



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ,
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Θεωρία Ηλεκτρονικής μικροσκοπίας εγγύς πεδίου

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Ανδρέας Κ. Κυριτσάκης

Αθήνα, 2014



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ,
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Θεωρία ηλεκτρονικής μικροσκοπίας εγγύς πεδίου

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Ανδρέας Κ. Κυριτσάκης

Συμβουλευτική Επιτροπή : Ιωάννης Π. Ξανθάκης
Δημήτριος Τσαμάκης
Κυριάκος Χιτζανίδης

Εγκρίθηκε από την επταμελή εξεταστική επιτροπή την 7^η Νοεμβρίου 2014.

.....
Ιωάννης Ξανθάκης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Δημήτριος Τσαμάκης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Κυριάκος Χιτζανίδης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Ηλίας Γλύτσης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Δημήτριος Τσουκαλάς
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Ιωάννης Τίγκελης
Αν. Καθηγητής Ε.Κ.Π.Α

.....
Χαράλαμπος Δημητριάδης
Καθηγητής Α.Π.Θ.

Αθήνα, Νοέμβριος 2014

.....

Ανδρέας Κ. Κυριτσάκης

Διδάκτωρ Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Ανδρέας Κ. Κυριτσάκης 2014.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Η ηλεκτρονική μικροσκοπία εγγύς πεδίου (Near Field Emission Scanning Electron Microscopy-NFESEM) αποτελεί μία νέα μορφή ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης που αναπτύχθηκε τα τελευταία έξι χρόνια. Είναι πολλά υποσχόμενη καθώς έχει δυνατότητες λήψης εικόνων ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης (Scanning Electron Microscopy - SEM) με σχεδόν ισοδύναμη διακριτική ικανότητα χωρίς να χρησιμοποιεί ηλεκτρομαγνητικούς φακούς εστίασης, που αποτελούν σημαντικό κομμάτι του κόστους ενός SEM. Αυτό επιτυγχάνεται με τοποθέτηση της καθόδου σε απόσταση d μερικών nm από το δείγμα (στο SEM είναι της τάξης των cm) και χρήση εξαιρετικά αιχμηρών ακίδων-εκπομπών.

Το χαρακτηριστικά αυτά του NFESEM γεννούν σημαντικά ερωτήματα ως προς τα βασικά χαρακτηριστικά της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων (Field Emission-FE), τα οποία η υπάρχουσα θεωρία FE αδυνατεί να απαντήσει επαρκώς. Στόχος αυτής της διδακτορικής διατριβής είναι να μελετήσει θεωρητικά την FE όταν η απόσταση d είναι πολύ μικρή (μερικά nm) και οι εκπομποί είναι εξαιρετικά αιχμηροί (ακτίνες καμπυλότητας $R \sim 1-20$ nm).

Στο πρώτο κεφάλαιο αναπτύσσεται η υπάρχουσα θεωρία της FE (θεωρία Fowler-Nordheim ή F-N) και τα θεωρητικά εργαλεία που θα χρησιμοποιηθούν, στο δεύτερο οι τεχνολογικές εφαρμογές της FE με έμφαση στη λειτουργία του NFESEM. Στο τρίτο κεφάλαιο μελετάται η κατανομή του ρεύματος FE με έμφαση στην πρόβλεψη του εύρους της δέσμης του NFESEM, που καθορίζει τη διακριτική του ικανότητα. Χρησιμοποιώντας ελλειψοειδή για την προσομοίωση του εκπομπού και τρισδιάστατη θεωρία για το φαινόμενο σήραγγας επιτυγχάνεται η πρόβλεψη του εύρους της δέσμης τη NFESEM συναρτήσει των παραμέτρων λειτουργίας του η οποία είναι σε πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα.

Στο τέταρτο κεφάλαιο μελετώνται και εξηγούνται θεωρητικά οι ιδιότητες κλιμάκωσης τάσης-απόστασης του οργάνου που παρατηρήθηκαν πειραματικά. Αποδεικνύεται αριθμητικά και αλγεβρικά ότι το δυναμικό κοντά στον εκπομπού παραμένει αμετάβλητο για όλες τις αποστάσεις, αν πολλαπλασιαστεί η τάση με κατάλληλη σταθερά, σε συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις τάσης-ρεύματος-απόστασης.

Τέλος, στο πέμπτο κεφάλαιο γενικεύεται η θεωρία F-N. Ξεκινώντας από βασικές αρχές και εφαρμόζοντας προσεγγίσεις γενικής ισχύος, εξάγεται μία γενικευμένη εξίσωση «τύπου-F-N» για την περιγραφή της FE από αιχμηρές ακίδες. Με εφαρμογή της εξίσωσης σε πειραματικά δεδομένα εξάγεται αξιόπιστα η ακτίνα καμπυλότητας του εκπομπού.

Λέξεις-κλειδιά

Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων

Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης

Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης εγγύς πεδίου

Διάμετρος δέσμης

Προσέγγιση Jeffreys-Wentzel-Krammers-Brillouin

Φαινόμενο σήραγγας

Κλιμάκωση

Νανοσκοπικοί εκπομποί ηλεκτρονίων

Εξίσωση Fowler-Nordheim

Abstract

Near Field Scanning Electron Microscopy (NFESEM) is a new form of electron microscopy, developed during the last 6 years. It is capable of acquiring Scanning Electron Microscopy (SEM) type images with almost equivalent resolution without any use of focusing or collimation of the beam. The latter is very promising since the system is a significant part of the cost of the SEM. It is achieved by placing the emitter in a small distance d (some nm) from the sample and using very sharp tips for emitters.

The characteristics of the NFESEM raise questions about the characteristics of Field Emission (FE) which the existing FE theory fails to answer sufficiently. This PhD thesis aims to theoretically analyze the physical properties of FE when the distance d is some nm and the emitters are highly curved (radii of curvature $R \sim 1-20\text{nm}$) as happens in the NFESEM configuration.

In chapter 1 the existing FE theory is presented along with the theoretical methods that are used in following chapters. Chapter 2 is about the applications of FE with emphasis on the NFESEM. Chapter 3 is about the distribution of the field emitted current and especially the beam width of the NFESEM which mainly determines its lateral resolution. Ellipsoids are used to emulate the geometry of the tip and 3-dimensional Jeffreys-Wentzel-Krammers-Brillouin (JWKB) theory for the tunneling. The beam width (spot size) of the NFESEM is predicted as a function of its physical parameters with good agreement with the experiment.

In chapter 4, the voltage-distance scaling properties of the NFESEM are studied. Algebraic and numerical proof is provided that the whole electrostatic potential near the emitter remains invariant for any d if the voltage is multiplied by an appropriate constant. This explains the scaling properties that were observed experimentally in the current-voltage-distance characteristics of the NFESEM.

Finally, in chapter 5, the Fowler-Nordheim (F-N) theory is generalized starting from general principles and using approximations of general validity. An F-N-type equation is derived for the description of FE from sharp emitters. Upon applying our equation to experimental F-N plots, one may deduce 1) the radius of curvature of the emitter and 2) standard FE parameters –e.g. enhancement factor- with better accuracy than that by using the F-N equation. Experimental confirmation of the validity of our equation is given by the data of three different groups.

Keywords

Field emission

Scanning Electron Microscopy

Near Field Emission Scanning Electron Microscopy

Beam spot diameter

Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin approximation

Tunneling

Scaling

Nanosopic electron emitters

Fowler–Nordheim equation

Ευχαριστίες

Η διδακτορική διατριβή αυτή αποτελεί καρπό μίας διαδρομής που κράτησε 4 χρόνια, γεμάτη από κόπο, προσπάθεια, συγκινήσεις, απογοητεύσεις αλλά και μεγάλες χαρές. Αποκόμισα πάρα πολλές γνώσεις, αλλά και εμπειρίες. Μπήκα βαθιά μέσα στο μαγικό κόσμο της επιστημονικής έρευνας και αναζήτησης, ένιωσα τη συγκίνηση της νέας γνώσης, τη χαρά της επιτυχούς αλλά και τη λύπη της ανεπιτυχούς λύσης ενός προβλήματος. Σε αυτή τη διαδρομή δεν στάθηκα μόνος. Για το λόγο αυτό θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους τους ανθρώπους που με στήριξαν και με βοήθησαν τα 4 τελευταία χρόνια.

Πρωτίστως θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την αγάπη και την αμέριστη υλική και ηθική υποστήριξη που μου παρείχαν σε όλη τη διάρκεια των σπουδών μου. Ιδιαίτερα τον πατέρα μου, Κώστα, γιατί με έμαθε από μωρό να αγαπώ την επιστήμη, τη λογική σκέψη και την τεκμηριωμένη γνώση. Τη μητέρα μου, Πόπη, γιατί μου έμαθε ότι υπάρχουν σημαντικότερα πράγματα που πρέπει να αγαπάς στη ζωή. Τέλος, τον αδερφό μου Άγγελο, γιατί το γέλιο του σου θυμίζει ότι αξίζει τον κόπο να παλεύεις για να κάνεις τον κόσμο απειροελάχιστα καλύτερο. Ένα παραπάνω ευχαριστώ αξίζει στη μητέρα μου για τη φιλολογική επιμέλεια της παρούσας διατριβής.

Στη συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω την τριμελή συμβουλευτική επιτροπή, Καθηγητές Ιωάννη Ξανθάκη, Δημήτρη Τσαμάκη και Κυριάκο Χιτζανίδη για τις πολύτιμες συμβουλές τους και την υποστήριξή τους. Ιδιαίτερος όμως ευχαριστώ τον επιβλέποντα της διατριβής αυτής, Καθηγητή Ι. Ξανθάκη. Τα σχεδόν 6 χρόνια που συνεργαζόμαστε επιστημονικά και ερευνητικά υπήρξαν πολύτιμα για μένα. Η συνεργασία μας ήταν πάντα άμεση και άψογη. Οι ατέλειωτες διαφωνίες μας σε επιστημονικά θέματα κατέληγαν πάντα σε καλύτερα αποτελέσματα. Οι συμβουλές του σε επιστημονικά και μη θέματα ήταν πάντοτε πολύτιμες.

Θα ήθελα ακόμα να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή Danilo Pescia από το ΕΤΗ της Ζυρίχης και όλη την ερευνητική του ομάδα, για την εξαιρετική συνεργασία που είχαμε τα τελευταία 5 χρόνια, για τη φιλοξενία που μου πρόσφεραν το Σεπτέμβριο του 2012, και για τη σημαντική υλική υποστήριξη από τότε και μετά.

Τέλος ευχαριστώ τη Φωτεινή για την αγάπη και την ηθική στήριξη που μου προσέφερε απλόχερα όλα αυτά τα χρόνια, αλλά και την υπομονή και την ανοχή που επέδειξε στις αγωνίες, τα άγχη και τις παραξενιές μου.

Περιεχόμενα

Περίληψη	5
Λέξεις-κλειδιά.....	6
Abstract.....	7
Keywords	8
Ευχαριστίες.....	9
Περιεχόμενα.....	11
Κατάλογος Σχημάτων.....	15
Κεφάλαιο 1: Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων: Ιστορική αναδρομή και υπάρχουσα θεωρία	21
1.1. Εισαγωγή-ιστορική ανασκόπηση.....	21
1.2. Η προσέγγιση Jeffreys-Wentzel-Krammers-Brillouin και η τρισδιάστατη επέκτασή της.....	24
1.2.1. Εισαγωγή.....	24
1.2.2. Μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB.....	25
1.2.3. Η τρισδιάστατη προσέγγιση JWKB	31
1.3. Η κλασική θεωρία Fowler-Nordheim και οι επεκτάσεις της.....	36
1.3.1. Εισαγωγή-Περιγραφή μοντέλου και γεωμετρίας	36
1.3.2. Φράγμα δυναμικού και συντελεστής διέλευσης	39
1.3.3. Πυκνότητα ρεύματος-άθροιση καταστάσεων	40
1.3.4. Διαγράμματα F-N	42
1.4. Η σύγχρονη θεωρία πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων από αιχμηρούς εκπομπούς	43
1.4.1. Η ενεργός επιφάνεια εκπομπής σε μη-επίπεδους αγωγούς	43
1.4.2. Ακαταλληλότητα της εξίσωσης F-N για νανομετρικά αιχμηρούς εκπομπούς.....	45
1.4.3. Θεωρία F-N για σφαιρικές επιφάνειες.....	48
Κεφάλαιο 2: Εφαρμογές της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων με έμφαση στην ηλεκτρονική μικροσκοπία εγγύς πεδίου	53
2.1. Εισαγωγή-γενικά στοιχεία	53
2.2. Ηλεκτρονική μικροσκοπία.....	55

2.2.1. Μικροσκόπιο πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων (<i>Field Emission Microscope-FEM</i>)	55
2.2.2. Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διάδοσης (<i>Transmission Electron Microscope – TEM</i>).....	56
2.2.3. Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (<i>Scanning Electron Microscopy-SEM</i>)	57
2.2.4. Μικροσκόπιο σάρωσης σήραγγας (<i>Scanning Tunneling Microscopy–STM</i>)	61
2.3. Ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης εγγύς πεδίου.....	63
2.3.1. Εισαγωγή.....	63
2.3.2. Η διάταξη του NFESEM.....	64
2.3.3. Μετρήσεις-αποτελέσματα.....	68
2.4. Συμπεράσματα	77

Κεφάλαιο 3: Υπολογισμοί της χωρικής κατανομής της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων 79

3.1. Εισαγωγή	79
3.2. Το πρόβλημα της οριζόντιας ανάλυσης του NFESEM και η αυτοεστίαση των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων	80
3.3. Εύρος ίχνους δέσμης στην άνοδο του NFESEM.....	83
3.3.1. Γεωμετρικό μοντέλο και ηλεκτροστατικό δυναμικό	83
3.3.2. Εφαρμογή της τρισιδιάστατης προσέγγισης JWKB – μονοπάτια στην απαγορευμένη περιοχή.....	88
3.3.3. Αποτελέσματα: Το άνοιγμα της δέσμης συναρτήσει των παραμέτρων του NFESEM.....	91

Κεφάλαιο 4: Κλιμάκωση (scaling) τάσης στην εκπομπή ηλεκτρονίων από κοντινό πεδίο 95

4.1. Εισαγωγή	95
4.2. Πειραματικά δεδομένα που δείχνουν τις ιδιότητες κλίμακας.....	96
4.2.1. Η πειραματική διάταξη.....	96
4.2.2. Ο εκθέτης λ	101
4.2.3. Χρήση της κλιμάκωσης για πειραματικό προσδιορισμό του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου F	103
4.2.4. Η καμπύλωση των διαγραμμάτων $F-N$	104
4.2.5. Συμπεράσματα.....	107
4.3. Θεωρητική ανάλυση και εξήγηση των ιδιοτήτων κλίμακας.....	108
4.3.1. Εισαγωγή.....	108
4.3.2. Το δυναμικό: Αριθμητικοί υπολογισμοί	109
4.3.3. Το δυναμικό: Αναλυτική προσέγγιση.....	114
4.3.4. Η εξάρτηση του ηλεκτρικού πεδίου από τη γωνία θ	116
4.3.5. Το ολικό ρεύμα και σύγκριση με το πείραμα	117
4.3.6. Ο παράγοντας κλιμάκωσης σε μορφή δύναμης $S(d)=ad^{\lambda}$	119

4.4. Συμπεράσματα	121
Κεφάλαιο 5: Γενίκευση της θεωρίας και της εξίσωσης Fowler-Nordheim για αιχμηρούς εκπομπούς	123
5.1. Εισαγωγή	123
5.2. Το ηλεκτροστατικό δυναμικό στον άξονα ενός καμπυλωμένου εκπομπού ...	124
5.2.1. Ορισμός γεωμετρικού μοντέλου και μεταβλητών	124
5.2.2. Ανάπτυξη του δυναμικού στον άξονα του εκπομπού	125
5.2.3. Η τελική προσέγγιση για το δυναμικό και οι προϋποθέσεις εγκυρότητάς της.....	127
5.3. Η πυκνότητα ρεύματος σήραγγας στον άξονα	129
5.3.1. Αναλυτική προσέγγιση του ολοκληρώματος JWKB.....	129
5.3.2. Πυκνότητα ρεύματος: Η τελική εξίσωση.....	131
5.4. Από την πυκνότητα ρεύματος στο ρεύμα: υπολογισμός της ενεργού επιφάνειας εκπομπής.....	133
5.4.1. Γενικά περί ενεργού επιφάνειας εκπομπής (effective emission area).....	133
5.4.2. Αναλυτική προσέγγιση για την ενεργό περιοχή.....	134
5.4.3. Αριθμητικοί υπολογισμοί για την ενεργό περιοχή και σύγκριση με την αναλυτική προσέγγιση	136
5.5. Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα και εξαγωγή της ακτίνας καμπυλότητας της καθόδου από μετρήσεις τάσης-ρεύματος	138
5.5.1. Γενικά περί ανάλυσης πειραματικών δεδομένων I-V.....	138
5.5.2. Εξαγωγή παραμέτρων από πειραματικά δεδομένα.....	139
5.5.3. Αποτελέσματα.....	140
5.6. Συμπεράσματα	143
Παράρτημα Α: Κώδικας MATLAB	145
A.1. Κώδικας 3 ^ο κεφαλαίου.....	145
A.2. Κώδικας 4 ^ο κεφαλαίου.....	152
A.3. Κώδικας 5 ^ο κεφαλαίου.....	159
Βιβλιογραφία	162

