записанные для отдельных заряженных частиц:

$$
\begin{gathered}
\frac{d\mathbf{r}_{\alpha,k}}{dt} = \mathbf{v}_{\alpha,k}, \quad \frac{d\mathbf{p}_{\alpha,k}}{dt} = \mathbf{F}_{\alpha,k} = q_{\alpha,k}\left(\mathbf{E} + [\mathbf{v}_{\alpha,k} \times \mathbf{B}]\right), \\
\mathbf{p}_{\alpha,k} = m_\alpha \mathbf{v}_{\alpha,k}\gamma_{\alpha,k}, \quad \gamma_{\alpha,k} = 1/\sqrt{1 - (v_{\alpha,k}/c)^2}, \quad k = 1,\ldots,N_\alpha, \\
n_\alpha = \sum_{k=1}^{N_\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,k}), \quad \rho_\alpha = \sum_{k=1}^{N_\alpha} q_{\alpha,k}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,k}), \\
\mathbf{v}_\alpha = \frac{1}{N_\alpha}\sum_{k=1}^{N_\alpha} \mathbf{v}_{\alpha,k}, \quad \mathbf{j}_\alpha = \sum_{k=1}^{N_e} q_{\alpha,k}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,k})\mathbf{v}_{\alpha,k}, \quad \mathbf{p}_\alpha = \frac{1}{N_\alpha}\sum_{k=1}^{N_\alpha} \mathbf{p}_{\alpha,k}.
\end{gathered} \tag{2}
$$

Здесь $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,k})$ – дельта-функция Дирака, описывающая плотность заряда частицы сорта α (например, α = “–” – для электронов, α = “+” – для положительно заряженных частиц, например, ионов плазмы), N_α – число частиц сорта α, $\mathbf{p}_{\alpha,k}$ – плотность импульса частицы, $\gamma_{\alpha,k}$ – релятивистская поправка к скорости, $v_{\alpha,k} = |\mathbf{v}_{\alpha,k}|$ – модуль скорости частицы.

Уравнения (2) можно модифицировать в целях описания электродинамики крупных частиц. Для этого объединим несколько частиц сорта α в “крупную” частицу и обозначим число таких частиц как $N_\alpha^{(p)}$. Тогда вместо (2) получим

$$
\begin{gathered}
\frac{d\mathbf{r}_{\alpha,l}^{(p)}}{dt} = \mathbf{v}_{\alpha,l}^{(p)}, \quad \frac{d\mathbf{p}_{\alpha,l}^{(p)}}{dt} = \mathbf{F}_{\alpha,l}^{(p)} = q_{\alpha,l}^{(p)}\left(\mathbf{E} + \left[\mathbf{v}_{\alpha,l}^{(p)} \times \mathbf{B}\right]\right), \\
\mathbf{p}_{\alpha,l}^{(p)} = m_{\alpha,l}^{(p)}\mathbf{v}_{\alpha,l}^{(p)}\gamma_{\alpha,l}^{(p)}, \quad \gamma_{\alpha,l}^{(p)} = 1/\sqrt{1 - \left(v_{\alpha,l}^{(p)}/c\right)^2}, \quad m_{\alpha,l}^{(p)} = k_{\alpha,l}^{(p)}m_\alpha, \quad q_{\alpha,l}^{(p)} = k_{\alpha,l}^{(p)}q_\alpha, \quad l = 1,\ldots,N_\alpha^{(p)}, \\
N_\alpha = \sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} k_{\alpha,l}^{(p)}, \quad n_\alpha \approx n_\alpha^{(p)} = \sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} k_{\alpha,l}^{(p)}\overline{\delta}\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,l}^{(p)}\right), \quad \rho_\alpha \approx \rho_\alpha^{(p)} = \sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} q_{\alpha,l}^{(p)}\overline{\delta}\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,l}^{(p)}\right), \\
q_{\alpha,l}^{(p)} = \pm e k_{\alpha,l}^{(p)}, \quad \mathbf{v}_\alpha \approx \mathbf{v}_\alpha^{(p)} = \frac{1}{N_\alpha^{(p)}}\sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} \mathbf{v}_{\alpha,l}^{(p)}, \quad \mathbf{j}_\alpha \approx \mathbf{j}_\alpha^{(p)} = \sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} q_{\alpha,l}^{(p)}\overline{\delta}\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,l}^{(p)}\right)\mathbf{v}_{\alpha,l}^{(p)}, \\
\mathbf{p}_\alpha \approx \mathbf{p}_\alpha^{(p)} = \frac{1}{N_\alpha^{(p)}}\sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} \mathbf{p}_{\alpha,l}^{(p)}, \quad \rho^{(p)} = \rho_-^{(p)} + \rho_+^{(p)}, \quad \mathbf{j}^{(p)} = \mathbf{j}_-^{(p)} + \mathbf{j}_+^{(p)}.
\end{gathered} \tag{2'}
$$

Здесь $\overline{\delta}\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha,l}^{(p)}\right)$ – модифицированная дельта-функция, описывающая плотность заряда, создаваемую одной крупной частицей во всем пространстве, e – заряд электрона, знак “+” или “–” в выражении для $q_{\alpha,l}^{(p)}$ определяется типом частиц.

Здесь и ниже будем считать, что частицы сорта α = “–” представляют собой облака электронов, частицы сорта α = “+” представляют собой скопления положительно заряженных ионов.

