

---

# Моделирование инъекции заряда в промежуток с неподвижной ЖИДКОСТЬЮ

---

Пек Борис

# Униполярная инжекция в однородном поле

## Параметры модели

Модуль электростатики:  $-\nabla \cdot d \varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla V = d \rho$

$d = 1$       толщина [м]

$\varepsilon_0 = 1$       диэлектрическая проницаемость

$\rho = c^* 1e5$       объемная плотность заряда [Кл/м<sup>3</sup>]

(здесь  $c$  – концентрация, которая рассчитывается во втором уравнении)

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности:

$$\delta_{ts} \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c - z u_m F c \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c$$

$c$  – концентрация [моль/м<sup>3</sup>]

$\mathbf{u}$  – вектор скорости [м/с]

$F$  – число Фарадея [Кл/моль]

$\delta_{ts} = 1$       временной масштабирующий коэффициент

$D = 7e-4$       коэффициент диффузии (изотропный) [м<sup>2</sup>/с]

$R = 0$       скорость реакции [моль/(м<sup>3</sup> с)]

$u_m = 3e-9$       подвижность [с моль/кг]

$z = 1$       заряд частиц (относительно заряда электрона)

$u=0, v=0$       компоненты вектора  $\mathbf{u}$  [м/с]

$V = V$       потенциал [В] (рассчитывается в первом уравнении)

# Униполярная инжекция в однородном поле

## Размеры геометрии

Длина – 1см, ширина – 1мм



## Расчетная сетка

300 разбиений в продольном направлении и 2 – в поперечном

## Граничные условия

1: (электрод – источник частиц с положительным зарядом)

Электрический потенциал:  $V_0 = 10e3$  [В]

Поток:  $N_0 = 1e-12$  [моль/м<sup>2</sup> с]

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = N_0 \quad \mathbf{N} = -D\nabla c - zu_m Fc\nabla V + c\mathbf{u}$$

2: (электрод – источник гибели заряда, полное поглощение)

Заземление:  $V = 0$

Концентрация:  $c_0 = 0$

3 и 4: (стенки области, на поле и заряд не влияют)