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1.1: Τυχαίο φράγμα δυναμικού. Η κλαστική και η απαγορευμένη περιοχή. ..28	
Σχήμα 1.2: Η απαγορευμένη περιοχή, το μονοπάτι ολοκλήρωσης και τα αντίστοιχα σημεία r_1 και r_2 που είναι τα σημεία εισόδου και εξόδου αντίστοιχα στην απαγορευμένη περιοχή. Τα $C_{1,2,3}$ είναι τα τμήματα της τροχιάς πριν, εντός και μετά την απαγορευμένη περιοχή αντίστοιχα.34	
Σχήμα 1.3: Μοντέλο της θεωρίας F-N. Διάταξη και συντεταγμένες.....37	
Σχήμα 1.4: Ηλεκτροστατική δυναμική ενέργεια που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο.37	
Σχήμα 1.5: Δυναμικό φράγμα όπως προκύπτει προσθέτοντας και το εικονικό δυναμικό. Η αρχή των ενεργειών τοποθετείται στην ενέργεια Fermi. Οι ποσοτικές παράμετροι είναι $W=4.5\text{eV}$, $F=5\text{V/nm}$38	
Σχήμα 1.6: Διάγραμμα F-N για έναν εκπομπό με $W=4.5\text{eV}$42	
Σχήμα 1.7: [42] Διάγραμμα F-N που δίνει την εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος J από το ηλεκτρικό πεδίο F στην επιφάνεια του αγωγού όπως υπολογίζεται (a) από την εξίσωση F-N, (b) αριθμητικά από το υπερβολοειδές μοντέλο και (c) χρησιμοποιώντας επίπεδο εικονικό δυναμικό και ανάπτυξη 2 ^{ου} βαθμού για το ηλεκτροστατικό δυναμικό. Η ακτίνα καμπυλότητας του υπερβολοειδούς είναι $R=10\text{nm}$. Το έργο εξόδου είναι $W=4.5\text{eV}$47	
Σχήμα 2.1: Σχηματική αναπαράσταση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης. ..59	
Σχήμα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης. ..61	
Σχήμα 2.3: Σχηματική αναπαράσταση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης εγγύς πεδίου.....65	
Σχήμα 2.4: [66]Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας ηλεκτροχημικής χάραξης της ακίδας.66	
Σχήμα 2.5: [66] Εικόνες TEM μίας τυπικής ακίδας που χρησιμοποιείται στο NFESSEM σε 4 διαφορετικές κλίμακες.67	
Σχήμα 2.6: [66]Απεικόνιση της σάρωσης επιφάνειας $W(110)$. Πάνω η χρωματική κλίμακα αντιστοιχεί στο ρεύμα της πρωτεύουσας δέσμης και κάτω στο ρεύμα της δευτερεύουσας δέσμης του ανιχνευτή. Η απόσταση καθόδου-δείγματος είναι σταθερή $d=25\text{nm}$, και η επιβαλλόμενη τάση είναι $V=28.8\text{V}$. Η ταχύτητα σάρωσης είναι 450nm/sec . Οι χρωματικές κλίμακες δίνουν τις πραγματικές τιμές των ρευμάτων που μετρούνται.69	

Σχήμα 2.7: [66] Μεταβολή των ρευμάτων I_{FE} (πάνω) και I_{SE} (κάτω) κατά μήκος της κατεύθυνσης x του δείγματος για διάφορα «περάσματα» σε διαφορετικά y κατά τη διάρκεια της σάρωσης. Τα διάφορα χρώματα αντιστοιχούν σε διαφορετικά y . Στις ένθετες εικόνες βλέπουμε την περιοχή του δείγματος στην οποία αντιστοιχεί το κάθε διάγραμμα.	71
Σχήμα 2.8: [68] (Πάνω και κάτω αριστερά) Εικόνες NFESEM ενός δείγματος W(110) με νησίδες Fe για τρεις διαφορετικές αποστάσεις d οι οποίες αναγράφονται πάνω σε κάθε εικόνα. (Κάτω δεξιά) Εικόνα STM του ίδιου δείγματος.	72
Σχήμα 2.9: [68] Τα σήματα του ανιχνευτή του NFESEM και του STM κατά μήκος της γραμμής σάρωσης που φαίνεται στο σχήμα 2.8.	73
Σχήμα 2.10: [67] Ενεργειακή κατανομή της δευτερεύουσας δέσμης για δύο διαφορετικές αποστάσεις d και για το ίδιο πρωτεύον ρεύμα I_{FE} . Οι τάσεις είναι 35V (110nm) και 17V(10nm).....	74
Σχήμα 2.11: [67] (Πάνω αριστερά) Εικόνα STM δείγματος GaAs(110) στο οποίο υπάρχουν νησίδες «ακαθαρσιών». (Κάτω αριστερά και δεξιά) Τρεις εικόνες NFESEM του ίδιου δείγματος όπως προκύπτουν από τη δέσμη δευτερευόντων ηλεκτρονίων απομονώνοντας τρεις διαφορετικές περιοχές. Η απόσταση είναι $d \sim 12\text{nm}$ και η επιβαλλόμενη τάση $V=22\text{V}$. Το πρωτεύον ρεύμα διατηρείται σταθερό μεταβάλλοντας κατάλληλα την απόσταση στα 200nA.	76
Σχήμα 3.1: Γεωμετρία και συντεταγμένες.	85
Σχήμα 3.2: Εικόνες από μικροσκόπιο TEM μίας αντιπροσωπευτικής ακίδας του NFESEM, μαζί με ελλειψοειδή που έχουμε ταιριάξει στο σχήμα του. Οι ακτίνες των ελλειψοειδών είναι (a) $R_1=170\text{nm}$, $R_2=17\text{nm}$), (b) $R_1=650\text{nm}$, $R_2=30\text{nm}$ και (c) $R_1=100\text{nm}$, $R_2=20\text{nm}$	86
Σχήμα 3.3: Μεταβολή του ηλεκτροστατικού δυναμικού 0.1nm μακριά από τον εκπομπό συναρτήσει της σφαιροειδούς συντεταγμένης u για τέσσερις διαφορετικές εκκεντρότητες ελλειψοειδών.	87
Σχήμα 3.4: Υπολογιζόμενα μονοπάτια και ο αντίστοιχος συντελεστής διέλευσης. Το μονοπάτι FWHM εκτείνεται στην προσβάσιμη περιοχή μέχρι την άνοδο. Μία ευθεία γραμμή στην κατεύθυνση εκκίνησης του μονοπατιού FWHM σχεδιάζεται για να τονίσει την καμπύλωση των μονοπατιών και τη μείωση του ανοίγματος της δέσμης σε σχέση με τη μονοδιάστατη μέθοδο JWKB.	90

Σχήμα 3.5: Άνοιγμα της δέσμης στην άνοδο συναρτήσει της απόστασης ανόδου-καθόδου d . Οι τρεις διαφορετικές καμπύλες αντιστοιχούν στα τρία διαφορετικά ελλειψοειδή του σχήματος 3.2. Η διακεκομμένη αντιστοιχεί στις ακτίνες $R_1=100$, $R_2=20$, η συμπαγής στις $R_1=170$, $R_2=17$ και η γραμμή με τις τελείες στις $R_1=650$, $R_2=30$92

Σχήμα 3.6: Μεταβολή του ανοίγματος της δέσμης συναρτήσει (α) της αιχμηρότητας $S=R_1/R_2$ για σταθερό $R_1=170\text{nm}$ (κάτω άξονας-συμπαγής γραμμή) και (β) της ακτίνας R_1 για σταθερή αιχμηρότητα $S=10$ (πάνω άξονας-διακεκομμένη γραμμή).94

Σχήμα 4.1 Πειραματική διάταξη και μεταβλητές. Το σχήμα του εκπομπού είναι αρκετά πιστό στην πραγματικότητα.96

Σχήμα 4.2: Αριστερά: Οικογένεια καμπυλών $I-V$ σε 3 διαφορετικές περιοχές αποστάσεων d : (α) 0.84-2.84mm, (β) 15-1605 μm , και (γ) 3-300nm. Δεξιά: Οι καμπύλες από αριστερά έρχονται να «καταρρεύσουν» πάνω σε μία καμπύλη που αντιστοιχεί σε (α) $d=0.84\text{mm}$, (β) 14 μm , (γ) 300nm, πολλαπλασιάζοντας την τάση με τον παράγοντα κλιμάκωσης $R_s(d)$, οι τιμές του οποίου φαίνονται στα αντίστοιχα ένθετα διαγράμματα. Οι συνεχείς κόκκινες καμπύλες αντιστοιχούν σε συναρτήσεις δύναμης της μορφής $\propto d^{-\lambda}$ με $\lambda=0.71$ (α), 0.27 (β), 0.22 (γ) αντίστοιχα. Η μεταβλητή d αντιστοιχεί στη χρωματική κλίμακα που φαίνεται δεξιά από κάθε εικόνα.98

Σχήμα 4.3: Αριστερά: οικογένεια καμπυλών $V-d$ [δεδομένα από το Σχήμα 2(c)] στην περιοχή από 0.2 έως 300nA, ε κάθε καμπύλη να αντιστοιχεί στο αντίστοιχου χρώματος ρεύμα όπως φαίνεται στο χρωματικό πίνακα δεξιά. Δεξιά: Η οικογένεια καμπυλών που έχουν «καταρρεύσει» σε μία καμπύλη που αντιστοιχεί σε $I=2.3\text{nA}$ πολλαπλασιάζοντας την τάση με έναν αριθμό $f(I)$ ο οποίος σχεδιάζεται ως συνάρτηση του I στο ένθετο διάγραμμα. Η κόκκινη γραμμή που παρεμβάλλεται των σημείων αντιστοιχεί σε συνάρτηση δύναμης με εκθέτη $\lambda=0.22$99

Σχήμα 4.4: Σειρά μετρήσεων $V-d$ για σταθερό ρεύμα $I=0.2\text{nA}$ σε κλίμακα λογαρίθμου-λογαρίθμου για αποστάσεις $3\text{nm}<d<2\mu\text{m}$. Οι καμπύλες έχουν μετακινηθεί κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα για λόγους οπτικής διακρισιμότητας. 101

Σχήμα 4.5: Πάνω: Εικόνες TEM των εκπομπών που χρησιμοποιήθηκαν για τις $V-d$ μετρήσεις. Κάτω $V-d$ μετρήσεις για σταθερό ρεύμα $I=0.2\text{nA}$ για τους διάφορους εκπομπούς των παραπάνω εικόνων. Κάθε εκπομπός αντιστοιχεί σε διαφορετικό χαρακτηριστικό σημάδι (marker). 104

Σχήμα 4.6: (a-c). Πειραματικές καμπύλες ρεύματος-ηλεκτρικού πεδίου σε μορφή διαγραμμάτων FN για 3 διαφορετικούς εκπομπούς και διάφορες αποστάσεις στην περιοχή αποστάσεων $3\text{nm} < d < 300\text{nm}$. Το ρεύμα δίνεται σε nA και το ηλεκτρικό πεδίο σε V/nm. Οι ευθείες μαύρες γραμμές είναι γραμμικές προσεγγίσεις στα πειραματικά δεδομένα που δίνουν τη μέση κλίση του διαγράμματος. Οι μετρήσεις του 4.6a είναι οι ίδιες με αυτές του 4.2c. (d) Θεωρητικός υπολογισμός πυκνότητας ρεύματος-ηλεκτρικού πεδίου σε μορφή διαγράμματος FN για 3 διαφορετικές αποστάσεις. Το διάγραμμα διακεκομμένης-τελείας είναι το διάγραμμα που προκύπτει από την κλασσική εξίσωση FN. Στο ένθετο φαίνονται τα ηλεκτροστατικά δυναμικά που αντιστοιχούν στους υπολογισμούς των ρευμάτων για σταθερό πεδίο στην κορυφή $F=4\text{V/nm}$. Η μέθοδος με την οποία έγιναν οι υπολογισμοί αναλύονται διεξοδικά στην επόμενη παράγραφο..... 106

Σχήμα 4.7: Γεωμετρικό μοντέλο για τον εκπομπό, παράμετροι και συντεταγμένες. 110

Σχήμα 4.8: Υπολογιζόμενο δυναμικό κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα για διάφορες αποστάσεις: (a) πριν από την κλιμάκωση, δηλαδή με την ίδια τάση $V=11.43\text{V}$ και (b) μετά την κλιμάκωση, δηλαδή με τάση $V'=S(d)V$. Ένα γραμμικό δυναμικό ίδιας αρχικής κλίσης σχεδιάζεται επίσης για να αναδείξει συγκριτικά την καμπύλωση του δυναμικού. ... 112

Σχήμα 4.9: Πυκνότητα ρεύματος συναρτήσει της τάσης σε μορφή διαγραμμάτων FN για διάφορες αποστάσεις d : (a) πριν από την κλιμάκωση και (b) μετά την κλιμάκωση. 113

Σχήμα 4.10: Μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια ως προς τη γωνία θ , για διάφορες αποστάσεις d . Το ηλεκτρικό πεδίο κανονικοποιείται ως προς το κατακόρυφο ($\theta=0$). 116

Σχήμα 4.11: Ρεύμα ανά μονάδα γωνίας μεταξύ θ και $\theta+d\theta$ ως συνάρτηση του θ για $d=50\text{nm}$, $V=26\text{V}$. Το μέγιστο εμφανίζεται στις 30° 117

Σχήμα 4.12: Συνολικό ρεύμα ως συνάρτηση της επιβαλλόμενης τάσης για διάφορες αποστάσεις d παρουσιασμένο σε μορφή διαγράμματος F-N (a) πριν από την κλιμάκωση και (b) μετά την κλιμάκωση. Σχεδιάζεται επίσης μία ευθεία γραμμή με την ίδια αρχική κλίση με τις καμπύλες $I-V$ η οποία αναδεικνύει την καμπύλωση των διαγραμμάτων. Στον επάνω δευτερεύοντα οριζόντιο άξονα του δεξιού διαγράμματος δίνεται το κοινό ηλεκτρικό πεδίο σε γωνία $\theta_{\text{max}}=30^\circ$ 118

Σχήμα 5.1: Γεωμετρία και συντεταγμένες 125

Σχήμα 5.2: Σύγκριση του φράγματος δυναμικού όπως υπολογίζεται από την (5.11) (διακεκομμένες γραμμές) και όπως υπολογίζεται αριθμητικά από το ελλειψοειδές μοντέλο

(όπως αναπτύχθηκε στο κεφάλαιο 2) για διάφορες ακτίνες καμπυλότητας. Το ηλεκτροστατικό πεδίο στην κορυφή ($z=0$) είναι σταθερό $F=5\text{V/nm}$ και το έργο εξόδου είναι $W=4.5\text{eV}$ 128

Σχήμα 5.3: Σύγκριση της υπολογιζόμενης πυκνότητας ρεύματος από την (5.21) (διακεκομμένες γραμμές) με την υπολογιζόμενη αριθμητικά με βάση το ελλειψοειδές μοντέλο του 3^{ου} κεφαλαίου (κανονικές γραμμές) για διάφορα R . Το γράφημα είναι διάγραμμα F-N πυκνότητας ρεύματος-ηλεκτρικού πεδίου. Το έργο εξόδου είναι σταθερό $W=4.5\text{eV}$ 132

Σχήμα 5.4: Η ενεργός περιοχή ως συνάρτηση του εφαρμοζόμενου πεδίου σε λογαριθμική κλίμακα. Οι συμπαγείς γραμμές προέρχονται από τον αριθμητικό υπολογισμό με το ελλειψοειδές μοντέλο ενώ οι διακεκομμένες από την εξίσωση 5.33, στην οποία ο παράγοντας κ έχει υπολογιστεί αριθμητικά μέσω του ελλειψοειδούς μοντέλου. Τα διάφορα χρώματα αντιστοιχούν σε διαφορετικές εκκεντρότητες ε της έλλειψης, ενώ η ακτίνα καμπυλότητας παραμένει σταθερή $R=10\text{nm}$. Κόκκινο: $\varepsilon=0$ (σφαίρα), μαύρο: $\varepsilon=0.3$, μπλε: $\varepsilon=0.7$, πράσινο: $\varepsilon=0.99$ 137