1.3. Модификация уравнений Максвелла

Уравнения Максвелла в исходном виде не очень удобны для последующего численного решения сеточными методами. В связи с этим многие исследователи используют принцип суперпозиции полей для выделения отдельных их компонент. Наш подход не является исключением. В его рамках векторы электрического и магнитного полей представим в виде сумм квазистатических и нестационарных компонент:

$$
\mathbf{E} = \overline{\mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{E}}, \quad \mathbf{B} = \overline{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}}, \tag{3}
$$

где $\overline{\mathbf{E}}$ и $\overline{\mathbf{B}}$ удовлетворяют уравнениям Лапласа

$$
\operatorname{div}(\varepsilon_a \nabla u) = 0, \quad \overline{\mathbf{E}} = -\nabla u; \quad \operatorname{div}\left(\frac{1}{\mu_a}\nabla\phi\right) = 0, \quad \overline{\mathbf{B}} = -\nabla\phi. \tag{4}
$$

Здесь u и ϕ – электростатический и магнитостатический скалярные потенциалы. Уравнения (1)' с учетом (3), (4) примут вид

$$\begin{gathered} \operatorname{div}\left(\varepsilon_a \tilde{\mathbf{E}}\right) = \rho^{(p)}, \quad \operatorname{div}\tilde{\mathbf{B}} = 0, \\ \frac{\partial \tilde{\mathbf{B}}}{\partial t} = -\operatorname{rot}\tilde{\mathbf{E}}, \quad \operatorname{rot}\left(\frac{1}{\mu_a}\tilde{\mathbf{B}}\right) = \mathbf{j}^{(p)} + \frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon_a \tilde{\mathbf{E}}\right). \end{gathered} \tag{5}$$

Поле $\tilde{\mathbf{E}}$ представим в виде поля зарядов и волн:

$$\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{E}}^{(p)} + \tilde{\mathbf{E}}^{(w)}. \tag{6}$$

Тогда уравнения (5) для слагаемых $\tilde{\mathbf{E}}$ примут вид

$$\begin{gathered} \operatorname{div}\left(\varepsilon_a \tilde{\mathbf{E}}^{(p)}\right) = \rho^{(p)}, \quad \operatorname{div}\left(\varepsilon_a \tilde{\mathbf{E}}^{(w)}\right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon_a \tilde{\mathbf{E}}^{(w)}\right) = \operatorname{rot}\left(\frac{1}{\mu_a}\tilde{\mathbf{B}}\right) - \mathbf{j}^{(p)} - \frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon_a \tilde{\mathbf{E}}^{(p)}\right). \end{gathered} \tag{7}$$

Зарядовую часть динамического поля определяем через квазистатический потенциал:

$$\tilde{\mathbf{E}}^{(p)} = -\nabla u^{(p)}, \quad -\operatorname{div}\left(\varepsilon_a \nabla u^{(p)}\right) = \rho^{(p)}. \tag{8}$$

1.4. Граничные и начальные условия

Системы уравнений (3)–(8) и (2)' дополняются граничными и начальными условиями, которые зависят от конкретной конструкции исследуемой технической системы. Будем считать, что в качестве таких систем выступают множества проводников в вакууме при наличии или отсутствии компактных слоев низкотемпературной квазинейтральной плазмы. При необходимости плазма задается системой зарядов, также описываемой в рамках вышеуказанного метода крупных частиц.

1.4.1. Граничные условия для поля. Граничные условия для потенциала электростатического поля задаются следующим образом:

$$u = u_A = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_A; \quad u = u_C, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_C; \quad \left(\bar{\mathbf{E}}, \mathbf{n}\right) = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_F. \tag{9_1}$$

Здесь $\partial\Omega_A$ – внутренняя поверхность анодов исследуемой технической системы, $\partial\Omega_C$ – внешняя поверхность ее катодов, $\partial\Omega_F$ – свободные поверхности.

Магнитостатическое поле не вычисляется, а задается некоторым распределением компонент во всей расчетной области:

$$\bar{\mathbf{B}} = \left(B_r, B_\varphi, B_z\right)^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{r} \in \Omega. \tag{9_2}$$

Граничные условия для зарядовой части динамического электрического поля имеют следующий вид:

$$u^{(p)} = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_A \cup \partial\Omega_C; \quad \left(\tilde{\mathbf{E}}^{(p)}, \mathbf{n}\right) = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_F. \tag{9_3}$$

Граничные условия для волновой части нестационарных полей являются следствием из общих граничных условий. Так, в приближении идеальной проводимости на металлических поверхностях последние задаются в виде

$$\left[\mathbf{E} \times \mathbf{n}\right] = 0, \quad \left(\mathbf{B} \cdot \mathbf{n}\right) = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_A \cup \partial\Omega_C. \tag{9_4}$$

Граничные условия на свободных границах имеют вид

$$\left(\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}\right) = 0, \quad \left(\mathbf{B} \cdot \mathbf{n}\right) = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_F. \tag{9_5}$$

Граничные условия на оси симметрии ($r = 0$) задаются следующим образом:

$$\left[\mathbf{E} \times \mathbf{l}_z\right] = 0, \quad \left(\mathbf{B} \cdot \mathbf{l}_z\right) = 0, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} = 0. \tag{9_6}$$

Здесь $\mathbf{l}_z = (0,0,1)^{\mathrm{T}}$.