Естественное ГУ на электрическое поле

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = 0$$

Изоляция

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = 0$$

$$\mathbf{N} = -D\nabla c - zu_m Fc\nabla V + c\mathbf{u}$$

## Параметры решателя

Вывести в моменты времени: 0:5e-7:4e-5

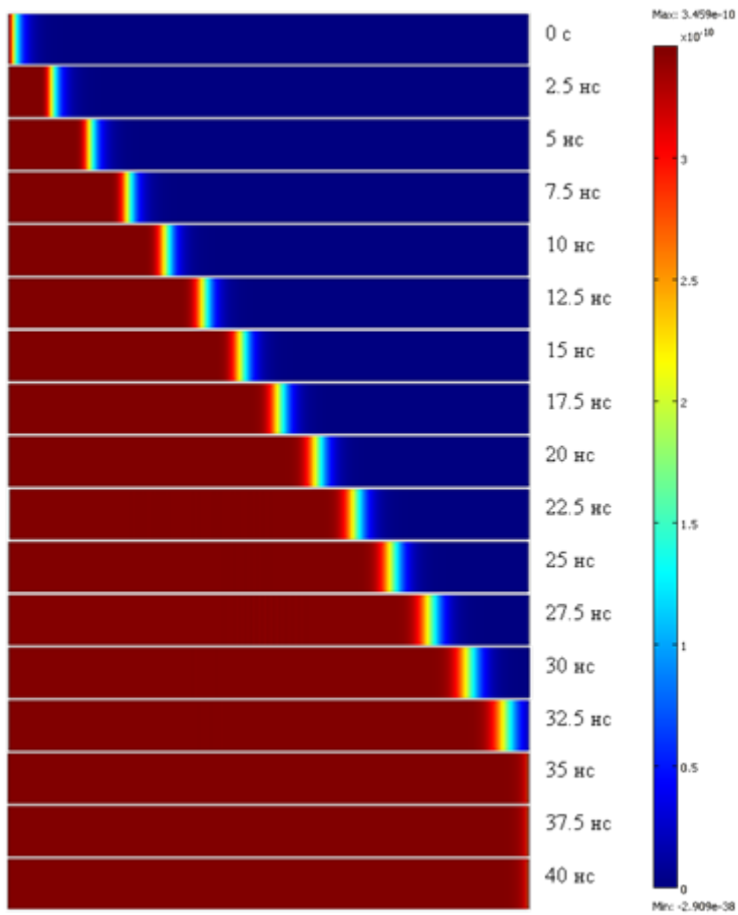
Максимальный шаг по времени: 5e-7

Относительное отклонение: 0.0001

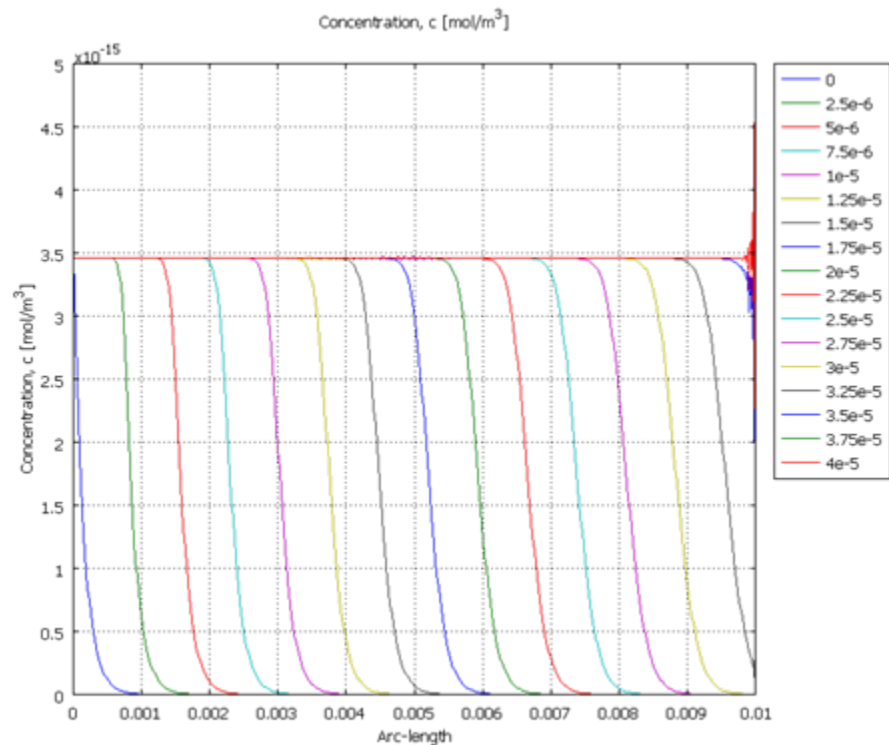
Абсолютное отклонение: с 1e-19 V 0.001

# Униполярная инжекция в однородном поле

Распределение объемной плотности заряда



Концентрация положительных частиц



Заряд, инжектируемый в промежуток, очень мал ( $\sim 10^{-10}$  Кл/м<sup>3</sup>) и его влияние на внешнее поле (1 В/м) незначительно.  
Диффузионная ширина фронта  $\sim 1$  мм  
Скорость фронта  $\approx 240$  м/с

# Биполярная инжекция в однородном поле

(без учета рекомбинации:  $\alpha = 0$ )

Добавлено еще одно уравнение Нернста-Планка без электронейтральности:

$$\delta_{ts} \frac{\partial c^2}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c^2 - z u_m F c^2 \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c$$

$\delta_{ts} = 1$	временной масштабирующий коэффициент
$D = 7e-4$	коэффициент диффузии (изотропный) [м <sup>2</sup> /с]
$R = 0$	скорость реакции [моль/(м <sup>3</sup> с)]
$u_m = 3e-9$	подвижность [с моль/кг]
$z = -1$	заряд частиц (относительно заряда электрона)
$u=0, v=0$	компоненты вектора $\mathbf{u}$ [м/с]
$V = V$	потенциал [В] (рассчитывается в первом уравнении)

Граничные условия для этого уравнения:

1: Концентрация:  $c_0 = 0$

2: Поток:  $N_0 = 1e-12$  [моль/м<sup>2</sup> с]

3 и 4: Изоляция



Изменения в модуле электростатики:

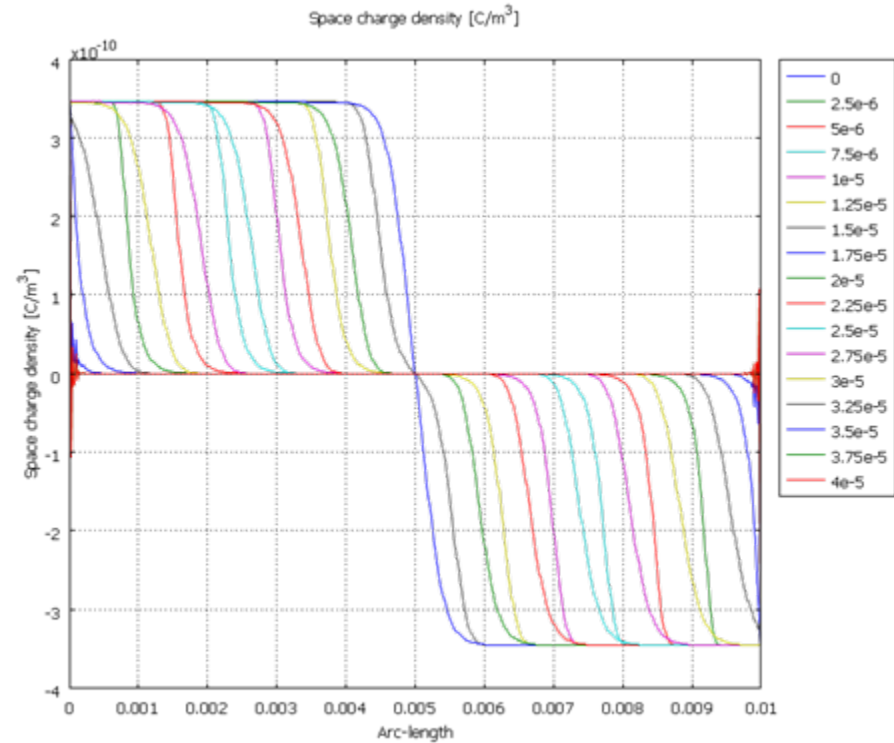
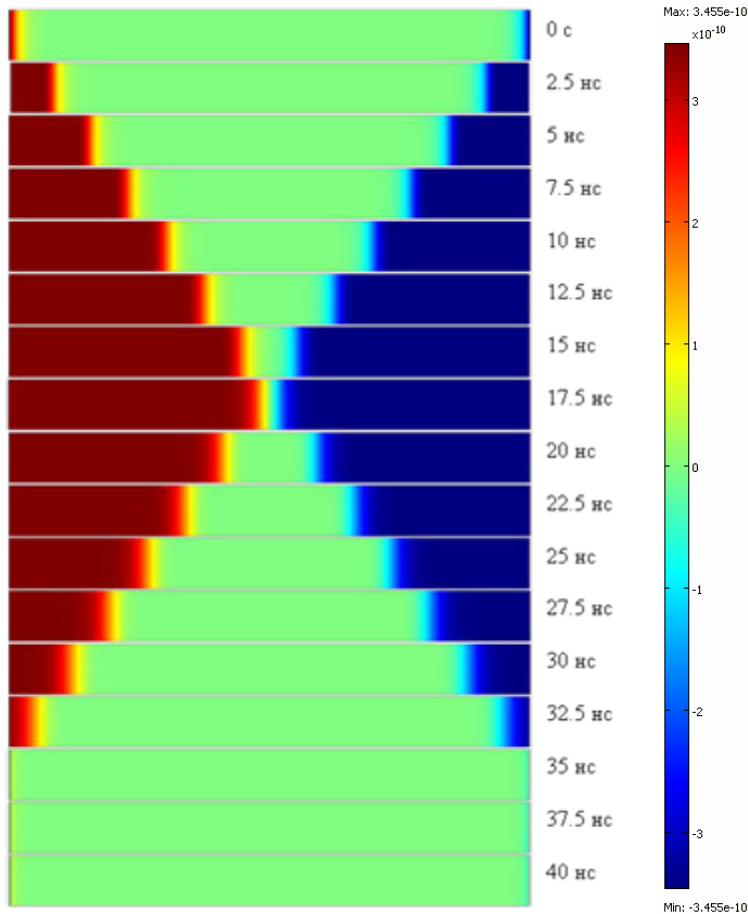
Объемная плотность заряда:  $\rho = c \cdot 1e5 - c^2 \cdot 1e5$

Изменения в параметрах решателя:

Абсолютное отклонение: с 1e-19 с2 1e-19 V 0.001

# Биполярная инжекция в однородном поле (без учета рекомбинации: $\alpha = 0$ )

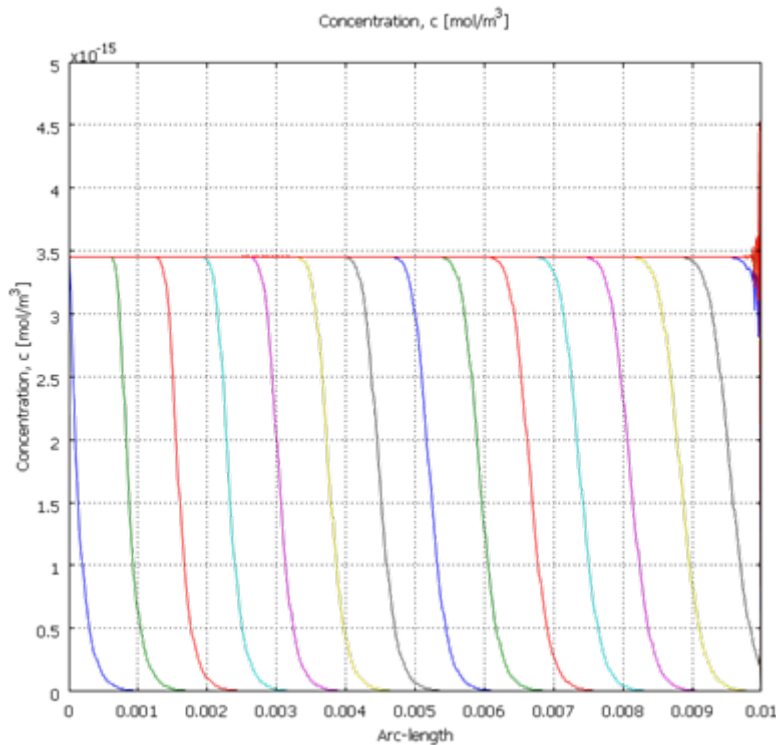
Распределение объемной плотности заряда



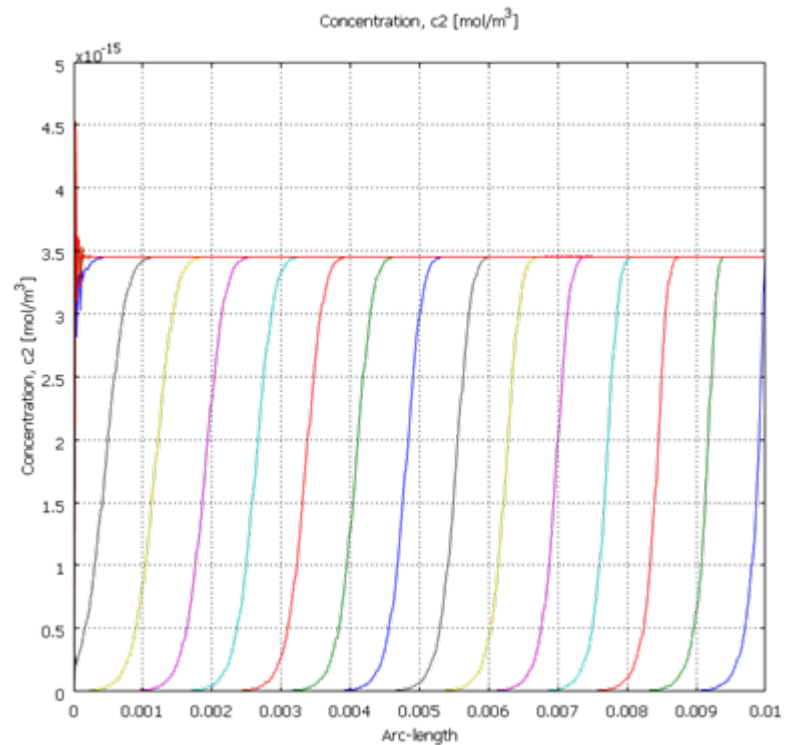
Заряд, инжектируемый в промежуток, очень мал ( $\sim 10^{-10}$  Кл/м<sup>3</sup>) и его влияние на внешнее поле (1 В/м) незначительно.