Σχήμα 5.5: Πυκνότητα ρεύματος όπως υπολογίζεται από την (5.22) μαζί με την υπολογιζόμενη αριθμητικά από το ελλειψοειδές μοντέλο ενεργό περιοχή συναρτήσει του ηλεκτρικού πεδίου σε λογαριθμική κλίμακα για διάφορες εκκεντρότητες. Για την πυκνότητα ρεύματος είναι $R=10\text{nm}$, $W=4.5\text{eV}$ ενώ για την ενεργό περιοχή έχουν χρησιμοποιηθεί οι ίδιες παράμετροι με τις εκκεντρότητες της έλλειψης να είναι 0.3 (Μπλε), 0.7 (Κόκκινο), 0.99 (Πράσινο)..... 138

Σχήμα 5.6: Τέσσερα διαφορετικά σύνολα πειραματικών μετρήσεων I-V (markers) σε μορφή διαγράμματος F-N από 3 διαφορετικές πειραματικές ομάδες. Οι συμπαγείς γραμμές είναι τα θεωρητικά αποτελέσματα από την εξίσωση (5.22) με παραμέτρους αυτές που φαίνονται στο σχήμα όπως προέκυψαν από τη διαδικασία προσαρμογής στα πειραματικά δεδομένα. 141

Σχήμα 5.7: Πειραματικές μετρήσεις I-V (κουκίδες) σε μορφή διαγράμματος F-N σε σύγκριση με το θεωρητικό αποτέλεσμα της εξίσωσης 5.22 (συμπαγής γραμμή). Στην ένθετη εικόνα είναι SEM φωτογραφία της καθόδου από την οποία λήφθηκαν οι μετρήσεις, μαζί με το υπερβολικό μοντέλο που ταιριάζει στη γεωμετρία της και έχει ακτίνα καμπυλότητας περίπου 4nm 142

Κεφάλαιο 1: *Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων:* *Ιστορική αναδρομή και υπάρχουσα θεωρία*

1.1. *Εισαγωγή-ιστορική ανασκόπηση*

Η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων (Field Electron Emission ή Field Emission –FE) είναι ένα σχετικά απλό φυσικό φαινόμενο που ωστόσο έχει πολύπλοκη ιστορία και η θεωρία του χτίστηκε σταδιακά, παράλληλα με την ανάπτυξη δεκάδων τεχνολογικών εφαρμογών που στηρίζονται σε αυτό. Ως φαινόμενο δεν είναι τίποτα άλλο από κάτι διαισθητικώς (εκ πρώτης όψεως) αναμενόμενο: όταν εφαρμόζονται πολύ ισχυρά ηλεκτρικά πεδία στην επιφάνεια ενός αγώγιμου υλικού, τότε το υλικό αυτό εκπέμπει ηλεκτρόνια, με άλλα λόγια το ηλεκτρικό πεδίο «τραβάει» ηλεκτρόνια από το υλικό.

Το φαινόμενο αυτό παρατηρήθηκε πειραματικά πρώτη φορά, όταν οι γνώσεις φυσικής ήταν ακόμα πολύ περιορισμένες, και οποιαδήποτε κατανόηση του φαινομένου ήταν αδύνατη. Το 1744 ο Winckler [1] παρατήρησε εκφόρτιση μεταξύ ηλεκτροδίων, όταν επιβαλλόταν πολύ υψηλή τάση. Ωστόσο η επιστημονική κοινότητα έπρεπε να περιμένει μέχρι το 1897, όταν ο J. J. Thomson [2] απέδειξε την ύπαρξη των ηλεκτρονίων, μέχρι να γίνει κατανοητό ότι ηλεκτρόνια εκπέμπονται από μέταλλα και με τον τρόπο αυτό εκφορτίζονται τα ηλεκτρόδια. Λίγο αργότερα κατανοήθηκαν από τους Richardson [3] και Einstein [4] τα φαινόμενα της θερμοϊονικής και φωτονικής εκπομπής ηλεκτρονίων, και δείχθηκε ότι τα ηλεκτρόνια για να εξέλθουν από ένα μέταλλο πρέπει να υπερβούν ένα συγκεκριμένο για κάθε μέταλλο ενεργειακό φράγμα, το γνωστό έργο εξόδου (work function), το οποίο σε όλη τη διατριβή θα συμβολίζεται με W .

Η εκπομπή ηλεκτρονίων από ισχυρά ηλεκτρικά πεδία, αποτελεί διαφορετικό φαινόμενο καθώς τα ηλεκτρόνια δεν χρειάζεται να υπερβούν το φράγμα δυναμικού. Το φαινόμενο καταγράφηκε πειραματικά με συστηματικό τρόπο το 1922 από τον Lilienfeld [5]. Από τότε και μετά το πειραματικό ενδιαφέρον αυξήθηκε από την επιστημονική κοινότητα και λήφθηκαν πολλές συστηματικές μετρήσεις πάνω στο φαινόμενο [6]. Οι φυσικοί έψαχναν έναν τρόπο να βάλουν τα δεδομένα σε διάγραμμα ώστε να δίνουν περίπου ευθείες γραμμές. Αν κάτι τέτοιο επιτυγχανόταν, θα βρισκόταν ο νόμος που διέπει τις χαρακτηριστικές ρεύματος-τάσης

I - V και η εξήγηση του φαινομένου θα γινόταν πολύ εύκολη. Για παράδειγμα ο Shottky πρότεινε το 1923 [7] τη σχεδίαση των δεδομένων ως $\log(I)$ - $V^{1/2}$ κάτι που θα εξηγούνταν ως εξής: τα ηλεκτρόνια εκπέμπονται με θερμοϊονική εκπομπή μέσα από ένα μειωμένο λόγω ισχυρού πεδίου φράγμα δυναμικού. Η πρόβλεψη αυτή δεν επιβεβαιώθηκε από τις πειραματικές μετρήσεις I - V ούτε από την εξάρτησή τους από τη θερμοκρασία T . Σωστός τρόπος να σχεδιάζονται τα δεδομένα για να προκύπτουν ευθείες γραμμές δεν βρέθηκε μέχρι τις αρχές του 1928, όταν οι Millikan και Lauritsen [8] βρήκαν ότι το διάγραμμα $\log(I)$ - $1/V$ είναι περίπου ευθεία γραμμή, κάτι το οποίο έδωσε ώθηση στην εξήγηση και κατανόηση του φαινομένου.

Εν τω μεταξύ δύο-τρία χρόνια νωρίτερα είχε αναπτυχθεί και καθιερωθεί η κβαντική θεωρία η οποία είχε δώσει τα θεωρητικά εργαλεία για να εξηγηθεί το φαινόμενο της FE καθώς προέβλεπε το φαινόμενο σήραγγας. Η παρατήρηση των Millikan και Lauritsen είχε προβλεφθεί λίγο νωρίτερα από τον Oppenheimer [9], ο οποίος προσπάθησε να εξηγήσει το φαινόμενο με όρους κβαντομηχανικής, προτείνοντας ότι τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια εξέρχονται με φαινόμενο σήραγγας από τα τροχιακά των ατόμων της επιφάνειας του μετάλλου.

Την ίδια χρονιά (1928) οι Fowler και Nordheim δημοσίευσαν την ιστορική εργασία τους [10] η οποία ανέπτυξε τη θεωρία που έκτοτε αποκαλείται θεωρία Fowler-Nordheim (F-N). Η θεωρία αυτή εξηγεί σχεδόν πλήρως το φαινόμενο και θεωρείται μέχρι σήμερα η βασική θεωρία της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων. Η θεωρία F-N θεωρεί ότι τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται μέσα στο μέταλλο διέπονται από το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων του Sommerfeld [11] και τη στατιστική Fermi-Dirac [12, 13], τα οποία είχαν δημοσιευτεί λίγο νωρίτερα, το 1926. Τα ηλεκτρόνια σύμφωνα με τους F-N εκπέμπονται από το μέταλλο περνώντας με φαινόμενο σήραγγας μέσα από το τριγωνικό φράγμα που δημιουργεί το έργο εξόδου σε συνδυασμό με το ισχυρό εξωτερικό πεδίο. Η θεωρία F-N προέβλεπε ότι το διάγραμμα $\log(I/V^2)$ - $1/V$, που έκτοτε ονομάστηκε διάγραμμα F-N, θα είναι ευθεία γραμμή. Ωστόσο, την εποχή εκείνη οι πειραματικές τεχνικές ήταν ακόμη σε πρώιμο στάδιο και η πειραματική ακρίβεια δεν ήταν επαρκής για να μπορεί κανείς να πει με σιγουριά αν ήταν σωστότερο το αποτέλεσμα αυτό ή το αποτέλεσμα των Lauritsen-Millikan.

Η πρώτη αυτή δημοσίευση του 1928 αποτέλεσε επιστημονικό άλμα όχι μόνο για το φαινόμενο της FE αλλά και γενικότερα για την κβαντική θεωρία στερεάς κατάστασης της εποχής. Ήταν η πρώτη πειραματική απόδειξη της ισχύος της θεωρίας του Sommerfeld αλλά και της στατιστικής Fermi-Dirac για τα μέταλλα και αποτέλεσε τη βάση για τη μετέπειτα ανάπτυξη της θεωρίας ζωνών και ολόκληρης της φυσικής στερεάς κατάστασης. Ένα

σημαντικό στοιχείο που εισήγαγε η θεωρία αυτή είναι ότι δεν διαχώριζε τη θερμοϊονική από την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων. Και οι δύο προέρχονται από τα ίδια ελεύθερα ηλεκτρόνια στο μέταλλο, των οποίων η στατιστική κατανομή αλλάζει ανάλογα με τη θερμοκρασία.

Φυσικά, η αρχική θεωρία F-N δεν προβλέπει με ποσοτική ακρίβεια το φαινόμενο. Κύριο πρόβλημά της ήταν ότι λάμβανε το μοντέλο του ακριβώς τριγωνικού φράγματος. Για το λόγο αυτό από τότε και μετά έχουν γίνει πολλές επεκτάσεις στη θεωρία Fowler-Nordheim ώστε να εξηγείται με μεγαλύτερη λεπτομέρεια το φαινόμενο. Πολύ σύντομα μάλιστα ο Nordheim [14] ενέταξε το εικονικό δυναμικό (image potential) στο σχήμα του φράγματος κάνοντας την κύρια διόρθωση στη θεωρία. Από τότε και μετά έχουν γίνει πολλές βελτιώσεις και επεκτάσεις στη θεωρία F-N για να συμπεριληφθούν διάφορα φαινόμενα που αμελούσε η αρχική δημοσίευση του 1928. Να σημειώσουμε ότι πολλά από τα ιστορικά στοιχεία που δίνονται παραπάνω έχουν ληφθεί από τον Forbes [15].

Παρόλο που η αρχική δημοσίευση του 1928 επιχειρούσε να λύσει κανονικά την εξίσωση Schroedinger, σχεδόν όλες οι επεκτάσεις της θεωρίας F-N χρησιμοποιούν ένα πολύ σημαντικό μαθηματικό εργαλείο για την επίλυση του προβλήματος σήραγγας και την εύρεση του συντελεστή διέλευσης. Το εργαλείο αυτό είναι χρήσιμο στην αντιμετώπιση οποιουδήποτε προβλήματος σήραγγας και αναπτύχθηκε ξεχωριστά το 1924 από τον Jeffreys [16] το 1926 και από τους Wentzel [17], Krammers [18] και Brillouin [19]. Από τότε έχει μείνει γνωστό ως προσέγγιση Jeffreys-Wentzel-Krammers-Brillouin (JWKB) (συντά αναφέρεται καταχρηστικά και ως WKB) και αποτελεί μέρος της τεχνικής που αποκαλείται ημικλαστική προσέγγιση σε προβλήματα κβαντομηχανικής. Στην επόμενη παράγραφο 1.2 θα αναλύσουμε την προσέγγιση JWKB και την τρισδιάστατη επέκτασή της που αναπτύχθηκε το 1937 από τους Karur και Peierls [20]. Στην παράγραφο 1.3 θα αναπτύξουμε τη θεωρία F-N όπως καθιερώθηκε από τους Murphy και Good το 1956 [21] και χρησιμοποιείται συνήθως σήμερα. Τέλος, στην παράγραφο 1.4 θα αναπτύξουμε τη σύγχρονη θεωρία της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων η οποία διαφέρει ουσιαστικά από την κλασική θεωρία F-N καθώς λαμβάνει υπ' όψιν τη σημαντική καμπύλωση των σύγχρονων εκπομπών.

1.2. Η προσέγγιση *Jeffreys-Wentzel-Krammers-Brillouin* και η τρισδιάστατη επέκτασή της

1.2.1. Εισαγωγή

Η προσέγγιση JWKB μας δίνει τη δυνατότητα να ελαττώσουμε ένα δύσκολο κβαντομηχανικό πρόβλημα σε ένα πρόβλημα απλής ολοκλήρωσης. Οι υποθέσεις της προσέγγισης ισχύουν σχεδόν σε κάθε πρακτική περίπτωση πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων (FE). Για το λόγο αυτό αποτελεί πολύ σημαντικό υπολογιστικό εργαλείο για την ανάλυση και κατανόηση όχι μόνο της θεωρίας της FE, αλλά και για κάθε φαινόμενο που περιλαμβάνει διέλευση σήραγγας.

Η μέθοδος JWKB είναι μια προσεγγιστική μέθοδος επίλυσης γραμμικών διαφορικών εξισώσεων, η οποία βρίσκει εφαρμογή και στην εξίσωση Schrödinger. Η μελέτη φαινομένων σκέδασης με τη χρήση της προσεγγιστικής αυτής μεθόδου έχει καταξιωθεί στη βιβλιογραφία. Η προσέγγιση μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιαδήποτε γραμμική διαφορική εξίσωση στην οποία ο μεγιστοβάθμιος όρος πολλαπλασιάζεται με μια μικρή ποσότητα $\epsilon \ll 1$. Εδώ θα ασχοληθούμε με εξισώσεις 2ου βαθμού στην κατηγορία των οποίων είναι και η εξίσωση Schrödinger που μας ενδιαφέρει.

Από τότε που αναπτύχθηκε, στις αρχικές εργασίες των JWKB, η μέθοδος έχει καθιερωθεί στην κβαντομηχανική, ενώ έχουν υπάρξει βελτιώσεις της έτσι ώστε να αποφεύγονται νοηματικά προβλήματα που δημιουργούνται κυρίως στην αντιμετώπιση του προβλήματος στα σημεία καμπής (turning points). Η ανάλυση που θα ακολουθήσουμε εδώ ακολουθεί περίπου την παρουσίαση του θέματος στο κλασικό βιβλίο κβαντομηχανικής των Landau και Lifshitz [22], ενώ για την ανάλυση του προβλήματος της σύνδεσης των κυματοσυναρτήσεων στα σημεία καμπής εφαρμόζουμε την πολύ κομψή μέθοδο των Cocolichio και Viggiano [23].

1.2.2. Μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB

Έστω η γενικού τύπου εξίσωση:

$$\varepsilon^2 \psi'' + q(x)\psi = 0. \quad (1.1)$$

Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger (1.6) εντάσσεται στην παραπάνω μορφή (1.1) με

$$\frac{\hbar^2}{2mE} = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2 = \varepsilon^2 \text{ (όπου } E \text{ η ενέργεια του σωματιδίου, και } \lambda \text{ το αντίστοιχο μήκος κύματος De Broglie)}$$

και $q(x) = 1 - \frac{V(x)}{E} = n^2(x)$. Να σημειωθεί ότι εδώ η ποσότητα ε έχει διαστάσεις

(μήκους) και δεν έχει νόημα να θεωρήσουμε από μόνη της ότι είναι πολύ μικρή. Η προσέγγιση JWKB που θα αναπτύξουμε παρακάτω έχει νόημα, όταν ο δείκτης διάθλασης n μεταβάλλεται αργά σε σχέση με το μήκος κύματος De Broglie λ . Δηλαδή αν ο δείκτης διάθλασης $n(x)$

μεταβάλλεται σημαντικά σε μία απόσταση l όπου $\frac{1}{l} \approx \left\langle \left| \frac{1}{n} \frac{dn}{dx} \right| \right\rangle$, θα πρέπει $\lambda \ll l$.

Η λύση του προβλήματος περιλαμβάνει δύο περιπτώσεις, ή αντίστοιχα δύο περιοχές:

1) την περιοχή για την οποία $q(x) > 0 \Leftrightarrow E > V(x)$ που ονομάζεται και κλασική περιοχή καθώς είναι περιοχή για την οποία το σωματίδιο θα μπορούσε να βρίσκεται και με βάση την κλασική μηχανική και 2) την απαγορευμένη (κλασικά) περιοχή για την οποία $q(x) < 0 \Leftrightarrow E < V(x)$.