1.4.2. Граничные условия для частиц. Граничные условия на эмиссионной поверхности для вновь появляющихся в результате эмиссии отрицательно заряженных частиц при использовании уравнений (2)' имеют вид

$$k_{-,l}^{(p)} = \left[\frac{|(\varepsilon_a \mathbf{E} \cdot \mathbf{n})|}{|q_-|}\Delta S_C\right], \quad \mathbf{v}_{\alpha,l}^{(p)} = \overline{\mathbf{v}}_{\alpha,l}^{(p)}, \quad \mathbf{p}_{\alpha,l}^{(p)} = \overline{\mathbf{p}}_{\alpha,l}^{(p)}, \quad l = N_\alpha^{(p)} + 1, \ldots, N_\alpha^{(p)} + \overline{N}_\alpha^{(p)}, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_C. \tag{10}$$

Здесь $k_{\alpha,l}^{(p)}$ – число электронов, составляющих новую отрицательно заряженную крупную частицу, связанную с элементом эмиссионной поверхности (эмиссионным центром) с площадью ΔS_C; $\overline{\mathbf{v}}_{\alpha,l}^{(p)}$ и $\overline{\mathbf{p}}_{\alpha,l}^{(p)}$ – начальная скорость и импульс новой крупной частицы соответственно; $\overline{N}_\alpha^{(p)}$ – число образовавшихся крупных частиц на всей эмиссионной поверхности $\partial\Omega_C$.

Относительно выбранного граничного условия сделаем несколько замечаний.

Во-первых, в настоящей работе рассматривается автоэлектронная эмиссия при сильном самосогласованном электрическом поле в предположении идеальности эмиссионной поверхности и без учета тепловых и магнитных эффектов. Такое допущение справедливо в диапазоне электрических полей меньших, чем поле пробоя некоторых материалов, и при умеренных магнитных полях. В качестве примера реальных технических решений можно привести стальные катоды, покрытые слоем графита (см. [12, 13]).

Во-вторых, в этой части модели реализуется именно метод PiC, поскольку площадь ΔS_C определяется размерами ячейки используемой расчетной сетки. Эта площадь определяет число эмитированных электронов на каждом шаге по времени. Параметром модели является количество электронов, объединяемых в крупную частицу. В нашем подходе задается количество таких частиц, слетающих с поверхности одного сеточного элемента. Для уменьшения вычислительных затрат оно варьируется в диапазоне 1–10.

Граничные условия свободного выхода частиц из расчетной области реализуются с помощью геометрического анализа их положения и соответствующей процедуры удаления. В результате свободного выхода количество крупных частиц $N_\alpha^{(p)}$ в рассматриваемом объеме уменьшается.

1.4.3. Начальные условия. Будем считать, что в начальный момент времени выполнены следующие условия:

$$\begin{gathered}\tilde{\mathbf{E}}^{(p)} = 0, \quad \tilde{\mathbf{E}}^{(w)} = 0, \quad \tilde{\mathbf{B}} = 0,\\ \mathbf{v}_{\alpha,l}^{(p)} = \overline{\mathbf{v}}_{\alpha,l}^{(p)}, \quad l = 1,\ldots,N_\alpha^{(p)}, \quad \rho_\alpha^{(p)} = \overline{\rho}_\alpha^{(p)} \equiv \sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} q_{\alpha,l}^{(p)}\overline{\mathbf{v}}_{\alpha,l}^{(p)}.\end{gathered} \tag{11}$$

Здесь $N_\alpha^{(p)}$, $\overline{\mathbf{v}}_{\alpha,l}^{(p)}$ и $\overline{\rho}_{\alpha,l}^{(p)}$ – начальные количества крупных заряженных частиц, их скорости и плотности заряда, соответствующие количеству и распределению частиц по расчетной области.

Распределения частиц по пространству в начальный момент времени могут задаваться различными способами: равномерно или в соответствии с каким-либо физическим процессом. В рассматриваемом нами случае либо частицы отсутствуют (случай неразвитой эмиссии; $N_\alpha^{(p)} = 0$, $\rho_\alpha^{(p)} = 0$), либо в некоторой подобласти сформирована низкотемпературная квазинейтральная плазма, занимающая часть или весь расчетный объем. В этом случае $N_\alpha^{(p)} > 0$, а пространственные распределения отрицательно и положительно заряженных частиц обеспечивают квазинейтральность плазмы $\left(\rho_-^{(p)} + \rho_+^{(p)} \approx 0\right)$ в каждой точке расчетного объема.

Распределения скоростей частиц во втором случае выбираются в соответствии с температурной моделью плазмы. В частности, в рамках однотемпературной модели все частицы имеют модули скорости, соответствующие распределению Максвелла для заданной температуры, а направления скоростей обеспечивают равенство нулю суммарного импульса частиц:

$$\sum_{\alpha=-,+}\sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} \overline{\mathbf{v}}_{\alpha,l}^{(p)} = 0.$$

В рамках двухтемпературной модели вышесказанное справедливо для каждой из подсистем частиц, и, следовательно,

$$\sum_{l=1}^{N_\alpha^{(p)}} \overline{\mathbf{v}}_{\alpha,l}^{(p)} = 0, \quad \alpha = -,+.$$

2. ЧИСЛЕННАЯ И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИИ МОДЕЛИ

2.1. Численная реализация

Численная реализация вышеуказанной модели проводилась для случая аксиальной симметрии в координатах (r, z). При этом предполагалось, что выполняется условие независимости полей от азимутальной переменной φ.

Сеточная модель заряженных частиц сорта α представляет собой аппроксимацию дельта-функции с модифицированным гауссовым профилем:

$$\begin{gathered}\rho_\alpha^{(p)} = A_{p,\alpha}\exp\left[-R^2\left(r,z;r_{p,\alpha},z_{p,\alpha}\right)/R_p^2\right],\\ R\left(r,z;r_{p,\alpha},z_{p,\alpha}\right) = \sqrt{\left(r-r_{p,\alpha}\right)^2+\left(z-z_{p,\alpha}\right)^2},\end{gathered} \tag{12}$$

где $\left(r_{p,\alpha} = r_{p,\alpha}(t), z_{p,\alpha} = z_{p,\alpha}(t)\right)$ – текущие координаты частицы, R_p – эффективный радиус частиц, составляющий несколько шагов сетки ($R_p \sim n\cdot h$, $h = \sqrt{h_r^2 + h_z^2}$, $n = 1,2,3,\ldots$). Коэффициент нормировки $A_{p,\alpha}$ зависит неявно от времени и выбирается из условия

$$\iint_\Omega \rho_\alpha^{(p)} r dr dz = 1. \tag{13}$$

Численная реализация итоговых уравнений и дополнительных условий представляет собой совокупность четырех блоков.