# Биполярная инжекция в однородном поле (без учета рекомбинации: $\alpha = 0$ )

Концентрация положительных частиц



Концентрация отрицательных частиц



# Биполярная инжекция в однородном поле (с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e20$ )

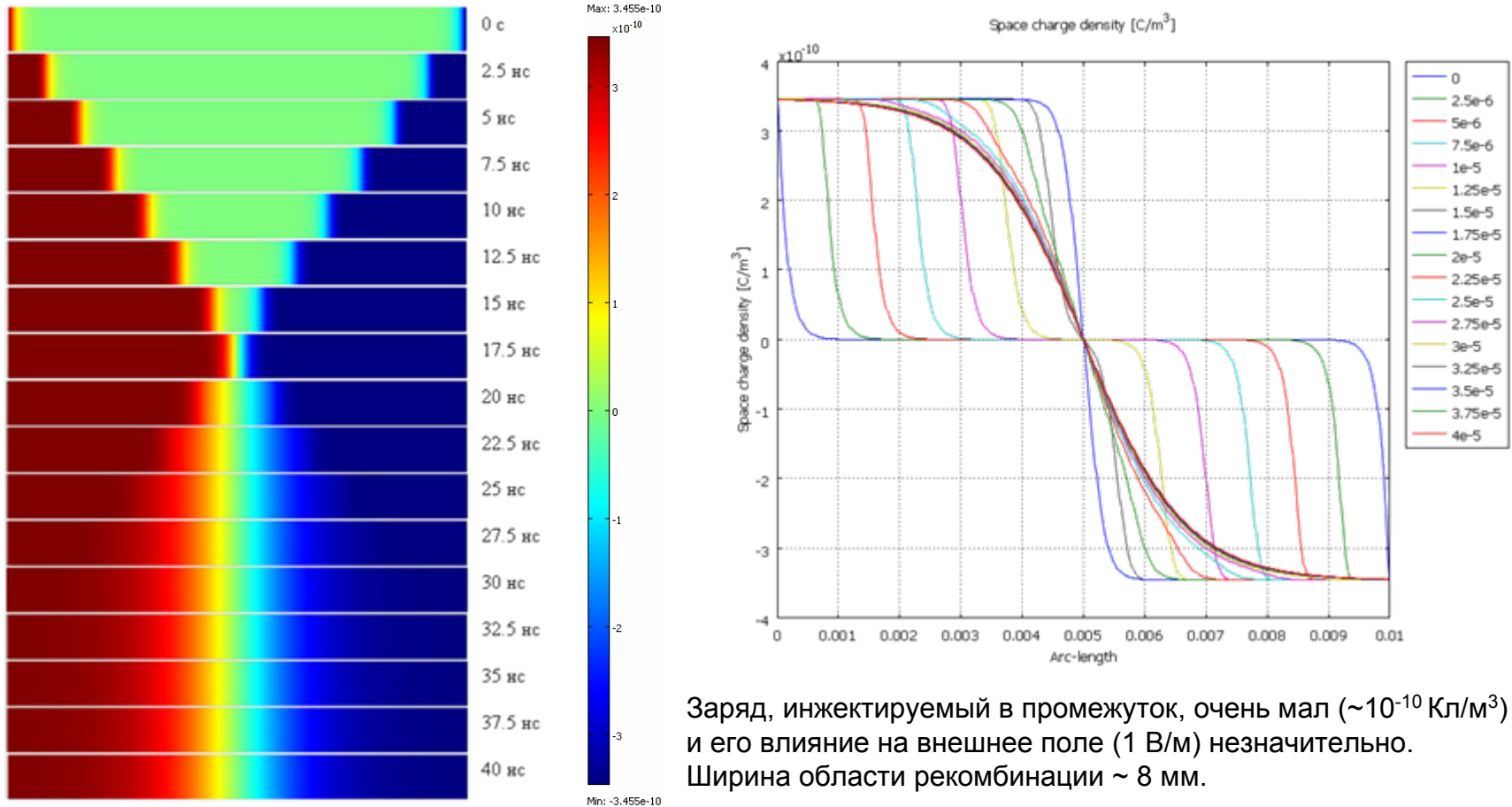
Изменение в обоих модулях уравнением Нернста-Планка без электронейтральности:

Скорость реакции:  $R = -1e20 * c * c^2$  [моль/(м<sup>3</sup> с)]