- **1η περίπτωση:** $q(x) > 0 \Leftrightarrow E > V(x)$

Θέτουμε $q(x) = n^2(x)$ και η εξίσωση γίνεται:

$$\varepsilon^2 \psi'' + n^2(x)\psi = 0 \quad (1.2)$$

Στην παραπάνω εξίσωση, αν η συνάρτηση $n^2(x)$ ήταν σταθερά $n^2(x) = n_0$, τότε η λύση της (1.2) θα ήταν ο αρμονικός ταλαντωτής της μορφής $\exp(\pm i n_0 x / \varepsilon)$, γεγονός που μας κάνει να προτείνουμε την εξής αλλαγή μεταβλητής:

$$\psi = \exp\left(\frac{i u(x)}{\varepsilon}\right) \quad (1.3)$$

Αντικαθιστώντας την (1.3) στην (1.2) παίρνουμε την εξής εξίσωση:

$$i \varepsilon u'' - (u')^2 + n^2(x) = 0 \quad (1.4)$$

και θέτοντας $u' = v$ παίρνουμε την απλοποιημένη πρωτοβάθμια εξίσωση:

$$i \varepsilon v' - v^2 + n^2(x) = 0 \quad (1.5)$$

Για να συνεχίσουμε τους υπολογισμούς τώρα, θα εφαρμόσουμε θεωρία διαταραχών και θα αναπτύξουμε τη συνάρτηση $v(x)$ σε σειρά με βάση την αδιάστατη παράμετρο $(\varepsilon/l) \ll 1$

$$v = v_0 + \frac{\varepsilon}{l} v_1 + \left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2 v_2 + \dots \quad (1.6)$$

Αντικαθιστούμε το ανάπτυγμα (1.6) στην εξίσωση (1.5) και λαμβάνουμε

$$i\varepsilon \left(v_0 + \frac{\varepsilon}{l} v_1 + \left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2 v_2 + \dots \right)' - \left(v_0 + \frac{\varepsilon}{l} v_1 + \left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2 v_2 + \dots \right)^2 + n^2(x) = 0. \quad (1.7)$$

Από την παραπάνω εξίσωση, παίρνουμε πολλές διαφορετικές εξισώσεις, μία για κάθε δύναμη του ε , δηλαδή μία για κάθε τάξη μεγέθους. Είναι:

$$\begin{aligned} O(1): v_0^2 - n^2(x) = 0 &\Rightarrow v_0 = \pm n(x) \\ O\left(\frac{\varepsilon}{l}\right): 2v_0 v_1 = -lv_0' &\Rightarrow v_1 = -l \frac{n'(x)}{2n(x)} \end{aligned} \quad (1.8)$$

Συνεπώς το v έχει το ανάπτυγμα:

$$v = \pm n(x) - l \frac{n'(x)}{2n(x)} + O\left(\left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2\right). \quad (1.9)$$

Για να βρούμε την ολική κυματοσυνάρτηση ολοκληρώνουμε την εξίσωση (1.9) και καταλήγουμε:

$$u(x) = c \pm \int n(x) dx - \frac{l}{2} \log(n(x)) + O\left(\left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2\right) \quad (1.10)$$

όπου c σταθερά ολοκλήρωσης. Τώρα δεν μένει παρά να αντικαταστήσουμε στην αρχική κυματοσυνάρτηση ψ παραλείποντας τους όρους τάξης μεγαλύτερης από $O(\varepsilon)$:

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i u(x)}{\varepsilon}\right) = \frac{c}{\sqrt{n(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\varepsilon} \int n(x) dx\right). \quad (1.11)$$

Στην παραπάνω εξίσωση έχουμε 2 γραμμικώς ανεξάρτητες προσεγγιστικές (JWKB) λύσεις της (1.2), συνεπώς η γενική λύση θα είναι ο οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός τους:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{n(x)}} \left[A \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \int_{x_0}^x n(x') dx'\right) + B \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon} \int_{x_0}^x n(x') dx'\right) \right] \quad (1.12)$$

για οποιοδήποτε σημείο x_0 εντός της περιοχής όπου $q(x) \geq 0$. Οι παραπάνω κυματοσυναρτήσεις δεν είναι τίποτα άλλο από 2 επίπεδα κύματα, διαμορφωμένα κατά πλάτος και κυματαριθμό με

βάση τη μεταβολή της ποσότητας $n(x) = \sqrt{1 - \frac{V(x)}{E}}$.

- **2η περίπτωση:** $q(x) < 0 \leftrightarrow E < V(x)$

Θέτουμε $q(x) = -\beta^2(x)$ και η εξίσωση γίνεται:

$$\varepsilon^2 \psi'' - \beta^2(x) \psi = 0. \quad (1.13)$$

Στην παραπάνω εξίσωση, αν η συνάρτηση $\beta^2(x)$ ήταν σταθερά $\beta^2(x) = \beta_0^2$ τότε η λύση της θα ήταν εκθετική, της μορφής $\exp(\pm \beta_0 x / \varepsilon)$, γεγονός που μας οδηγεί να προτείνουμε την εξής αλλαγή μεταβλητής:

$$\psi = \exp\left(\frac{u(x)}{\varepsilon}\right). \quad (1.14)$$

Αναλύοντας παρομοίως με την περίπτωση 1, καταλήγουμε στην εξής προσέγγιση:

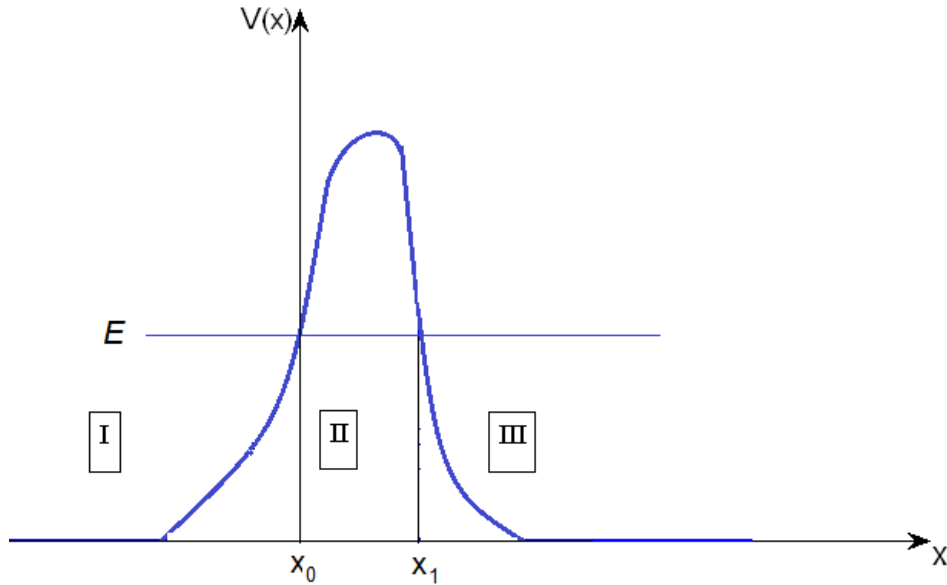
$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\beta(x)}} \left[C \exp\left(\frac{1}{\varepsilon} \int_{x_0}^x \beta(x') dx'\right) + D \exp\left(-\frac{1}{\varepsilon} \int_{x_0}^x \beta(x') dx'\right) \right] \quad (1.15)$$

για οποιοδήποτε σημείο x_0 εντός της περιοχής όπου $q(x) \leq 0$. Η παραπάνω κυματοσυνάρτηση δεν είναι τίποτα άλλο από τη γνωστή εκθετική κυματοσυνάρτηση που είχαμε στο τετραγωνικό φράγμα, διαμορφωμένη κατά πλάτος και με συντελεστή απόσβεσης εξαρτημένο από το x .

Ας δούμε τώρα, πώς εφαρμόζεται η προσεγγιστική μέθοδος JWKB σε προβλήματα φαινομένου σήραγγας. Θεωρούμε ένα τυχαίο δυναμικό $V(x)$ και σωματίδιο ενέργειας E το οποίο κινείται στο δυναμικό αυτό, όπως στο σχήμα 1.1. Έστω ότι $V(x) < E$ για όλη την περιοχή, εκτός από ένα πεπερασμένο μέρος μεταξύ των 2 σημείων που καλούνται σημεία καμπής (turning points). Μεταξύ των δύο σημείων καμπής $x=x_0$ και $x=x_1$, εμφανίζεται επί της ουσίας το φράγμα δυναμικού για το οποίο $V(x) > E$. Η περιοχή αριστερά από την απαγορευμένη περιοχή, ($x < x_0$) καλείται περιοχή I, για $x_0 < x < x_1$ έχουμε την περιοχή II και για $x > x_1$ την περιοχή III. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα της μεθόδου JWKB, η κυματοσυνάρτηση στην περιοχή I θα είναι της μορφής (1.12). Αντίστοιχα στην περιοχή II η λύση θα είναι της μορφής (1.15). Τέλος, στην περιοχή III η λύση παίρνει τη μορφή:

$$\psi(x) = \frac{H}{\sqrt{n(x)}} \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \int_{x_1}^x n(x') dx'\right). \quad (1.16)$$

όπου και πάλι θεωρούμε ένα τυχαίο σημείο x_0 εντός της περιοχής ισχύος της (1.16). Στην παραπάνω εξίσωση δεν υπάρχει όρος με «-» στο εκθετικό, καθώς παριστάνει κύμα οδεύον προς τα αριστερά το οποίο δεν έχει φυσική σημασία για την περιοχή III.



Σχήμα 1.1: Τυχαίο φράγμα δυναμικού. Η κλασσική και η απαγορευμένη περιοχή.

Τώρα, πρέπει να χρησιμοποιηθούν οι συνοριακές συνθήκες για να καθοριστούν οι συντελεστές, και να βρεθεί ο συντελεστής διέλευσης. Ωστόσο βλέπουμε ότι στα σημεία καμπής η προσεγγιστική κυματοσυνάρτηση γίνεται ιδιάζουσα καθώς απειρίζεται. Γενικά η προσεγγιστική κυματοσυνάρτηση JWKB δεν αποτελεί καλή προσέγγιση στην περιοχή των σημείων καμπής, καθώς ο όρος $q(x)$ στην εξίσωση (1.1) πλησιάζει στο 0 και το ανάπτυγμα (1.7) δεν συγκλίνει γρήγορα. Στα σημεία αυτά πρέπει να ληφθούν ειδικές προσεγγίσεις έτσι ώστε να βρεθούν οι σχέσεις που συνδέουν τους συντελεστές A, B, C, D, H .

Κοντά στο σημείο καμπής x_0 μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το δυναμικό μεταβάλλεται γραμμικά και να το αναπτύξουμε κατά Taylor:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) = E + F(x - x_0). \quad (1.17)$$

Η εξίσωση Schroedinger στην περιοχή αυτή μπορεί τότε να γραφεί ως

$$\psi''(\zeta) - \zeta\psi = 0 \quad (1.18)$$

Με την ανηγμένη μεταβλητή ζ να είναι $\zeta = (2mF/\hbar^2)^{1/3}(x - x_0)$. Η (1.18) είναι η γνωστή εξίσωση Airy [24] με λύσεις τις αντίστοιχες συναρτήσεις Airy $Ai(\zeta)$, $Bi(\zeta)$. Για λόγους ομοιότητας με τη μορφή της (1.15) θα λάβουμε ως λύσεις τους μιγαδικούς γραμμικούς συνδυασμούς $Ci(\zeta) = Ai(\zeta) + iBi(\zeta)$ και $Di(\zeta) = Ai(\zeta) - iBi(\zeta)$. Η λύση της εξίσωσης Schroedinger κοντά στο σημείο x_0 παίρνει τελικά τη μορφή:

$$\psi(\zeta) = c_1 Ci(\zeta) + c_2 Di(\zeta) . \quad (1.19)$$

Ως απόρροια της (1.17) και του ορισμού του ζ , προκύπτει ότι

$$\begin{aligned}\frac{2}{3}(-\zeta)^{3/2} &= \frac{1}{\varepsilon} \int_x^{x_0} n(x') dx', x < x_0 \\ \frac{2}{3}\zeta^{3/2} &= \frac{1}{\varepsilon} \int_{x_0}^x \beta(x') dx', x > x_0\end{aligned}\quad (1.20)$$

Οι συναρτήσεις Airy τώρα μπορούν να παρασταθούν μακριά από το σημείο καμπής σύμφωνα με τις ασυμπτωτικές τους σχέσεις [25]. Χρησιμοποιώντας αυτές τις ασυμπτωτικές σχέσεις και τις (1.19) υπολογίζουμε τις λύσεις της εξίσωσης (1.18) μακριά από το σημείο $\zeta=0$:

$$\begin{aligned}\psi &\approx c_1 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi n(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon} \int_x^{x_0} n(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + c_2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi n(x)}} \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \int_x^{x_0} n(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right), x \ll x_0 \\ \psi &\approx \frac{(c_1 + c_2)\sqrt{\varepsilon}}{2\sqrt{\pi\beta(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\varepsilon} \int_{x_0}^x \beta(x') dx'\right) + \frac{i(c_1 - c_2)\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\pi\beta(x)}} \exp\left(\frac{1}{\varepsilon} \int_{x_0}^x \beta(x') dx'\right), x \gg x_0\end{aligned}\quad (1.21)$$

Βλέπουμε ότι οι παραπάνω λύσεις έχουν την ίδια μορφή που παίρνει η λύση JWKB στις αντίστοιχες περιοχές. Χρησιμοποιώντας τις, λοιπόν, θα βρούμε τη σύνδεση μεταξύ των λύσεων JWKB στις δύο περιοχές που χωρίζονται από το σημείο καμπής. Η λύση (1.12) ισχύει μακριά προς τα αριστερά από το σημείο x_0 . Η λύση (1.19) ισχύει κοντά στο σημείο καμπής. Οι δύο λύσεις πρέπει να ταυτίζονται στην ενδιάμεση περιοχή μετάβασης από τη μία στην άλλη. Βλέπουμε ότι οι ασυμπτωτικές προσεγγίσεις (1.21) έχουν την ίδια μορφή με τις αντίστοιχες λύσεις JWKB, οπότε μπορούμε να τις ταυτίσουμε επιλέγοντας τις τιμές των συντελεστών $c_{1,2}$. Οι συντελεστές αυτοί αποτελούν το συνδυαστικό κρίκο μεταξύ των συντελεστών A, B της λύσης JWKB στην περιοχή I και των C, D της περιοχής II. Κάνοντας τις πράξεις βρίσκουμε:

$$\begin{aligned}D &= (Ae^{-i\pi/4} + Be^{i\pi/4}) / 2 \\ C &= (Ae^{i\pi/4} - Be^{3i\pi/4})\end{aligned}\quad (1.22)$$

Τώρα, πρέπει να ακολουθήσουμε την ίδια διαδικασία για το σημείο καμπής x_1 για να συνδέσουμε τους συντελεστές της περιοχής III με αυτούς της περιοχής II. Οι αντίστοιχες με τις (1.21) ασυμπτωτικές σχέσεις μακριά από το δεύτερο σημείο καμπής προκύπτουν:

$$\begin{aligned}\psi &\approx c_1 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi n(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon} \int_{x_1}^x n(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + c_2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi n(x)}} \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \int_{x_1}^x n(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right), x \gg x_1 \\ \psi &\approx \frac{(c_1 + c_2)\sqrt{\varepsilon}}{2\sqrt{\pi\beta(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\varepsilon} \int_x^{x_1} \beta(x') dx'\right) + \frac{i(c_1 - c_2)\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\pi\beta(x)}} \exp\left(\frac{1}{\varepsilon} \int_x^{x_1} \beta(x') dx'\right), x \ll x_1\end{aligned}\quad (1.23)$$

Ταιριάζοντας πάλι τις λύσεις αυτές αριστερά και δεξιά καταλήγουμε:

$$D = H \exp\left(\frac{1}{\varepsilon} \int_{x_0}^{x_1} \beta(x') dx' - \frac{i\pi}{4}\right)$$

$$C = \frac{H}{2} \exp\left(-\frac{1}{\varepsilon} \int_{x_0}^{x_1} \beta(x') dx' + \frac{i\pi}{4}\right)$$
(1.24)

Συνδυάζοντας την (1.24) με την (1.22) παίρνουμε:

$$H = A \frac{e^{-G/2}}{1 + (e^{-G})/4}$$

$$B = iA \frac{1 - (e^{-G})/4}{1 + (e^{-G})/4}$$
(1.25)

Όπου G είναι ο εκθέτης Gamow [26]:

$$G = \frac{2}{\varepsilon} \int_{x_0}^{x_1} n(x) dx$$
(1.26)

Αυτό που φυσικά μας ενδιαφέρει είναι ο συντελεστής διέλευσης που ορίζεται ως ο λόγος του ρεύματος διέλευσης ως προς το προσπίπτον. Για την πυκνότητα ρεύματος εφαρμόζουμε τη γνωστή σχέση για το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας:

$$J = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \psi^* \frac{d}{dx} \psi \right\}$$
(1.27)

και παίρνουμε ότι στην περιοχή III το ρεύμα διέλευσης είναι $J_{III} = H^2 \hbar/m$. Ομοίως το προσπίπτον ρεύμα (αυτό που αντιστοιχεί στο οδεύον προς τα δεξιά κύμα της περιοχής I) είναι $J_{I+} = A^2 \hbar/m$. Ο λόγος των δύο ρευμάτων δίνει το συντελεστή διέλευσης ο οποίος προκύπτει:

$$T = \left| \frac{J_{III}}{J_{I+}} \right| = \frac{e^{-G}}{(1 + (e^{-G})/4)^2} \approx e^{-G} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right]$$
(1.28)

όπου η προσέγγιση ισχύει όταν $G \gg 1$, κάτι που συνήθως είναι αληθές. Το ρεύμα ανάκλασης (ρεύμα που αντιστοιχεί στο οδεύον προς τα αριστερά κύμα της περιοχής I) προκύπτει με παρόμοιο τρόπο $J_{I-} = -B^2 \hbar/m$. Ο συντελεστής ανάκλασης είναι:

$$R = \left| \frac{J_{I-}}{J_{I+}} \right| = \left(\frac{1 - (e^{-G})/4}{1 + (e^{-G})/4} \right)^2 \approx 1 - e^{-G}$$
(1.29)

και βέβαια ισχύει η αρχή διατήρησης $R+T=1$.