Первый блок связан с построением расчетной сетки во всей области и численным решением уравнения Пуассона для электростатического потенциала u (см. (4)). В качестве сетки используется либо ортогональная декартова сетка, либо криволинейная сетка, топологически эквивалентная декартовой. Аппроксимация уравнения Пуассона основана на известной схеме “крест” (см. [36]), модифицированной для случая (r,z)-геометрии и выбранного типа сеток. Решение дискретного аналога (4) проводится с помощью итераций. Ввиду возможной сингулярности расчетной области в качестве итерационного процесса применяется алгоритм Якоби из [36] с диагональной матрицей перехода.

Второй блок включает решение динамических уравнений Максвелла для расчета магнитного и электрического полей $\tilde{\mathbf{B}}$ и $\tilde{\mathbf{E}}^{(w)}$. Численная схема в этом случае реализована в рамках метода FDTD (см. [23, 24]). Фактически она объединяет методы расщепления по времени и контрольных объемов на случай согласованных векторных полей. Особенностью представляемой реализации также является использование криволинейных сеток, топологически эквивалентных декартовым. Также подчеркнем, что используемая аппроксимация уравнений Максвелла для магнитной индукции $\tilde{\mathbf{B}}$ обеспечивает точное выполнение условия соленоидальности поля $\operatorname{div}\tilde{\mathbf{B}} = 0$ на криволинейной сетке.

Третий блок включает процедуру интегрирования уравнений динамики частиц. Для этого используется известная симметричная схема по времени из [36]. Фактически она представляет собой неявную схему Адамса второго порядка точности, записанную в векторной форме.

Четвертый блок связан с решением квазистатического уравнения (5) для компоненты электрического поля $\tilde{\mathbf{E}}^{(p)}$ (также с помощью итераций на основе метода Якоби) и позволяет найти суммарные поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$.

2.2. Программная реализация

На основе разработанной численной модели была создана параллельная программа. При ее реализации использовались языки программирования ANSI C и C++, а также стандарты параллельных вычислений MPI (см. [37]) и OpenMP (см. [38]). Методика распараллеливания базируется на методе разделения областей (DDM – Domain Decomposition Method) (см. [39, 40]) и алгоритмах динамической балансировки загрузки вычислителей (Dynamic Load Balancing) (см. [41, 42]).

Методика распараллеливания на основе DDT связана с разбиением декартовой цилиндрической сетки на компактные домены одинаковой мощности. Во время вычислений каждый домен прикрепляется к конкретному MPI-процессу, который последовательно выполняет все вычисления по четырем блокам динамического алгоритма.

В каждый фиксированный момент времени не все домены могут быть заняты частицами. Вследствие этого распределение сеточных доменов проводится только между MPI-процессами. Когда в конкретный домен попадает некоторое количество частиц, они обрабатываются группой параллельных потоков CPU, организованных с помощью стандарта OpenMP. При этом, если частиц немного, используется один поток. В противном случае добавляется такое число потоков, которое обеспечивает примерное равенство загрузки между MPI-процессами. Поскольку частицы динамически переходят из одного домена в другой (т.е. переходят в другой MPI-процесс), то возникает необходимость корректировки вычислительной нагрузки, которую реализует алгоритм динамической балансировки загрузки.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

3.1. Эмиссия с боковой поверхности цилиндрического катода

Первая серия расчетов была посвящена численному анализу эмиссии с поверхности цилиндрического диода. Данная задача в условиях бесконечной протяженности поверхности диода имеет в стационарном варианте аналитическое решение, характеризующееся тем, что радиальная компонента плотности тока убывает пропорционально радиусу ($j_r \cdot r = \mathrm{Const}$) (см. [33, 34]). В проведенных численных экспериментах удалось воспроизвести это решение путем подбора настроечных параметров, а именно, шагов сеток по пространству и времени и константы эмиссии.

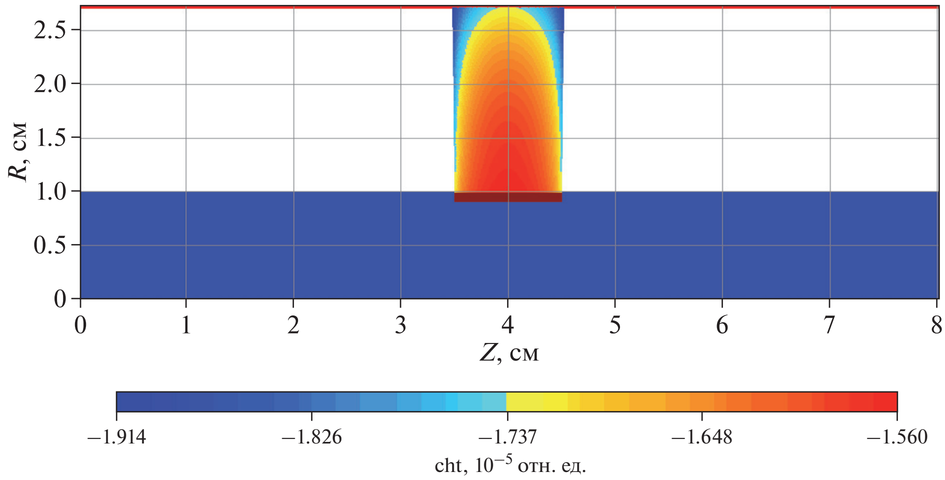
При локализации поверхности эмиссии до конечных размеров аналитическое решение не выражается в квадратурах. Однако в центре эмиссионной поверхности реализуется решение, близкое к аналитическому. В качестве примера приведем распределение частиц в зоне развития РЭП (фиг. 1), распределение потенциала электрического поля (фиг. 2) в момент времени 0.1325 нс, а также зависимость суммарного тока эмиссии от времени (фиг. 3). В расчетах шаги пространственной сетки были равны 0.125 см, шаг по времени – 0.125 пс. Напряжение на катоде было равно 511 кВ. Константа эмиссии c_{ks}/c_{ks}^0 равна 0.001, где $c_{ks}^0 = \dfrac{\varepsilon_0 E_n r_n^2}{e} \approx 2.824\times10^{11}$ – константа, получаемая при обезразмеривании граничного условия (10) ($\varepsilon_0 \approx 8.85\times10^{-14}$ Ф/см – диэлектрическая проницаемость вакуума, $E_n = 511$ кВ/см, $r_n = 1$ см – нормировочные параметры, $e \approx 1.602\times10^{-19}$ Кл – заряд электрона).