# Биполярная инжекция в однородном поле (с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e20$ )

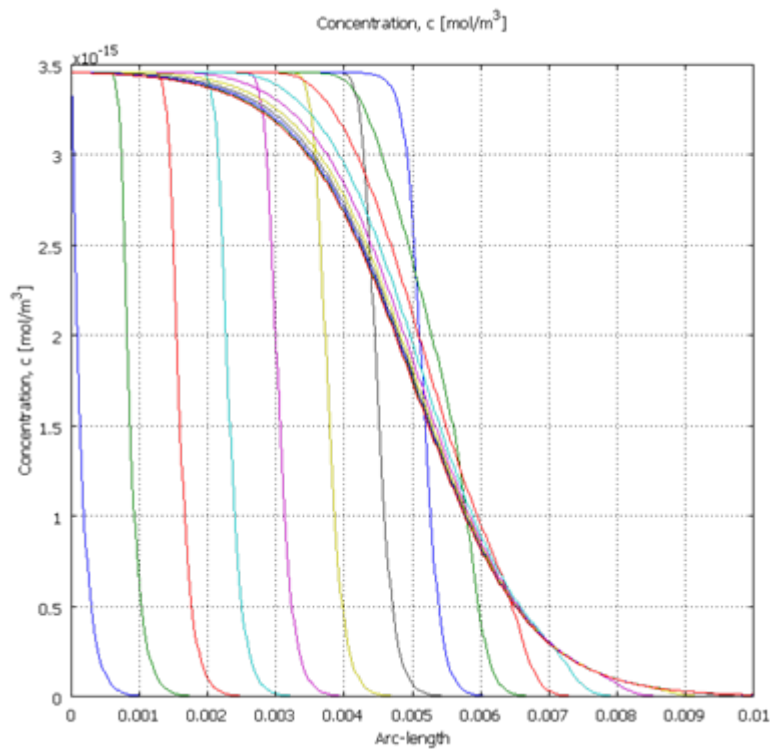
Распределение объемной плотности заряда



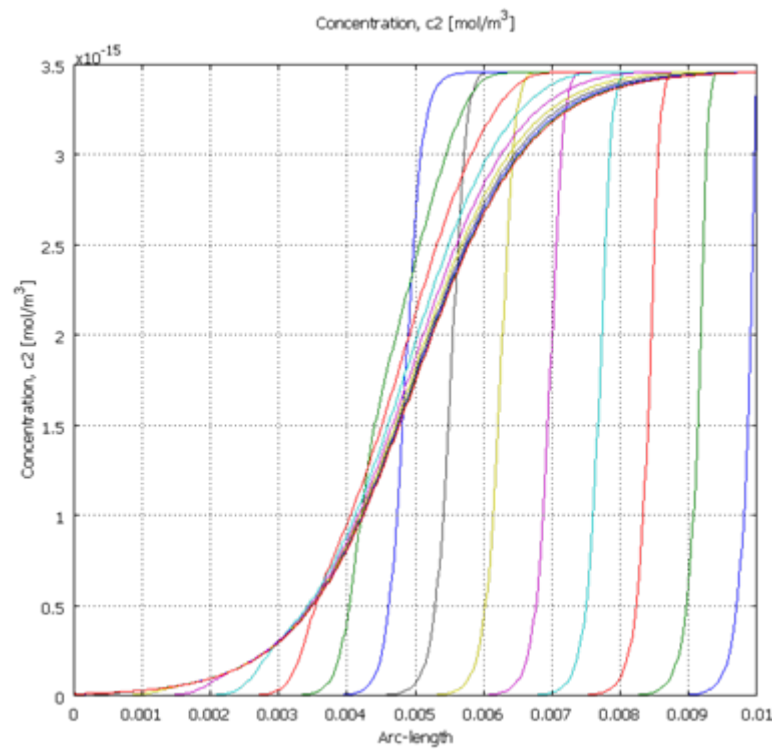
Заряд, инжектируемый в промежуток, очень мал ( $\sim 10^{-10}$  Кл/м<sup>3</sup>) и его влияние на внешнее поле (1 В/м) незначительно. Ширина области рекомбинации  $\sim 8$  мм.