Είδαμε, λοιπόν, ότι η μέθοδος JWKB μας δίνει τη δυνατότητα να αναπτύξουμε προσεγγίσεις για την κυματοσυνάρτηση σε κάθε περιοχή του προβλήματος σήραγγας και συνδέοντας τις προσεγγίσεις αυτές να βρούμε τους συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης.

1.2.3. Η τρισδιάστατη προσέγγιση JWKB

Η ανάπτυξη της μεθόδου που είδαμε παραπάνω είναι πολύ χρήσιμη σε πολλά μονοδιάστατα προβλήματα. Ωστόσο, τίθεται το θέμα της ανάπτυξης της ανάλογης μεθόδου για τρισδιάστατα προβλήματα. Βέβαια, στην περίπτωση αυτή η κατάσταση δυσκολεύει δραματικά, καθώς στον τρισδιάστατο χώρο το ολοκλήρωμα στον εκθέτη γίνεται επικαμπύλιο και πρέπει να βρεθεί η αντίστοιχη καμπύλη ολοκλήρωσης.

Το πρόβλημα του πώς κατασκευάζουμε ημικλαστικές λύσεις σε τρισδιάστατα προβλήματα σήραγγας αντιμετωπίστηκε πρώτα το 1937 από τους Karur και Peierls [20]. Το 1987 οι Das και Mahanty [27] επέκτειναν τη μέθοδο βρίσκοντας μία προσέγγιση για το συντελεστή διέλευσης, ενώ μία πιο εκτενή και πλήρη εικόνα του προβλήματος δίνουν οι Huang κ.α. [28], χωρίς ωστόσο να βρίσκουν τελική έκφραση για το συντελεστή διέλευσης. Γενικά, η τρισδιάστατη θεωρία JWKB και το πώς θα εφαρμοστεί σωστά σε προβλήματα σήραγγας είναι ακόμα ανοιχτό πρόβλημα, καθώς η μέθοδος που αναπτύσσεται στη βιβλιογραφία χρήζει σημαντικών βελτιώσεων και επεκτάσεων. Η μέθοδος που θα αναπτύξουμε εδώ και θα χρησιμοποιήσουμε στο 3^ο κεφάλαιο στηρίζεται περισσότερο στο [27].

Στις τρεις διαστάσεις η ημικλαστική ανάλυση παραμένει ίδια με τη μία διάσταση. Και πάλι αναπτύσσουμε τον εκθέτη u της λύσης σε διαταρακτική σειρά και ψάχνουμε τις εξισώσεις που διέπουν τους δύο πρώτους όρους. Για την περίπτωση όπου $E > V$, η απάντηση είναι κατά αντιστοιχία με την (1.8) οι εξής εξισώσεις:

$$\begin{aligned}(\nabla u_0)^2 &= n^2(\mathbf{r}), (a) \\ 2\nabla u_0 \cdot \nabla u_1 &= -i\nabla^2 u_0, (b)\end{aligned}\tag{1.30}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις δεν λύνονται τόσο απλά όσο λύθηκαν οι αντίστοιχες μονοδιάστατες. Το πρόβλημα είναι ότι η πρώτη ορίζει το μέτρο του διανύσματος της κλίσης του u_0 αλλά όχι την κατεύθυνση. Συνεπώς, δεν γνωρίζουμε εξ αρχής, όπως συμβαίνει στην μονοδιάστατη περίπτωση, το μονοπάτι C πάνω στο οποίο θα γίνει η ολοκλήρωση:

$$u_0(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}_0) + \int_{\mathbf{r}_0(C)}^{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}') ds \quad .\tag{1.31}$$

Η απάντηση στο πρόβλημα αυτό δίνεται, αν παρατηρήσουμε ότι η (1.30a) είναι ίδια με την εξίσωση που ισχύει για τη χαρακτηριστική συνάρτηση W της εξίσωσης Hamilton-Jacobi της κλασικής μηχανικής. Για ένα σωματίδιο η λύση για τη χαρακτηριστική συνάρτηση είναι η (1.31) με την καμπύλη ολοκλήρωσης C να είναι το κλασικό μονοπάτι. Δηλαδή, η τροχιά που θα ακολουθούσε βάσει κλασικής μηχανικής το σωματίδιο, όταν υπόκειται σε δυναμικό $V(\mathbf{r})$

και έχει ενέργεια E . Για να βρεθεί βέβαια το μονοπάτι αυτό, θα πρέπει να λυθούν οι εξισώσεις από το δεύτερο νόμο του Newton. Συνεπώς το πρόβλημα της επίλυσης της εξίσωσης εκπίπτει στην επίλυση τριών συνήθων διαφορικών εξισώσεων και μία επικαμπύλια ολοκλήρωση, πρόβλημα αρκετά ευκολότερο από την επίλυση μίας μερικής διαφορικής εξίσωσης.

Στην περίπτωση όπου $V > E$, γράφουμε την κυματοσυνάρτηση όπως στην (1.14) και η οι αντίστοιχες εξισώσεις γίνονται

$$\begin{aligned} (\nabla u_0)^2 &= \beta^2(\mathbf{r}), (a) \\ 2\nabla u_0 \cdot \nabla u_1 &= -l\nabla^2 u_0, (b) \end{aligned} \quad (1.32)$$

και φυσικά η λύση για τη μηδενικής τάξης προσέγγιση u_0 κατασκευάζεται με ακριβώς τον ίδιο τρόπο με την (1.31), μόνο που τώρα στη θέση του n^2 βάζουμε το β^2 και φυσικά για την εύρεση της τροχιάς ολοκλήρωσης στο πρόβλημα κλασσικής μηχανικής αντικαθιστούμε το $E-V$ με το $V-E$. Μετατρέπουμε δηλαδή το φράγμα σε πηγάδι και λύνουμε το πρόβλημα της Νευτώνειας μηχανικής με ενέργεια $-E$ και δυναμικό $-V$.

Η επίλυση που περιγράφηκε παραπάνω εφαρμόζεται υπό την προϋπόθεση ότι το u_0 είναι πραγματικό. Αν είναι μιγαδική ποσότητα, τότε οι εξισώσεις (1.30a, 1.32a) δίνουν ζεύγος πραγματικών εξισώσεων:

$$\begin{aligned} (\nabla \Re\{u_0\})^2 - (\nabla \Im\{u_0\})^2 &= n^2(\mathbf{r}), (a) \\ \nabla \Re\{u_0\} \cdot \nabla \Im\{u_0\}_1 &= 0, (b) \end{aligned} \quad (1.33)$$

Η επίλυση του παραπάνω ζεύγους εξισώσεων είναι πολύ πιο πολύπλοκη υπόθεση από την επίλυση στην περίπτωση που η u_0 είναι πραγματική ποσότητα. Οι Huang κ. α [28] αναλύουν τη μέθοδο με την οποία λύνεται το πρόβλημα βασιζόμενοι στη μέθοδο του Huygens. Οι Karur και Peierls [20] αποδεικνύουν ότι η επίλυση του προβλήματος με u_0 πραγματικό δίνει ένα κάτω όριο για τις τιμές της λύσης του προβλήματος (1.33), το οποίο συχνά είναι πολύ κοντά στην πλήρη λύση.

Για την κλασσικά επιτρεπτή περιοχή ($E > V$) είναι συνήθης πρακτική να θεωρείται το u_0 πραγματικό και το πρόβλημα της κβαντικής φυσικής να εκπίπτει σε πρόβλημα κλασσικής μηχανικής. Στην απαγορευμένη περιοχή, ωστόσο, κάτι τέτοιο δεν μπορεί να ληφθεί a priori ως δεδομένο. Στο [28] αποδεικνύεται ότι το u_0 είναι πραγματικό και στην απαγορευμένη περιοχή, όταν η συνοριακή συνθήκη στο σημείο καμπής είναι $\nabla \Im\{u_0\} = 0$, δηλαδή η πρόσπτωση του κύματος είναι κάθετη στην επιφάνεια καμπής προς την απαγορευμένη περιοχή. Επίσης δείχνεται ότι οι κυματοσυναρτήσεις που δεν έχουν κάθετη πρόσπτωση στην επιφάνεια παίρνουν πολύ μικρότερη τιμή στην άλλη επιφάνεια καμπής και συνεπώς έχουν πολύ μικρή

συνεισφορά στο ρεύμα σήραγγας. Γενικά, όπως άλλωστε κάνουν και οι Das και Mahanty [27], αποτελεί πολύ καλή προσέγγιση να θεωρήσουμε ότι η πρόσπτωση είναι κάθετη στην επιφάνεια και αυτό θα εφαρμόσουμε στο 3^ο κεφάλαιο.

Δεδομένης της λύσης (1.31) για την μηδενικής τάξης προσέγγιση μπορεί να βρεθεί η προσέγγιση πρώτης τάξης. Η (1.30b) μας δίνει την παράγωγο του u_1 στην κατεύθυνση το μονοπατιού ολοκλήρωσης C , δηλαδή στην κατεύθυνση με μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{k} = \nabla u_0 / |\nabla u_0|$. Ξαναγράφοντας την (1.30b) έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \nabla u_1 &= -\frac{l}{2} \left[|\nabla u_0|^{-1} \mathbf{k} \cdot (\nabla |\nabla u_0|) + \nabla \cdot \mathbf{k} \right] \leftrightarrow \\ \frac{du_1}{ds} &= -\frac{l}{2} \left[\frac{d^2 u_0}{ds^2} \left(\frac{du_0}{ds} \right)^{-1} + \nabla \cdot \mathbf{k} \right] \end{aligned} \quad (1.34)$$

η οποία λύνεται κατ' αντιστοιχία με την (1.10):

$$u_1(\mathbf{r}) - u_1(\mathbf{r}_0) = \frac{l}{2} \left[-\log \left(\frac{n(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r}_0)} \right) + \int_{\mathbf{r}_0(C)}^{\mathbf{r}} \nabla \cdot \mathbf{k} ds \right] \quad (1.35)$$

που διαφέρει από την αντίστοιχη μονοδιάστατη, καθώς υπάρχει ο δεύτερος όρος μέσα στην παρένθεση, του οποίου η συνεισφορά πρέπει να υπολογιστεί.

Αν θεωρήσουμε ότι ένα σύνολο γειτονικών τροχιών C γύρω από το σημείο \mathbf{r} δημιουργούν μία απειροστά μικρή σωλήνα με διατομή $\sigma(\mathbf{r})$, τότε με χρήση του ορισμού της απόκλισης και του θεωρήματος Gauss του διανυσματικού λογισμού αποδεικνύεται εύκολα [28] ότι $\nabla \cdot \mathbf{k} = \sigma^{-1} d\sigma / ds$. Η λύση παίρνει την τελική μορφή για την προσιτή περιοχή:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\sigma(\mathbf{r})n(\mathbf{r})}} \left[A \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \int_{\mathbf{r}_0(C)}^{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}') ds \right) + B \exp \left(-\frac{i}{\varepsilon} \int_{\mathbf{r}_0(C)}^{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}') ds \right) \right] \quad (1.36)$$

και αντίστοιχα για την απαγορευμένη:

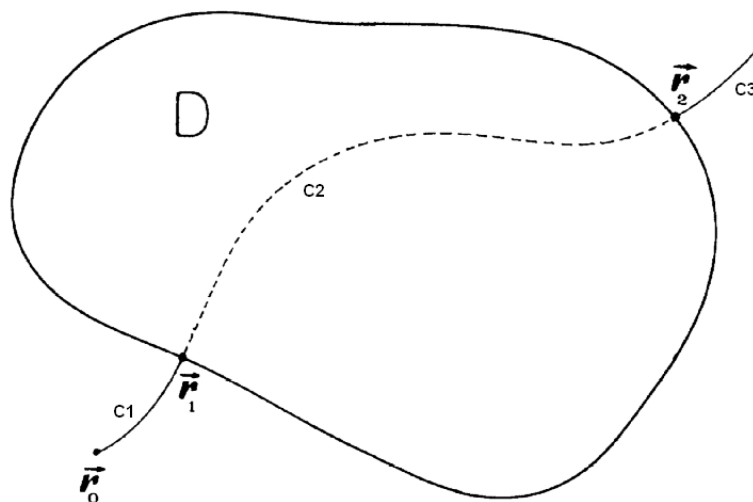
$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\sigma(\mathbf{r})\beta(\mathbf{r})}} \left[A \exp \left(\frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbf{r}_0(C)}^{\mathbf{r}} \beta(\mathbf{r}') ds \right) + B \exp \left(-\frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbf{r}_0(C)}^{\mathbf{r}} \beta(\mathbf{r}') ds \right) \right]. \quad (1.37)$$

Η ποσότητα σ που εμφανίζεται ως διαφορά σε σχέση με τη μορφή των λύσεων στη μονοδιάστατη περίπτωση εξασφαλίζει τη διατήρηση της πιθανότητας και την ικανοποίηση της εξίσωσης συνεχείας $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$.

Αυτό που μένει τώρα είναι να βρεθούν οι συνδετικές σχέσεις μεταξύ των λύσεων στις τρεις περιοχές του προβλήματος για να προσδιοριστεί ο συντελεστής διέλευσης. Ωστόσο, στα [28] και [20] δεν αναπτύσσονται αυτές οι σχέσεις. Στο [28] σκιαγραφείται η μέθοδος αλλά δεν δίνεται τελική απάντηση για το συντελεστή διέλευσης. Στο [27] οι Das και Mahanty

αναπτύσσουν τις σχέσεις αυτές και δίνουν λεπτομέρειες για την εφαρμογή της μεθόδου. Τη μέθοδός του θα χρησιμοποιήσουμε στο κεφάλαιο 3.

Εν συντομία, η μέθοδος των Das και Mahanty έχει ως εξής: Έστω, ότι το τρισδιάστατο πρόβλημα έχει μία περιοχή D στην οποία $V > E$ και στον υπόλοιπο χώρο είναι $E > V$ όπως φαίνεται στο σχήμα 1.2. Αν γνωρίζουμε το μ_0 στο σημείο \mathbf{r}_0 , τότε επιλύουμε το πρόβλημα κλασσικής μηχανικής και βρίσκουμε το μονοπάτι C_1 πάνω στο οποίο γίνεται η ολοκλήρωση (1.31). Αυτό το μονοπάτι, αν συναντά την επιφάνεια καμψής, τη συναντά κάθετα στο σημείο \mathbf{r}_1 . Αυτό συμβαίνει, επειδή η ταχύτητά του μηδενίζεται στο σημείο καμψής και η κατεύθυνση της τροχιάς του ταυτίζεται με την επιτάχυνση. Η επιτάχυνση βέβαια είναι παράλληλη με τη δύναμη και συνεπώς κάθετη στην επιφάνεια, αφού οι ισοδυναμικές επιφάνειες είναι πάντα κάθετες στις δυναμικές γραμμές.



Σχήμα 1.2: Η απαγορευμένη περιοχή, το μονοπάτι ολοκλήρωσης και τα αντίστοιχα σημεία \mathbf{r}_1 και \mathbf{r}_2 που είναι τα σημεία εισόδου και εξόδου αντίστοιχα στην απαγορευμένη περιοχή. Τα $C_{1,2,3}$ είναι τα τμήματα της τροχιάς πριν, εντός και μετά την απαγορευμένη περιοχή αντίστοιχα.