На фиг. 1 и 2 видна характерная структура РЭП и потенциала, соответствующая в центральном сечении $z = 4$ см аналитическому решению. Зависимость эмиссионного тока от времени на фиг. 3 иллюстрирует эффект начального скачка (поскольку потенциал был включен мгновенно) и последующий выход тока на более низкий стационарный уровень.

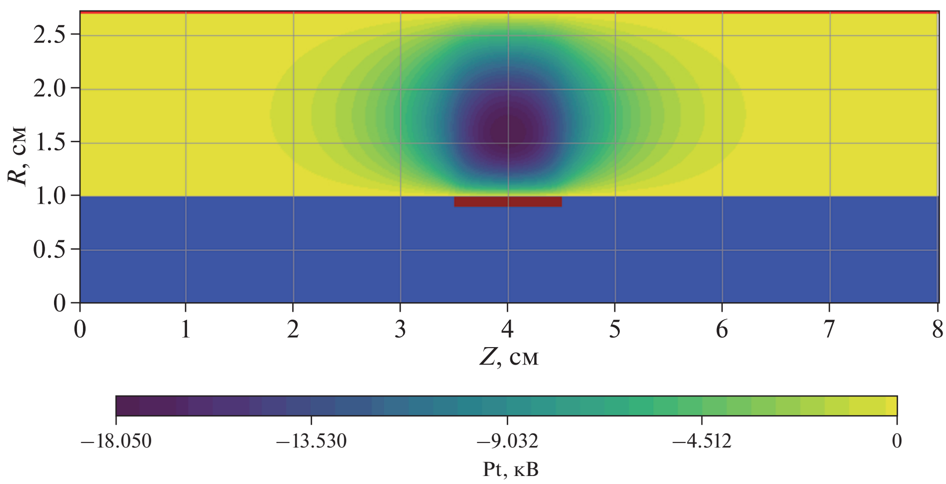
3.2. Эмиссия с торцевой поверхности цилиндрического катода

Вторая серия расчетов была посвящена подбору константы эмиссии в случае торцевого цилиндрического катода (см. фиг. 4). В качестве примера была рассмотрена ситуация, когда эмиссия идет с малого участка торца в целях создания трубчатого РЭП в условиях сильного однородного продольного магнитного поля. Физические параметры задачи: величина B_z равна 1 Тл, напряжение на катоде 511 кВ; радиус катода равен 1 см, длина – 10 см; радиус анода – 2.72 см, длина – 30 см. Эмиссионный процесс запускается с помощью TEM-волны, набегающей слева, с напряженностью поля 511 кВ/см. Расчеты проводились на сетке с шагами 0.05 см, шаг по времени составлял 0.5 пс.

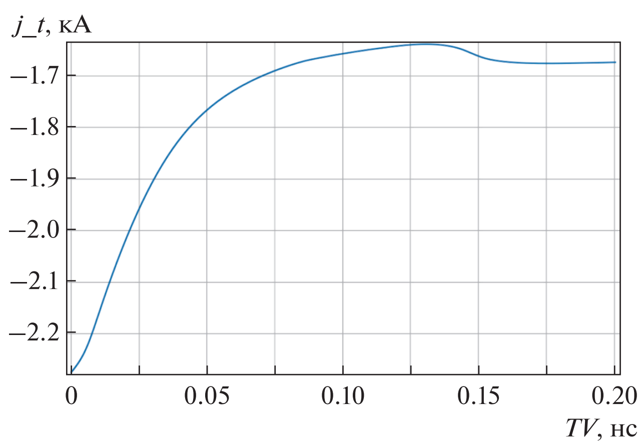
В численных экспериментах варьировалась величина безразмерной константы эмиссии c_{ks} относительно значения c_{ks}^0, составлявшей соответственно 0.004, 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08. Результаты расчетов динамики полного тока эмиссии показаны на фиг. 5, кривые *1*–*6* соответству-



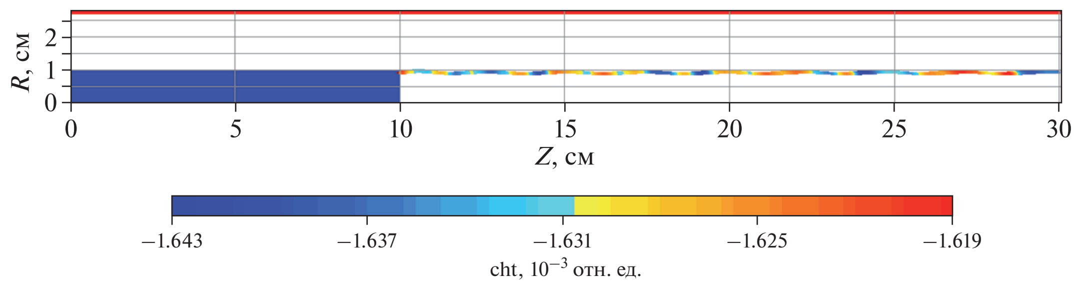
Фиг. 1. Распределение частиц при эмиссии с поверхности цилиндрического диода в момент времени 0.1325 нс.