# Биполярная инжекция в однородном поле (с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e20$ )

Концентрация положительных частиц



Концентрация отрицательных частиц



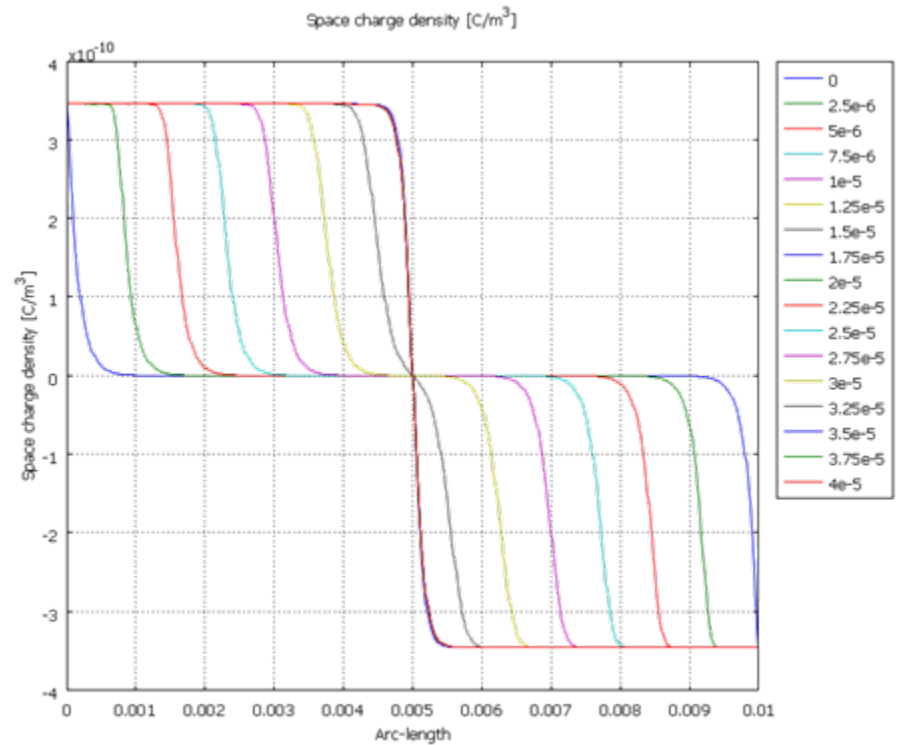
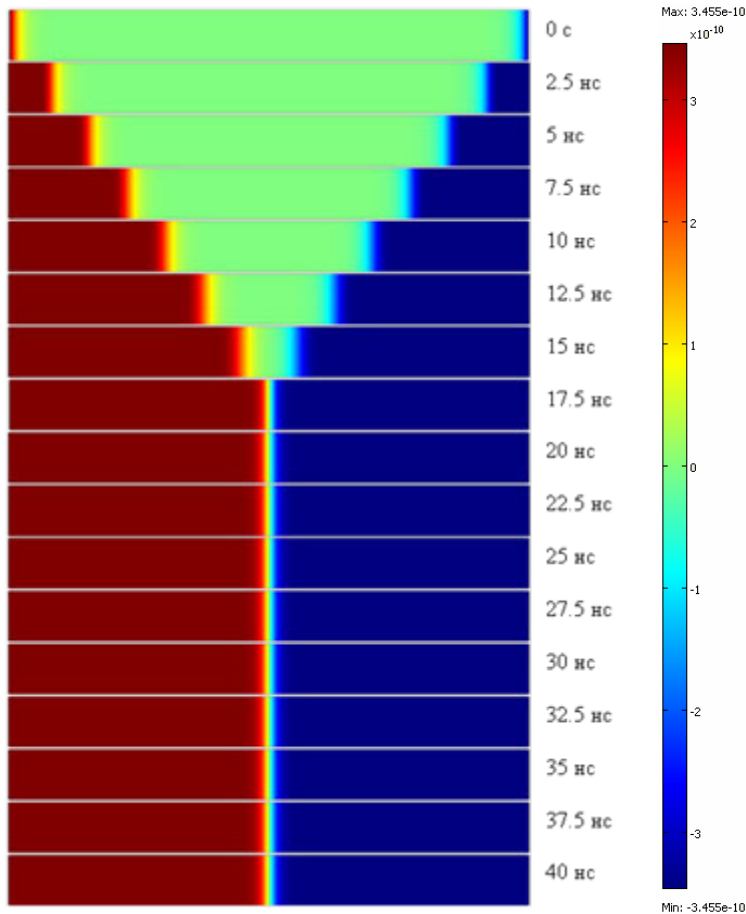
# Биполярная инжекция в однородном поле (с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e21$ )

Изменение в обоих модулях уравнением Нернста-Планка без электронейтральности:

Скорость реакции:  $R = -1e21 * c * c^2$  [моль/(м<sup>3</sup> с)]