Το μονοπάτι συνεχίζεται μέσα στην απαγορευμένη περιοχή ακολουθώντας την καμπύλη C_2 , μεταβάλλοντας το χρόνο στο φανταστικό άξονα και επιλύοντας το πρόβλημα κλασσικής μηχανικής με $-E$ και $-V$. Το μονοπάτι βρίσκει από την άλλη πλευρά τη δεύτερη επιφάνεια καμψής στο σημείο \mathbf{r}_2 και πάλι κάθετα. Έπειτα, συνεχίζεται έξω από την περιοχή D , στην καμπύλη C_3 , μεταβάλλοντας το χρόνο ξανά στον πραγματικό άξονα. Η κυματοσυνάρτηση δίνεται εισάγοντας την πρώτης τάξης προσέγγιση που δίνεται από την (1.31) στην (1.3). Το ρεύμα στην κλασσικά προσβάσιμη περιοχή δίνεται από την (1.27) και προκύπτει:

$$\mathbf{J}_1(\mathbf{r}) = \left[\frac{2}{m} (E - V(\mathbf{r})) \right]^{1/2} \mathbf{k}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{J}_3(\mathbf{r}) = \exp(-G) \left[\frac{2}{m} (E - V(\mathbf{r})) \right]^{1/2} \mathbf{k}(\mathbf{r})$$
(1.38)

όπου ο τρισδιάστατος εκθέτης Gamow G είναι:

$$G = \frac{2}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_1(C_2)}^{\mathbf{r}_2} \sqrt{2m(V(\mathbf{r}) - E)} ds$$
(1.39)

Ο συντελεστής διέλευσης προκύπτει διαιρώντας τις δύο εκφράσεις για το ρεύμα στα σημεία καμπής $\mathbf{r}_{1,2}$:

$$T = \left(\frac{|\nabla V|_{\mathbf{r}_2}}{|\nabla V|_{\mathbf{r}_1}} \right)^{1/2} \exp(-G)$$
(1.40)

Για να βρούμε, λοιπόν, το ρεύμα σήραγγας που προκύπτει από ένα ηλεκτρόνιο ενέργειας E που προσπίπτει στο σημείο \mathbf{r}_1 , βρίσκουμε την κλασσική τροχιά ξεκινώντας από το σημείο αυτό, και φυσικά βρίσκουμε και το σημείο \mathbf{r}_2 από το οποίο εξέρχεται. Ο συντελεστής διέλευσης δίνεται από την (1.40). Αν θέλουμε να βρούμε το ρεύμα και σε άλλα σημεία της επιτρεπτής περιοχής, μπορούμε να συνεχίσουμε το μονοπάτι C_3 και να λάβουμε την (1.38).

Στο σημείο αυτό πρέπει να λεχθεί ότι η παραπάνω μέθοδος, όπως παρουσιάζεται στο [27], παρόλο που δίνει μία πολύ καλή προσέγγιση για το πρόβλημα, έχει δύο πολύ σοβαρά προβλήματα θεωρητικής φύσης.

Το πρώτο πρόβλημα είναι ότι για τη λύση λαμβάνει μόνο τη μηδενικής τάξης διαταρακτική προσέγγιση, με αποτέλεσμα να λείπει ο πολλαπλασιαστικός όρος στις (1.36,1.37). Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η τελική εξίσωση που δίνει για το ρεύμα να μην ικανοποιεί την εξίσωση συνεχείας. Αυτό σημαίνει ότι, αν ολοκληρώσει κανείς επιφανειακά την πυκνότητα ρεύματος σε δύο διαδοχικές επιφάνειες, θα βρει διαφορετικό ρεύμα. Το δεύτερο πρόβλημα είναι ότι δεν παίρνει τις σωστές συνδετικές σχέσεις που αναπτύχθηκαν στη μονοδιάστατη περίπτωση, αλλά για την εύρεση του συντελεστή διέλευσης διαιρεί την τιμή του ρεύματος στις δύο επιφάνειες καμπής, και μάλιστα επειδή το ρεύμα μηδενίζεται και στις δύο εφαρμόζει τον κανόνα του Hospital. Αυτό φυσικά δεν συνάδει με τις προϋποθέσεις ισχύος της μεθόδου JWKB η οποία, όπως είπαμε στην αρχή της παραγράφου, χάνει την ισχύ της κοντά στα σημεία καμπής. Αν μάλιστα είχε ληφθεί υπ' όψιν και η πρώτη τάξης διόρθωση, οι κυματοσυναρτήσεις της μορφής (1.35) και (1.36) απειρίζονται στα σημεία αυτά. Ένα επιπρόσθετο πρόβλημα που δημιουργείται είναι ότι ο συντελεστής διέλευσης που δίνεται έχει

έναν παράγοντα πριν τον εκθετικό της μορφής $(|\nabla V|_{r_2} / |\nabla V|_{r_1})^{1/2}$ ο οποίος δεν υπάρχει στη μονοδιάστατη περίπτωση, ενώ θα αναμέναμε από μία τρισδιάστατη θεωρία να ταυτίζεται με την μονοδιάστατη στην εκφυλισμένη περίπτωση που το πρόβλημα είναι μονοδιάστατο.

Παρ' όλα αυτά, αν εξαιρέσει κανείς τον παράγοντα αυτό, το αποτέλεσμα που δίνουν οι Das και Mahanty δίνει τον διαισθητικά αναμενόμενο συντελεστή διέλευσης σε αντιστοιχία με την μονοδιάστατη περίπτωση. Ο συντελεστής πριν το εκθετικό δεν έχει μεγάλη συνεισφορά καθώς εξ αρχής έχουμε υποθέσει ότι το δυναμικό μεταβάλλεται αργά. Στις συνήθεις περιπτώσεις πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων ο συντελεστής αυτός κυμαίνεται γύρω από το $1/2$.

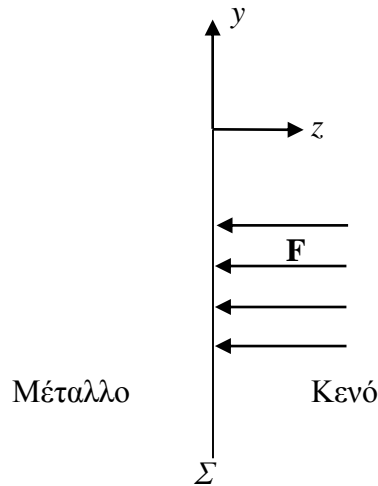
Είδαμε, λοιπόν, πώς αναπτύσσεται η τρισδιάστατη προσέγγιση JWKB και αναδείξαμε τα πλεονεκτήματα αλλά και τα σοβαρά θεωρητικά προβλήματα που αντιμετωπίζεις. Μελλοντική έρευνα πάνω στο πώς μπορεί να αναπτυχθεί με σωστό φορμαλισμό η μέθοδος θα ήταν εξαιρετικά ενδιαφέρονσα.

1.3. Η κλασική θεωρία Fowler-Nordheim και οι επεκτάσεις της

1.3.1. Εισαγωγή-Περιγραφή μοντέλου και γεωμετρίας

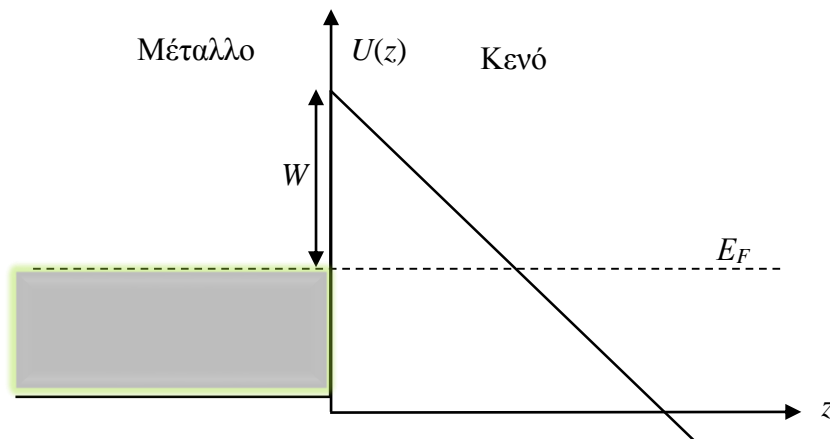
Η κλασική θεωρία F-N αναπτύχθηκε το 1928 και έκτοτε έχει λάβει πολλές επεκτάσεις και βελτιώσεις. Η αρχική ανάλυση δεν χρησιμοποιούσε την προσέγγιση JWKB, αλλά έλυne το απλοποιημένο πρόβλημα του ακριβώς τριγωνικού φράγματος. Οι μετέπειτα επεκτάσεις [21] και διορθώσεις της χρησιμοποίησαν την προσέγγιση JWKB και έδωσαν αποτελέσματα σε πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα. Στο κεφάλαιο αυτό θα αναπτύξουμε τη θεωρία κατ' ευθείαν χρησιμοποιώντας τη μέθοδο JWKB, όπως «καταστάλαξε» τη δεκαετία του 1950, μετά από πολλές βελτιώσεις της αρχικής δουλειάς των F-N, και χρησιμοποιείται μέχρι σήμερα.

Ας ξεκινήσουμε από τις υποθέσεις της θεωρίας. Υποθέτουμε ότι έχουμε ένα μέταλλο που εκτείνεται στο μισό χώρο αριστερά της επίπεδης διεπιφάνειας Σ , η οποία το διαχωρίζει από το κενό που βρίσκεται δεξιά, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.3. Έστω επίσης ότι στο κενό δεξιά εφαρμόζεται ένα ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{F} κάθετα στη διεπιφάνεια Σ . Υποθέτουμε ακόμα ότι τα ηλεκτρόνια στο μέταλλο διέπονται από το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων.



Σχήμα 1.3: Μοντέλο της θεωρίας F-N. Διάταξη και συντεταγμένες

Όπως είναι προφανές και από το παραπάνω σχήμα, το πρόβλημα είναι μονοδιάστατο αφού υπάρχει συμμετρία στις διαστάσεις y, x . Συνεπώς, τα πάντα από εδώ και μετά θα γράφονται συναρτήσει της διάστασης z . Ας δούμε τώρα, στο σχήμα 1.4, τη μορφή που παίρνει η δυναμική ενέργεια που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται μέσα στο μέταλλο. Στο εσωτερικό του μετάλλου το δυναμικό είναι σταθερό. Στο σημείο $z=0$ της διεπιφάνειας υπάρχει ένα φράγμα δυναμικού το οποίο βρίσκεται σε ύψος W (=έργο εξόδου - work function) πάνω από την ενεργειακή στάθμη Fermi E_F . Τέλος, για $z>0$ η δυναμική ενέργεια είναι γραμμικά μειούμενη με κλίση $-F$.



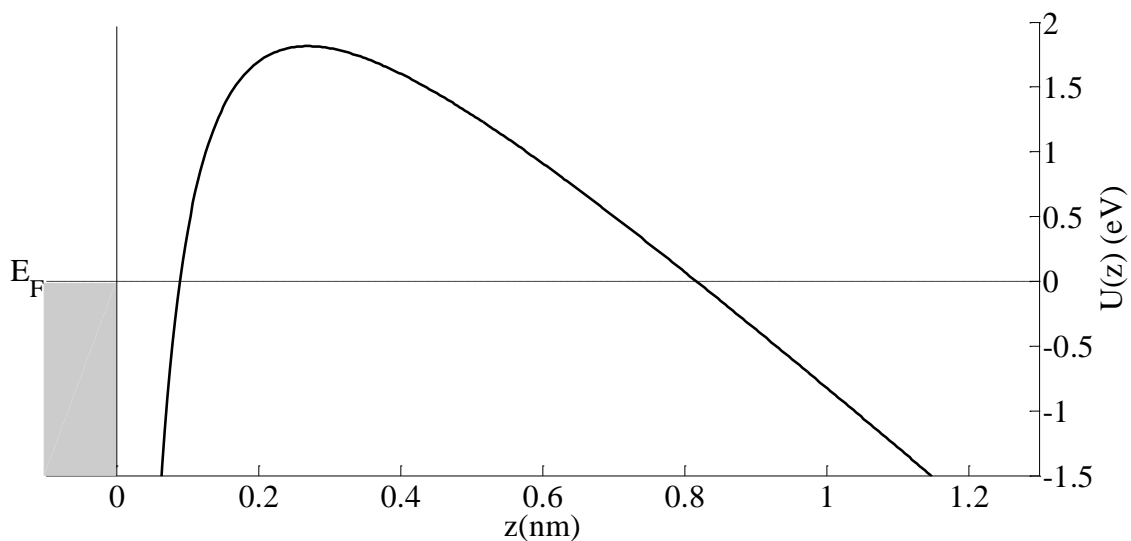
Σχήμα 1.4: Ηλεκτροστατική δυναμική ενέργεια που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο.

Το μοντέλο για το δυναμικό που λάμβανε η αρχική δουλειά των F-N είναι το παραπάνω το οποίο ονομάζεται ακριβώς τριγωνικό φράγμα (exact triangular barrier). Ωστόσο, η πραγματικότητα διαφέρει από αυτό. Τα ηλεκτρόνια, όταν βρεθούν στο κενό, εκτός από το

εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο αλληλεπιδρούν με το μέταλλο που άφησαν. Τα ηλεκτρόνια προκαλούν ένα πεδίο, μόλις βρεθούν έξω από το μέταλλο, το οποίο με τη σειρά του προκαλεί αναδιάταξη των φορτίων του μετάλλου, έτσι ώστε η επιφάνεια του μετάλλου να κρατηθεί ισοδυναμική. Αυτή η αναδιάταξη με τη σειρά της προκαλεί ένα πεδίο στο ηλεκτρόνιο. Το δυναμικό αυτό είναι σημαντικό στα πρώτα 0.1-0.3 nm έξω από τη διεπιφάνεια και συνήθως ονομάζεται εικονικό δυναμικό (image potential), επειδή η ανάλυσή του γίνεται με τη μέθοδο των ειδώλων τοποθετώντας ένα εικονικό φορτίο συμμετρικά ως προς τη Σ με το ηλεκτρόνιο.

Το εικονικό δυναμικό αντιστοιχεί σε αυτό που μία πλήρης κβαντομηχανική ανάλυση θα ονόμαζε αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και συσχέτισης (exchange and correlation). Μία ακριβέστερη κβαντομηχανική ανάλυση θα τοποθετούσε το επίπεδο συμμετρίας λίγο πιο δεξιά από το Σ [29], ωστόσο κάτι τέτοιο θα έκανε ελάχιστη διαφορά στα αποτελέσματα της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων σε συνήθεις καταστάσεις ηλεκτρικών πεδίων.

Η επίλυση του προβλήματος του εικονικού δυναμικού [30] δίνει ένα πολύ απλό αποτέλεσμα για το συνολικό φράγμα: προσθέτει στη δυναμική ενέργεια που «βλέπει» το ηλεκτρόνιο έναν όρο της μορφής $-b/z$ με $b=e^2/(16\pi\epsilon_0)\approx 0.36$ eV nm. Στο σχήμα 1.5 βλέπουμε ποσοτικά το δυναμικό που βλέπει ένα ηλεκτρόνιο όταν $W=4.5$ eV και $F=5$ V/nm.



Σχήμα 1.5: Δυναμικό φράγμα όπως προκύπτει προσθέτοντας και το εικονικό δυναμικό. Η αρχή των ενεργειών τοποθετείται στην ενέργεια Fermi. Οι ποσοτικές παράμετροι είναι $W=4.5$ eV, $F=5$ V/nm.

1.3.2. Φράγμα δυναμικού και συντελεστής διέλευσης

Αν γράψουμε τη δυναμική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου παίρνουμε:

$$U(z) = W - eFz - \frac{b}{z} \quad (1.41)$$

Τα ηλεκτρόνια μπορούν να περάσουν από τα αριστερά του φράγματος στα δεξιά με φαινόμενο σήραγγας. Ο συντελεστής διέλευσης στην περίπτωση αυτή θα δίνεται από την προσέγγιση JWKB: $D = \exp(-G)$ με τον εκθέτη Gamow να είναι:

$$G = g \int_{z_1}^{z_2} \left(W - eFz - \frac{b}{z} - E \right)^{1/2} dz \quad (1.42)$$

με $g = (8m)^{1/2} / \hbar \approx 10.246(\text{eV})^{1/2} \text{nm}$. Με z_1, z_2 συμβολίζονται τα σημεία καμπής εισόδου και εξόδου αντίστοιχα, δηλαδή τα σημεία στα οποία μηδενίζεται η υπόριζη ποσότητα. Αν ξαναγράψουμε την (1.42) χρησιμοποιώντας ανηγμένες αδιάστατες μεταβλητές $\zeta = eF/(W-E)$, $y = 2(bF)^{1/2}/(W-E)$ παίρνουμε:

$$G = g \frac{(W-E)^{3/2}}{eF} \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \left(1 - \zeta - \frac{y^2}{4\zeta} \right)^{1/2} d\zeta \quad (1.43)$$

Στην παραπάνω έκφραση, αν το φράγμα είναι το τριγωνικό ($b=0$) όπως το έλαβαν στην αρχική τους δουλειά οι F-N, τότε το ολοκλήρωμα παίρνει την τιμή $2/3$ και η μορφή του εκθέτη είναι πολύ απλή. Ωστόσο, στη γενική περίπτωση όπου λαμβάνεται υπ' όψιν και το εικονικό δυναμικό, το ολοκλήρωμα είναι συνάρτηση του y και η εύρεση της τιμής του περιλαμβάνει τη χρήση των ελλειπτικών συναρτήσεων. Το ολοκλήρωμα μπορεί να θεωρηθεί ως πολλαπλασιαστική διόρθωση στο αποτέλεσμα για το τριγωνικό φράγμα. Η διόρθωση αυτή είναι:

$$v(y) = \frac{3}{2} \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \sqrt{1 - \zeta - y^2 / 4\zeta} d\zeta = \sqrt{1+y} \left[E\left(\frac{1-y}{1+y}\right) - yK\left(\frac{1-y}{1+y}\right) \right] \quad (1.44)$$

όπου $E(m)$, $K(m)$ οι γνωστές ελλειπτικές συναρτήσεις πρώτου και δεύτερου είδους αντίστοιχα [31]. Η συνάρτηση αυτή όπως και κάποιες παράγωγές της, που θα χρησιμοποιηθούν παρακάτω, έχουν αναλυθεί πολύ στη βιβλιογραφία, και οι τιμές τους μπορούν να βρεθούν είτε από πίνακες [32], είτε από αναπτύξεις σε σειρά και προσεγγίσεις [33], είτε πλέον υπολογίζοντας απ' ευθείας τις ελλειπτικές συναρτήσεις με χρήση υπολογιστικών πακέτων όπως το Mathematica.