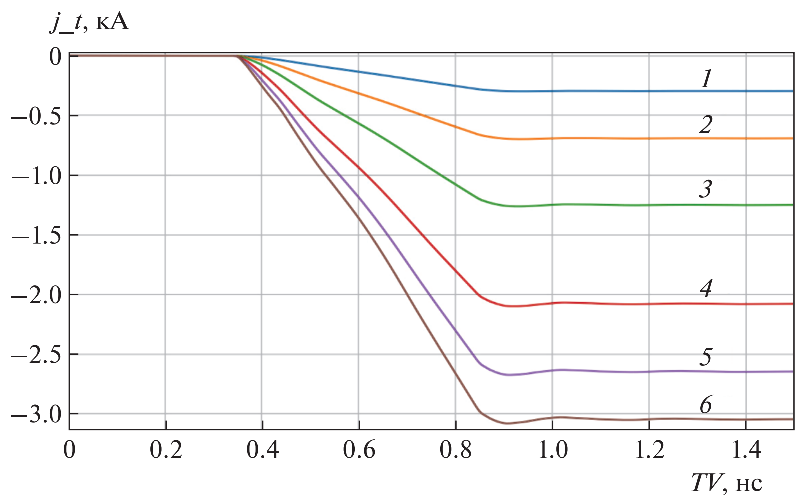
Фиг. 2. Распределение потенциала электрического поля в момент времени 0.1325 нс.



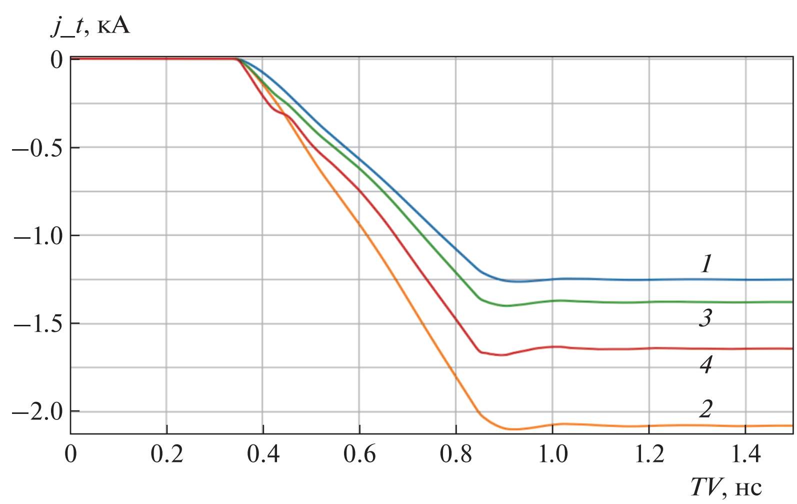
Фиг. 3. Зависимость суммарного тока эмиссии от времени.



Фиг. 4. Расчетная геометрия и конфигурация стационарного распределения трубчатого РЭП.



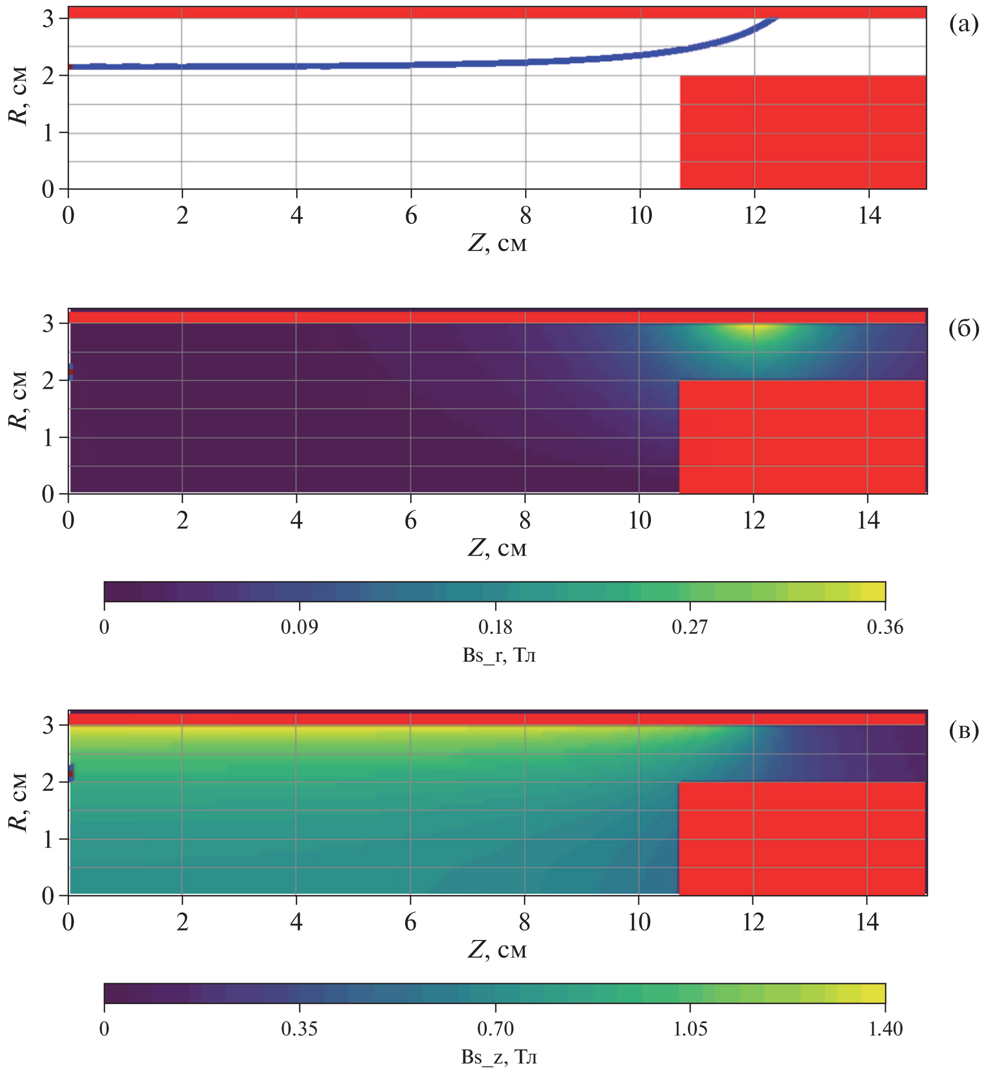
Фиг. 5. Зависимости эмиссионного тока от времени для различных значений константы эмиссии.