# Биполярная инжекция в однородном поле (с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e21$ )

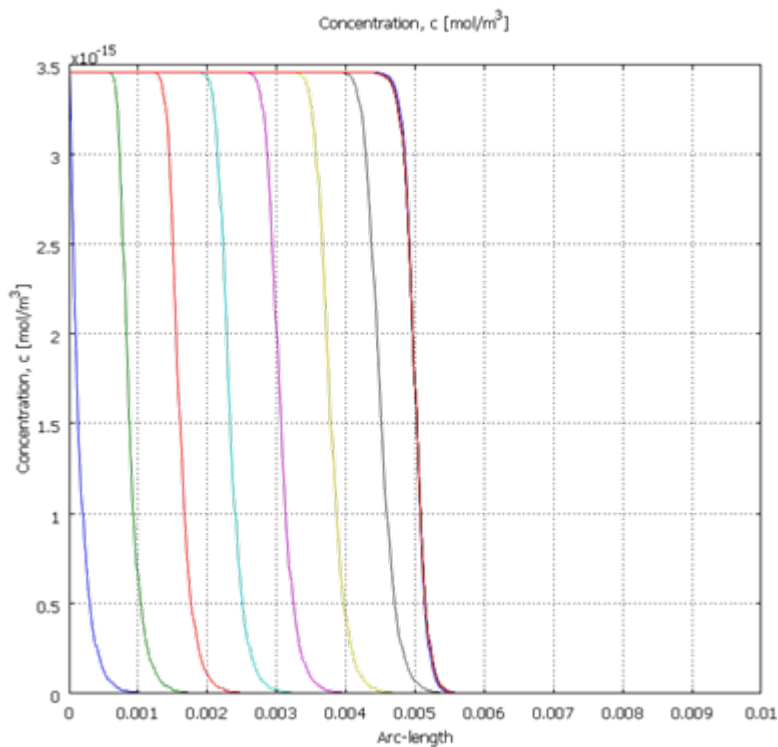
Распределение объемной плотности заряда



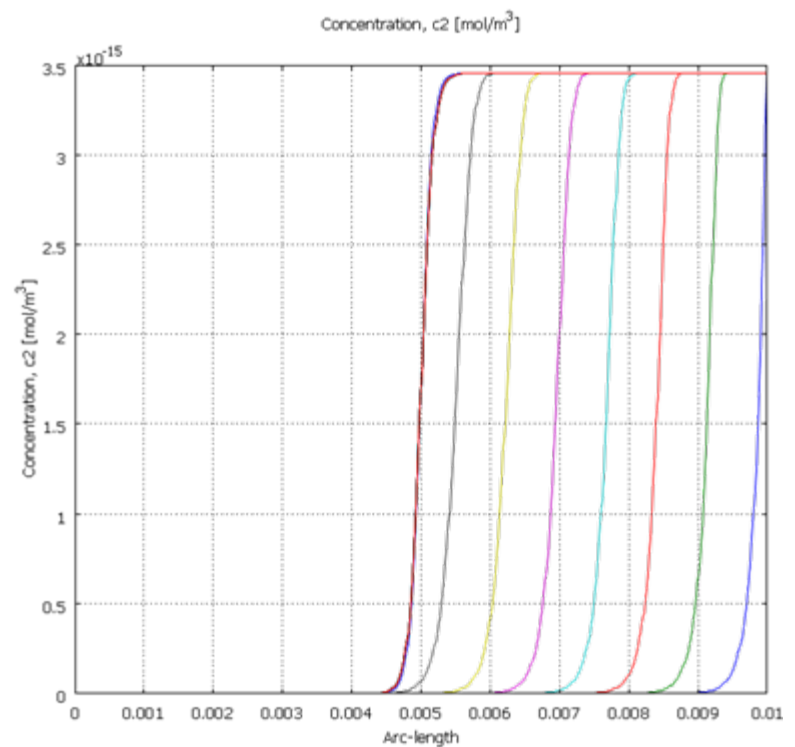
Заряд, инжектируемый в промежуток, очень мал ( $\sim 10^{-10}$  Кл/м<sup>3</sup>) и его влияние на внешнее поле (1 В/м) незначительно. Ширина области рекомбинации  $\sim 0.8$  мм.

# Биполярная инжекция в однородном поле (с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e21$ )

Концентрация положительных частиц



Концентрация отрицательных частиц



# Выводы:

- Ширина фронта зависит от коэффициента диффузии.
- В однородном поле скорость распространения заряда в межэлектродном промежутке постоянна, если объемная плотность заряда не вносит существенных возмущений в электрическое поле. Она зависит от поля и коэффициента инжекции заряда с электрода.
- Толщина области рекомбинации обратнопропорционально зависит от коэффициента рекомбинации.
- В моделях без рекомбинации или с малым коэффициентом рекомбинации накопление заряда в области отсутствует из-за граничного условия полной гибели на противэлектроде.
- В моделях с большим коэффициентом рекомбинации накопление заряда в области отсутствует из-за полной рекомбинации зарядов в межэлектродном промежутке.
- Если коэффициент рекомбинации мал, то используемое граничное условие полной гибели заряда является некорректным, т.к. из-за него вблизи этой границы возникает большой градиент концентрации.