Βρήκαμε, λοιπόν, το συντελεστή διέλευσης για ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται σε μία κατάσταση με ενέργεια E στην κατεύθυνση z . Τώρα πρέπει να αθροίσουμε ως προς όλες τις

καταστάσεις που υπάρχουν μέσα στο μέταλλο βάσει του μοντέλου των ελεύθερων ηλεκτρονίων.

1.3.3. Πυκνότητα ρεύματος-άθροιση καταστάσεων

Το ρεύμα που προκύπτει στα δεξιά του φράγματος δυναμικού μπορεί να βρεθεί αν αθροίσουμε όλες τις συνεισφορές από τις διάφορες ηλεκτρονικές καταστάσεις που υπάρχουν μέσα στο μέταλλο. Βάσει του μοντέλου των ελεύθερων ηλεκτρονίων, τα ηλεκτρόνια που προσπίπτουν στη διεπιφάνεια του μετάλλου ανά δευτερόλεπτο και ανά μονάδα επιφάνειας και έχουν z -συνιστώσα ενέργειας μεταξύ E και $E+dE$ είναι [34]:

$$N(E) = \frac{emkT}{2\pi^2\hbar^3} \log \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) \right] \quad (1.45)$$

Στην παραπάνω εξίσωση T είναι η απόλυτη θερμοκρασία και k η σταθερά του Boltzmann. Για να αποφεύγεται σύγχυση μεταξύ των συμβόλων στην παράγραφο αυτή θα χρησιμοποιούμε το σύμβολο D για το συντελεστή διέλευσης. Τα υπόλοιπα σύμβολα έχουν τη συνήθη σημασία τους. Τα αντίστοιχα ηλεκτρόνια που διαδίδονται στα δεξιά του φράγματος μπορούν να βρεθούν πολλαπλασιάζοντας την έκφραση (1.45) με το συντελεστή διέλευσης και θα είναι $N(E)D(E)$.

Για να βρούμε, λοιπόν, τη συνολική πυκνότητα ρεύματος, πρέπει να αθροίσουμε τις συνεισφορές από όλες τις ενέργειες. Επειδή η ενέργεια έχει συνεχές φάσμα το άθροισμα γίνεται ολοκλήρωμα. Η τελική έκφραση είναι:

$$J = \frac{emkT}{2\pi^2\hbar^3} \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) \log \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) \right] dE \quad (1.46)$$

Το παραπάνω ολοκλήρωμα δεν μπορεί να λυθεί αναλυτικά. Ωστόσο μπορούμε να κάνουμε μία πολύ καλή προσέγγιση για το συντελεστή διέλευσης D και χρησιμοποιώντας την να βρούμε αναλυτική έκφραση για την (1.46).

Ο συντελεστής διέλευσης πέφτει φθίνει όσο πέφτει η ενέργεια. Επίσης η $N(E)$ φθίνει εκθετικά για ενέργειες $E > E_F$. Είναι συνεπώς προφανές ότι η μεγαλύτερη συνεισφορά στο ολοκλήρωμα (1.46) προέρχεται από ενέργειες γύρω από τη στάθμη Fermi. Μπορούμε λοιπόν να αναπτύξουμε τον εκθέτη Gamow γύρω από την ενέργεια Fermi σε πολώνυμο Taylor και να θεωρήσουμε ότι ο γραμμικός όρος είναι επαρκής. Είναι δηλαδή (θέτουμε όπως και στο σχήμα 1.5 την αρχή των ενεργειών στην E_F , οπότε $E - E_F = E$):

$$G(E) \approx G(0) + G'(0)E = G(0) - Ed_0 \quad (1.47)$$

Η παράγωγος d_0 βρίσκεται από την (1.43):

$$d_0 = g \frac{W^{1/2}}{eF} \left[v(y) - \frac{2}{3} yv'(y) \right] \quad (1.48)$$

όπου η ποσότητα μέσα στην αγκύλη θα ονομάζεται $t(y)$ και αποτελεί τη δεύτερη συνάρτηση διόρθωσης λόγω του εικονικού δυναμικού.

Εισάγοντας την έκφραση (1.47) στην (1.46) παίρνουμε:

$$J \approx \frac{emkT}{2\pi^2\hbar^3} D(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(d_0 E) \log \left[1 + \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \right] dE. \quad (1.49)$$

Το παραπάνω ολοκλήρωμα τώρα μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Με χρήση του Mathematica μπορούμε εύκολα να βρούμε ότι:

$$J \approx \frac{emkTD(0)\csc(\pi d_0 kT)}{2\pi\hbar^3 d_0}. \quad (1.50)$$

Ο όρος τώρα $d_0 kT$ είναι για συνήθεις θερμοκρασίες πολύ μικρός, οπότε αναπτύσσοντας το \csc σε σειρά Taylor παίρνουμε:

$$J \approx \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \frac{D(0)}{(d_0)^2} \left[1 + \frac{1}{6} (\pi d_0 kT)^2 + O((\pi d_0 kT)^4) \right]. \quad (1.51)$$

Εισάγοντας στην παραπάνω εξίσωση το d_0 από την (1.48) και το $D(0)$ από την (1.43) παίρνουμε την τελική εξίσωση για την πυκνότητα ρεύματος:

$$J = \Theta \frac{e^3}{16\pi^2\hbar} \frac{F^2}{Wt^2(y)} \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} \frac{W^{3/2}}{F} v(y) \right] \quad (1.52)$$

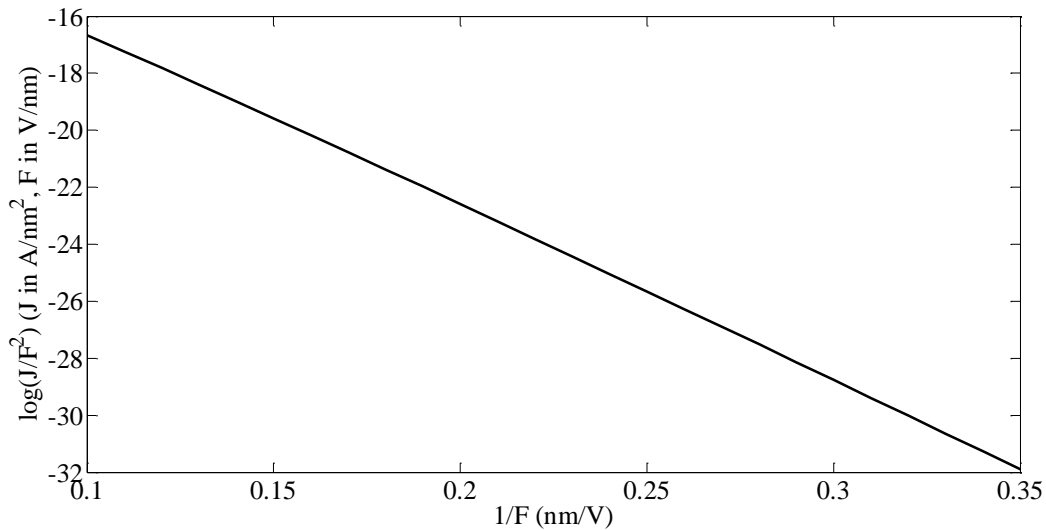
Όπου Θ είναι ο όρος μέσα στην αγκύλη της (1.51) που εισάγει μία μικρή διόρθωση για θερμοκρασία $T > 0$. Η παραπάνω εξίσωση είναι η γνωστή ως τροποποιημένη εξίσωση F-N. Τροποποιημένη θεωρείται, διότι η αρχική δουλειά των F-N δεν λάμβανε υπ' όψιν την εικονική αλληλεπίδραση, οπότε δεν υπήρχαν οι διορθωτικές συναρτήσεις v, t . Ωστόσο, είναι σύνηθες στη βιβλιογραφία η εξίσωση (1.52) να αποκαλείται απλώς εξίσωση F-N καθώς είναι η σύγχρονη εκδοχή της.

Μία τελευταία διόρθωση μένει ακόμα να εισαχθεί. Η αρχική υπόθεση ότι τα ηλεκτρόνια μέσα στο μέταλλο διέπονται από το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων φυσικά δεν μπορεί να ισχύει στην πραγματικότητα. Μέσα στο μέταλλο σχηματίζονται ενεργειακές ζώνες. Τα ηλεκτρόνια της ζώνης σθένους είναι αυτά που δίνουν την εκπομπή. Τα ηλεκτρόνια αυτά συμπεριφέρονται περίπου ως ελεύθερα. Με άλλα λόγια η δομή της ζώνης σθένους διαφέρει λίγο από τη δομή των ελεύθερων ηλεκτρονίων. Ο Μοδινός [35] έχει δείξει ότι η διαφορά αυτή λειτουργεί μόνο πολλαπλασιαστικά στην εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος

από τα W και F . Δηλαδή η εξίσωση F-N πρέπει να πολλαπλασιαστεί με ένα διορθωτικό παράγοντα έτσι ώστε να δώσει σωστά αποτελέσματα. Αυτός ο διορθωτικός παράγοντας δεν μπορεί να προβλεφθεί εύκολα. Εξαρτάται από τη δομή της ζώνης του υλικού, από το εκάστοτε υλικό, από τον προσανατολισμό της διεπιφάνειας με το κενό, από καταστάσεις επιφάνειας (surface states). Ωστόσο ξέρουμε ότι οι τιμές του παράγοντα αυτού κυμαίνονται μεταξύ 0.005 και 10 [36].

1.3.4. Διαγράμματα F-N

Αν τώρα δούμε τη μορφή της εξίσωσης F-N χωρίς τις διορθώσεις ν , t , θα παρατηρήσουμε ότι αν σχεδιάσουμε σε ένα διάγραμμα το $1/F$ και το $\log(J/F^2)$ θα προκύψει ευθεία γραμμή. Ένα τέτοιο διάγραμμα ονομάζεται διάγραμμα F-N. Οι διορθώσεις για το εικονικό δυναμικό λίγο αλλάζουν αυτή τη γραμμική συμπεριφορά. Κάτι τέτοιο φαίνεται στο επόμενο σχήμα όπου σχεδιάζουμε το διάγραμμα F-N όπως προκύπτει από την (1.52) για έναν εκπομπό με $W=4.5\text{eV}$:



Σχήμα 1.6: Διάγραμμα F-N για έναν εκπομπό με $W=4.5\text{eV}$.

Η κλίση του διαγράμματος F-N είναι πολύ σημαντική ποσότητα. Στην περίπτωση του ακριβώς τριγωνικού φράγματος ισούται με $(2/3)gW^{3/2}$ και μπορεί να μας χρησιμεύσει για να βρούμε το έργο εξόδου. Φυσικά, η πειραματικά μετρούμενη ποσότητα είναι η επιβαλλόμενη τάση η οποία σε έναν εκπομπό συνδέεται γραμμικά με το ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια του εκπομπού μέσω του συντελεστή ενίσχυσης (enhancement factor) β , $F=\beta V$. Αν στο διάγραμμα αντί για F βάλουμε V , τότε η κλίση του διαγράμματος είναι $(2/3)gW^{3/2}/\beta$ και αν ξέρουμε το W

μπορούμε να βρούμε το β , που με τη σειρά του μας δίνει πληροφορία για τη γεωμετρία του εκπομπού.

Ωστόσο, οι διορθώσεις t, v επηρεάζουν την κλίση του διαγράμματος. Για το λόγο αυτό έχει εισαχθεί μία τρίτη διορθωτική συνάρτηση η οποία διορθώνει την κλίση του διαγράμματος F-N. Η συνάρτηση αυτή, αν παραγωγίσουμε τον εκθέτη, προκύπτει εύκολα ότι είναι $s(y)=3t(y)/4+v(y)/4$ (αγνοούμε την επίδραση που έχει στην κλίση η μεταβολή του παράγοντα πριν το εκθετικό t^2).

Εν κατακλείδι, να σημειωθεί ότι η εξίσωση F-N περιέγραψε με πολύ μεγάλη επιτυχία την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων για σχεδόν 80 χρόνια. Η εξήγηση του φαινομένου της πεδιακής εκπομπής ήταν μία πολύ μεγάλη επιτυχία της κβαντικής φυσικής, και κυρίως της φυσικής στερεάς κατάστασης που ξεκίνησε να αναπτύσσεται στη δεκαετία του 1920. Η εξίσωση F-N ωστόσο, ξεκινάει από μία υπόθεση η οποία άρχισε να μην ισχύει πάντα στις πραγματικές πειραματικές καταστάσεις από τη δεκαετία του 1990 και μετά. Η υπόθεση αυτή είναι ότι ο εκπομπός είναι επίπεδος ή σχεδόν επίπεδος. Κάτι τέτοιο δεν αποτελεί καλή προσέγγιση όταν η ακτίνα καμπυλότητας του εκπομπού γίνεται συγκρίσιμη με το μήκος που λαμβάνει χώρα το φαινόμενο σήραγγας. Στην επόμενη παράγραφο θα ασχοληθούμε αναλυτικά με το πρόβλημα αυτό και με το πώς έχει επεκταθεί μέχρι σήμερα η θεωρία F-N για μη επίπεδους εκπομπούς.

1.4. Η σύγχρονη θεωρία πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων από αιχμηρούς εκπομπούς

1.4.1. Η ενεργός επιφάνεια εκπομπής σε μη-επίπεδους αγωγούς

Η αρχική υπόθεση της θεωρίας Fowler-Nordheim είναι ότι ο εκπομπός είναι επίπεδος. Κάτι τέτοιο, βέβαια, ήδη από τις αρχές των πειραμάτων πάνω στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων δεν ίσχυε. Η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων απαιτεί πολύ ισχυρά ηλεκτρικά πεδία της τάξης των V/nm, κάτι το οποίο είναι πολύ δύσκολο να επιτευχθεί απλώς εφαρμόζοντας μία τάση. Για το λόγο αυτό, αλλά και για να περιορισθεί η επιφάνεια εκπομπής, χρησιμοποιήθηκαν αιχμηρές ακίδες στις οποίες υπάρχει έντονη ενίσχυση (enhancement) του ηλεκτρικού πεδίου. Κάτι τέτοιο σημαίνει ότι εξ αρχής η υπόθεση του επίπεδου εκπομπού δεν

ίσχυε. Ωστόσο βέβαια, όταν η ακτίνα καμπυλότητας είναι αρκετά μεγάλη (θα δούμε παρακάτω πόσο μεγάλη) τα βασικά χαρακτηριστικά της εξίσωσης F-N παραμένουν ίδια.

Το πρώτο πρόβλημα που εμφανίζεται, όταν έχουμε ένα καμπυλωμένο εκπομπό, είναι ότι το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια του εκπομπού δεν είναι το ίδιο με το μακροσκοπικό V/d (V : επιβαλλόμενη τάση, d : απόσταση ανόδου-καθόδου). Ωστόσο, το πρόβλημα αυτό λύνεται εύκολα εισάγοντας την έννοια του συντελεστή ενίσχυσης (enhancement factor) και φυσικά εισάγοντας στην εξίσωση F-N το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο βV και όχι το μακροσκοπικό V/d . Έχουν υπάρξει επίσης πολλές αναλύσεις για διάφορα γεωμετρικά μοντέλα βάσει των οποίων προβλέπεται ο συντελεστής ενίσχυσης [37].