Фиг. 6. Зависимости эмиссионного тока от времени для различных значений амплитуды волны и константы эмиссии.

ют вышеуказанным значениям параметра c_{ks}. Они показывают, что полный ток примерно за 1 нс выходит на насыщение, величина тока пропорциональна c_{ks}.

Также величина тока зависит от амплитуды TEM-волны. На фиг. 6 показаны кривые эмиссионного тока для амплитуды 511 кВ/см (кривые *1, 2*) и 255.5 кВ/см (кривые *3, 4*) для значений



Фиг. 7. Расчетная геометрия и конфигурация РЭП (а), распределения радиальной (б) и продольной (в) компонент стационарного магнитного поля.

c_{ks} = 0.02, 0.04, 0.08, 0.16 (кривые *1–4*). При этом коэффициент эмиссии выбирается уже из другого диапазона.

Заметим, что в натурном эксперименте амплитуда волны является контролируемым параметром. С другой стороны, величина c_{ks} определяется материалом катода. Вносит свой вклад и геометрия эмиттеров. В связи с этим подбор константы эмиссии в численных расчетах подчиняется обычно каким-либо известным экспериментальным данным, например, данным о величине тока Чайлда–Ленгмюра (см. [33–35]).

3.3. Тестирование кода в условиях неоднородного магнитного поля

Третья серия расчетов была посвящена моделированию эмиссии в условиях неоднородного магнитного поля. Данная задача актуальна для управления направлением РЭП. При этом часто требуется обеспечить генерацию постоянного тока РЭП. В качестве примера была выбрана геометрия генерирующей системы, показанная на фиг. 7а. Там же показана итоговая квазистационарная конфигурация РЭП. На фиг. 7б,в приведены распределения радиальной и продольной компонент вектора магнитной индукции. Рассмотрен случай, когда генерирующая система частично помещена внутрь соленоида. Параметры соленоида: радиус 3.5 см, полудлина 12 см, амплитуда магнитного поля в точке генерации РЭП (z = 0, r = 2.3 см) составляла 1 Тл. Пучок генерировался TEM-волной с амплитудой 511 кВ/см, проникающей слева через сечение над катодом. Целью численного эксперимента был подбор константы эмиссии, соответствующей току, наблюдаемому в натурном эксперименте.

Численные расчеты проводились для различных значений константы эмиссии. В результате для реализации постоянного тока РЭП величиной 2 кА была определена константа $c_{ks} = 0.01$. При этом значении была подтверждена численно генерация постоянного тока РЭП в течение всего времени действия постоянного входного электромагнитного импульса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрена проблема расчета процессов электронной эмиссии с поверхности металлов при сильных электромагнитных полях с учетом релятивистских эффектов. Для аксиально-симметричной геометрии генерирующей системы представлена новая численная методика решения задач эмиссии, сочетающая метод частиц и метод сеток. Методика использует представление крупных сглаженных гауссовых частиц и реализует расчеты электромагнитных полей на декартовых пространственных сетках. Программная реализация выполнена в параллельном варианте с использованием стандартов MPI и OpenMP. В численных экспериментах изучены характеристики электронной эмиссии. В качестве модельных геометрий были выбраны коаксиальный диод и цилиндрические системы типа анод—катод—коллектор. В численных расчетах были получены пространственно-временные характеристики релятивистских электронных пучков, порождаемых эмиссионными процессами. Предложенная численная методика подтвердила свои корректность и эффективность. Дальнейшее направление работы будет связано с рассмотрением технических систем реальной геометрии и уточнением механизма эмиссии на микроскопическом уровне.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Васильев В.В.* Механика конструкций из композиционных материалов. М.: Машиностроение, 1988. С. 272.
2. *Кербер М.Л.* Полимерные композиционные материалы. Структура. Свойства. Технологии. СПб.: Профессия, 2008. С. 560.
3. *Рухадзе А.А., Богданкевич Л.С., Росинский С.Е.* Физика сильноточных релятивистских электронных пучков. М.: Атомиздат, 1980. С. 167.
4. *Миллер Р.* Введение в физику сильноточных пучков заряженных частиц. М.: Мир, 1984. С. 432.
5. *Бойко В.И., Евстигнеев В.В.* Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Энергоатомиздат, 1988. С. 136.
6. *Месяц Г.А.* Эктоны. Екатеринбург: УИФ “Наука”, 1993. С. 183.
7. *Диденко А.Н., Юшков Ю.Г.* Мощные СВЧ-импульсы наносекундной длительности. М.: Энергоатомиздат, 1984. С. 112.
8. *Воронков С.Н., Лоза О.Т., Стрелков П.С.* Ограничение длительности импульса излучения СВЧ генераторов на микросекундных РЭП // Физика плазмы. 1991. Т. 17. Вып. 6. С. 751—760.
9. *Бугаев С.П., Литвинов Е.А., Месяц Г.А., Проскуровский Д.И.* Взрывная эмиссия электронов // УФН 1975. Т. 115. С. 101—120.
10. *Месяц Г.А.* Взрывная электронная эмиссия. М.: Физматлит, 2011. С. 280.
11. *Херинг К., Никольс М.* Термоэлектронная эмиссия. М.: Изд-во иностр. лит., 1950. С. 196.
12. *Шешин Е.П.* Структура поверхности и автоэмиссионные свойства углеродных материалов. М.: Изд-во МФТИ, 2001. С. 288.
13. *Иванов О.А., Лобаев М.А., Чернов В.В. и др.* Экспериментальное исследование сильноточных катодов на основе алмазных пленок в составе мощного компрессора сверхвысокочастотных импульсов // Изв. вузов. Радиофизика. 2014. Т. LVII. № 10. С. 797—806.
14. *Митра Р.* (ред.) Вычислительные методы в электродинамике. М.: Мир, 1977. С. 485.
15. *Birdsall C.K., Langdon A.B.* Plasma Physics via Computer Simulation. New-York, McGraw-Hill book, 1985. P. 479.
16. *Taflove Allen, Hagness Susan C.* Computational Electrodynamics. The Finite-Difference Time-Domain Method. Third Ed. Artech House. 2005. P. 1038.
17. *Inan U.S., Marshall R.A.* Numerical Electromagnetics. The FDTD Method. Edinburgh, Cambridge (UK), Cambridge Univ. Press, 2011. P. 406.
18. *Григорьев А.Д.* Методы вычислительной электродинамики. М.: Физматлит, 2012. С. 432.

19. Программное обеспечение COMSOL Multiphysics URL: https://www.comsol.ru/comsol-multiphysics
20. Официальный сайт компании ANSYS Inc. URL: http://www.ansys.com/
21. *Tarakanov V.P.* User's Manual for Code KARAT. Springfield, VA: Berkeley Res. VA, 1992. C. 262.
22. Программное обеспечение MEEP. URL: https://meep.readthedocs.io/en/latest/Materials/
23. *Kane Yee.* Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transact. Anten. Propagat. 1966. V. 14. №. 3. P. 302–307.
24. *Benford J., Swegle J., Schamiloglu E.* High Power Microwaves. Taylor & Francis, New York, 2nd ed. 2007. P. 1–12.
25. *Харлоу Ф.Х.* Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики. Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 316–342.
26. *Дьяченко В.Ф.* О расчетах задач бесстолкновительной плазмы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1985. Т. 25. № 4. С. 622–627.
27. *Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П.* Численное моделирование методами частиц в ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. С. 358.
28. *Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М.* Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. С. 370.
29. *Садин Д.В.* Эффективная реализация гибридного метода крупных частиц // Матем. моделирование. 2022. Т. 34. № 4. С. 113–127.
30. *Birsdall C.K., Fuss D.* Clouds-in-clouds, clouds-in-cells physics for many-body plasma simulation // J. Comp. Phys. 1969. V. 3. Iss. 4. P. 494–511.
31. *Jianguo Wang, Dianhui Zhang, Chunliang Liu, Yongdong Li, Yue Wang, Hongguang Wang, Hailiang Qiao, Xiaoze Li.* UNIPIC code for simulations of high power microwave devices // Phys. Plasm. 2009. № 16. P. 1–11.
32. *Monaghan J.J.* An introduction to SPH. // Comp. Phys. Comm. 1988. V. 48. P. 88–96.
33. *Добрецов Л.Н.* Электронная и ионная эмиссия. М.-Л., 1952. С. 312.
34. *Райзер Ю.П.* Физика газового разряда. М.: Наука, 1992. С. 536.
35. *Lisovskiy V., Yegorenkov V.* Validating the collision-dominated Child-Langmuir law for a dc discharge cathode sheath in an undergraduate laboratory // Europ. J. Phys. 2009. V. 30. № 6. P. 1345–1351.
36. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. М.: Наука, 1989. С. 432.
37. Official documentation and manuals on MPI. [Online]. Available from: http://mpi-forum.org/
38. Official documentation and manuals on OpenMP. [Online]. Available from: http://www.openmp.org, http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP
39. *Smith B.F.* Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations / In: *Keyes, D.E., Sameh, A., Venkatakrishnan, V.* (eds) Parallel Numerical Algorithms. ICASE/LaRC Interdisciplinary Series in Science and Engineering, V. 4. Springer, Dordrecht, 1997. P. 225–243.
40. *Dolean V., Jolivet P., Nataf F.* An Introduction to Domain Decomposition Methods: algorithms, theory and parallel implementation. Master. France. 2015. P. 289. https://hal.science/cel-01100932v6
41. *Alakeel A.A.* Guide to Dynamic Load Balancing in Distributed Computer Systems // Inter. J. Comp. Sci. Network Security (IJCSNS). 2009. V. 10. № 6. P. 153–160.
42. *Sanders P., Mehlhorn K., Dietzfelbinger M., Dementiev R.* Sequential and parallel algorithms and data structures: the basic toolbox. Springer Nature, Cham (Switzerland), 2019. P. 516.