Το δεύτερο πρόβλημα είναι ο καθορισμός της επιφάνειας εκπομπής. Η εύρεση δηλαδή του μέρους της επιφάνειας του εκπομπού που συνεισφέρει στο ολικό ρεύμα. Υπάρχουν διάφοροι τρόποι για να ορισθεί η επιφάνεια αυτή. Σε κάποιες περιπτώσεις ορίζεται ως η επιφάνεια με την οποία πρέπει να πολλαπλασιάσουμε τη μέγιστη πυκνότητα ρεύματος για να βρούμε το ολικό ρεύμα, δηλαδή $A_{\text{eff}}=I/J_{\text{max}}$. Σε άλλες περιπτώσεις ορίζεται η επιφάνεια από την οποία προέρχεται το 99% του συνολικού ρεύματος, ενώ σε άλλες ως η επιφάνεια στην οποία η πυκνότητα ρεύματος είναι μεγαλύτερη από $J_{\text{max}}/2$. Όλοι οι ορισμοί είναι δόκιμοι. Εδώ θα χρησιμοποιηθούν ο πρώτος και ο τρίτος επειδή δίνουν μια πιο διαισθητικά καλή αντίληψη του εύρους της δέσμης και οι τιμές τους είναι πολύ κοντά η μία με την άλλη.

Αν βρεθεί η ενεργός επιφάνεια, μπορεί να βρεθεί και το άνοιγμα της δέσμης το οποίο είναι πολύ σημαντικό για τις περισσότερες εφαρμογές. Για να βρεθεί, βέβαια, αυτή η επιφάνεια πρέπει πρωτίστως να βρεθεί η κατανομή της πυκνότητας ρεύματος γύρω από τον εκπομπό, και για να γίνει αυτό πρέπει να βρεθεί η κατανομή του ηλεκτροστατικού δυναμικού και κυρίως του πεδίου στην επιφάνειά του. Για να γίνει κάτι τέτοιο, είναι απαραίτητοι λεπτομερείς ηλεκτροστατικοί υπολογισμοί, και κάποιο γεωμετρικό μοντέλο πρέπει να ληφθεί για τον εκπομπό.

Η πρώτη προσέγγιση που μπορεί να κάνει κάποιος είναι να θεωρήσει ότι η εκπομπή προέρχεται από απειροστά επιφανειακά τμήματα dS για τα οποία η εκπομπή θεωρείται επίπεδη. Για να είναι μια τέτοια προσέγγιση σωστή, πρέπει η καμπύλωση στο τμήμα dS να είναι αμελητέα. Για να ισχύσει κάτι τέτοιο θα πρέπει η ακτίνα καμπυλότητας R του εκπομπού να είναι πολύ μεγαλύτερη από το χαρακτηριστικό μήκος L στο οποίο λαμβάνει χώρα το φαινόμενο σήραγγας, δηλαδή το μήκος της απαγορευμένης περιοχής. Το μήκος αυτό για να υπάρχει πεδριακή εκπομπή ηλεκτρονίων είναι της τάξης των 0.5-2nm. Για να ισχύει $R \gg L$ θα

λέγαμε ότι ο εκπομπός πρέπει να έχει ακτίνα $R > 50\text{nm}$. Κάτι τέτοιο ίσχυε πράγματι για εκπομπούς που χρησιμοποιούνταν μέχρι τη δεκαετία του 1990.

Υπό τις προϋποθέσεις αυτές, μπορούμε να βρούμε την κατανομή της πυκνότητας ρεύματος γύρω από τον αγωγό. Αν βρούμε με χρήση κάποιου ηλεκτροστατικού μοντέλου την κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια του εκπομπού, μπορούμε να βρούμε την πυκνότητα ρεύματος απλώς εισάγοντας το τοπικό πεδίο του κάθε σημείου στην εξίσωση F-N. Αυτό κάνουν οι Dyke κ.α. [38] χρησιμοποιώντας το μοντέλο μίας σφαίρας που βρίσκεται στην κορυφή ενός κώνου. Βρήκαν ένα άνοιγμα δέσμης (παίρνουμε ως άνοιγμα της δέσμης το εύρος στο οποίο η πυκνότητα ρεύματος γίνεται μισή από το μέγιστό της) μεταξύ 30° - 45° ανάλογα με το επιβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο για πεδία μεταξύ 3-7 V/nm. Όπως επιβεβαιώνουμε με υπολογισμούς στα κεφάλαια 3-5 το άνοιγμα της δέσμης αυξάνει, όταν αυξάνει η επιβαλλόμενη τάση.

Μία άλλη εργασία που χρησιμοποιεί την ίδια προσέγγιση είναι αυτή των Zuber κ.α. [39], στην οποία χρησιμοποιείται το υπερβολοειδές μοντέλο για τη γεωμετρία του εκπομπού. Τα αποτελέσματά τους δίνουν άνοιγμα δέσμης μεταξύ 20° - 30° πάλι, ανάλογα με την επιβαλλόμενη τάση.

1.4.2. Ακαταλληλότητα της εξίσωσης F-N για νανομετρικά αιχμηρούς εκπομπούς

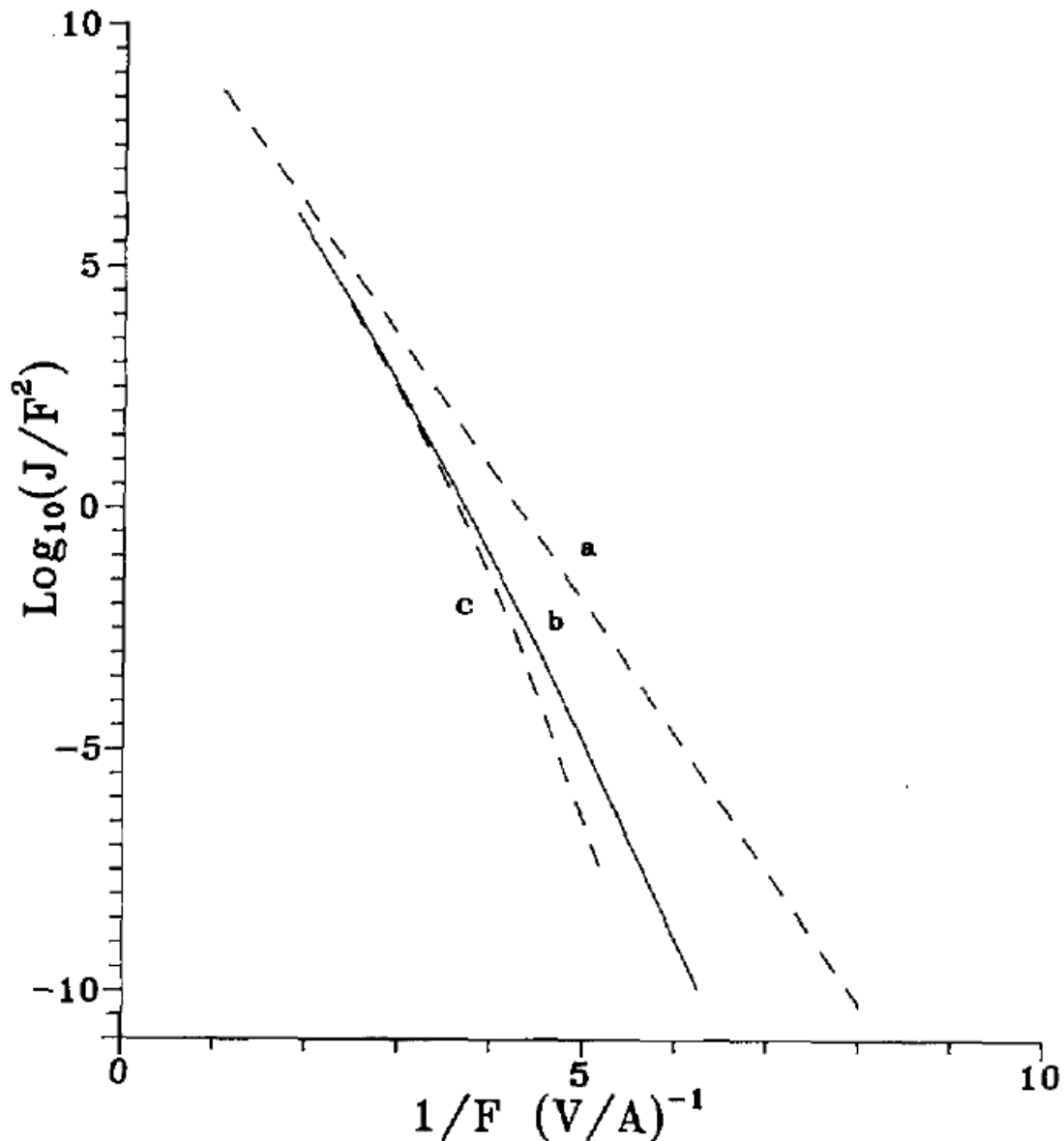
Οι τροποποιήσεις του συντελεστή ενίσχυσης και της ενεργού επιφάνειας έδιναν πολύ αξιόπιστα αποτελέσματα, όσο τα βασικά χαρακτηριστικά της πεδιακής εκπομπής παρέμεναν ίδια με το επίπεδο μοντέλο. Όσο δηλαδή ίσχυε $R \gg L$. Ωστόσο, από τη δεκαετία του 1990 και μετά κατασκευάζονται εκπομποί που έχουν ακτίνες καμπυλότητας πολύ κάτω από τα 50nm, συγκρίσιμες με το μήκος $L \sim 0.5$ - 2nm . Όταν ισχύει το $R \gg L$, το ηλεκτροστατικό δυναμικό εντός των ορίων της απαγορευμένης περιοχής είναι κατά άριστη προσέγγιση γραμμικό όπως αυτό που φαίνεται στο σχήμα 1.4. Κάτι τέτοιο όμως παύει να ισχύει σε χαμηλότερες ακτίνες καμπυλότητας. Φορμαλιστική απόδειξη για αυτό δίνεται στο κεφάλαιο 5. Όταν συμβαίνει αυτό, το ηλεκτροστατικό δυναμικό του σχήματος 1.4 καμπυλώνεται προς τα πάνω εντός ορίων της απαγορευμένης περιοχής, με αποτέλεσμα η έκφραση για το συντελεστή διέλευσης όπως υπολογίζεται από την προσέγγιση JWKB να διαφέρει αισθητά από την έκφραση (1.43). Κάτι τέτοιο βέβαια, έχει σοβαρή επίδραση και στο εκπεμπόμενο ρεύμα, ενώ τα διαγράμματα F-N παύουν να είναι ευθείες γραμμές.

Η πρώτη προσπάθεια που έγινε, για να αναδειχθούν τα προβλήματα της θεωρίας F-N όταν ο εκπομπός είναι πολύ αιχμηρός, ήταν από τους Cutler κ.α. [40, 41, 42]. Λαμβάνοντας υπερβολοειδές μοντέλο για τον εκπομπό υπολόγισαν την κατανομή του ηλεκτροστατικού δυναμικού πάνω στον άξονα συμμετρίας του εκπομπού από όπου προέρχεται το μέγιστο ρεύμα. Επίσης χρησιμοποίησαν το υπερβολοειδές μοντέλο για να υπολογίσουν το εικονικό δυναμικό. Δεδομένου του φράγματος δυναμικού υπολόγισαν το συντελεστή διέλευσης ολοκληρώνοντας αριθμητικά πάνω στον άξονα, βάσει της μονοδιάστατης μεθόδου JWKB. Στη συνέχεια, εισήγαγαν το συντελεστή διέλευσης στην (1.50) και βρήκαν την πυκνότητα ρεύματος εκπομπής συναρτήσει των διαφόρων παραμέτρων του προβλήματος.

Επίσης, ήταν οι πρώτοι που ανέπτυξαν το ηλεκτροστατικό δυναμικό σε πολυώνυμο Taylor και βρήκαν ότι ο τετραγωνικός όρος είναι αντιστρόφως ανάλογος της ακτίνας καμπυλότητας R για το υπερβολοειδές μοντέλο. Στο κεφάλαιο 5 θα αποδείξουμε ότι αυτό είναι γενική ιδιότητα που προκύπτει για οποιαδήποτε γεωμετρία από την εξίσωση Laplace. Χρησιμοποιώντας αυτή την ανάπτυξη υπολόγισαν και αναλυτικά το ολοκλήρωμα JWKB. Ωστόσο ο υπολογισμός αυτός είναι εξαιρετικά πολύπλοκος, καθώς περιλαμβάνει πολύπλοκα ελλειπτικά ολοκληρώματα, κάτι που τον κάνει πρακτικά αδύνατο να χρησιμοποιηθεί.

Αυτό που έχει εξαιρετικό ενδιαφέρον και δίνει σημαντικές ποιοτικές αλλά και ποσοτικές πληροφορίες για την επίδραση της καμπύλωσης του εκπομπού είναι τα αποτελέσματά τους για την πυκνότητα ρεύματος και την εξάρτησή της από το τοπικό πεδίο F . Στο σχήμα 1.7 (αντιγραφή από το [42]) δείχνουμε τα αποτελέσματα αυτά.

Η πρώτη παρατήρηση είναι ότι, όταν έχουμε καμπυλωμένο εκπομπό το διάγραμμα F-N δεν είναι πια ευθύ, αλλά παρουσιάζει μία έντονη προς τα κάτω καμπυλότητα. Για πολύ μεγάλα πεδία τείνει ασυμπτωτικά στο κλασικό διάγραμμα F-N. Αυτό σημαίνει ότι για χαμηλά πεδία η εξίσωση F-N προβλέπει μερικές τάξεις μεγέθους μικρότερη πυκνότητα ρεύματος, καθώς επίσης και αρκετά μικρότερη κλίση στο διάγραμμα F-N. Συνεπώς η χρήση της μπορεί να οδηγήσει σε σοβαρά λάθη.



Σχήμα 1.7: [42] Διάγραμμα F-N που δίνει την εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος J από το ηλεκτρικό πεδίο F στην επιφάνεια του αγωγού όπως υπολογίζεται (a) από την εξίσωση F-N, (b) αριθμητικά από το υπερβολοειδές μοντέλο και (c) χρησιμοποιώντας επίπεδο εικονικό δυναμικό και ανάπτυξη 2^{ου} βαθμού για το ηλεκτροστατικό δυναμικό. Η ακτίνα καμπυλότητας του υπερβολοειδούς είναι $R=10\text{nm}$. Το έργο εξόδου είναι $W=4.5\text{eV}$.

Η δεύτερη παρατήρηση είναι ότι, αφού για υψηλά πεδία οι καμπύλες (c) και (b) ταυτίζονται, η χρήση του μη-επίπεδου μοντέλου για το εικονικό δυναμικό δεν επιφέρει παρατηρήσιμη μεταβολή στα αποτελέσματα. Το εικονικό δυναμικό είναι σημαντικό στις μικρές αποστάσεις από τον εκπομπό και συνεπώς η επίδρασή του γίνεται εντονότερη σε υψηλά πεδία. Και αφού στα υψηλά πεδία οι καμπύλες ταυτίζονται, η επίδραση της καμπυλότητας στο εικονικό δυναμικό είναι αμελητέα. Πράγματι, υπολογισμοί του γράφοντος έχουν δείξει ότι, για

να έχει σημαντική επίδραση στο εικονικό δυναμικό οποιασδήποτε μορφής καμπυλότητα του εκπομπού, θα πρέπει η ακτίνα καμπυλότητας να είναι $R < 1-2\text{nm}$.

Τέλος παρατηρούμε ότι η δεύτερης τάξης προσέγγιση του ηλεκτροστατικού δυναμικού είναι πολύ καλή προσέγγιση, αφού βλέπουμε ότι η καμπύλη (c) είναι πολύ κοντά στην (b). Μικρές αποκλίσεις εμφανίζονται σε πολύ μικρά πεδία $F < 3\text{V/nm}$ τα οποία είναι πολύ σπάνια σε πειραματικές διατάξεις, αφού δίνουν πολύ μικρά (σχεδόν μη μετρήσιμα) ρεύματα. Το γεγονός ότι η παραπάνω προσέγγιση είναι πολύ καλή μας δίνει το έναυσμα να γενικεύσουμε και να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση αυτή για τη γενίκευση της θεωρίας F-N στο κεφάλαιο 5.

Παρόμοια αποτελέσματα βρήκαν 4 χρόνια αργότερα οι Fursey και Glazanov [43] χρησιμοποιώντας ένα πολύ απλό μοντέλο καμπυλωμένου εκπομπού για το ηλεκτροστατικό δυναμικό, αυτό της απομονωμένης σφαίρας. Επιλύοντας πλήρως αριθμητικά την εξίσωση Schroedinger και χωρίς χρήση JWKB καταλήγουν σε αποτελέσματα πολύ παρόμοια με αυτά των Cutler κ.α. που παρουσιάσαμε παραπάνω.

1.4.3. Θεωρία F-N για σφαιρικές επιφάνειες

Αφού τη δεκαετία του 1990 δείχθηκε και καθιερώθηκε η αδυναμία της θεωρίας F-N να προβλέψει με ακρίβεια τα χαρακτηριστικά της εκπομπής από αιχμηρούς εκπομπούς με ακτίνες καμπυλότητας κάτω από 50nm, το 2005 ο Edgcombe [44] ανέπτυξε την επέκταση της θεωρίας F-N για σφαιρικούς αγωγούς, και βρήκε τη διαφοροποίηση στην εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος στον άξονα. Επίσης, εφαρμόζοντας μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB (και όχι την εξίσωση F-N όπως στις εργασίες που παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 1.4.2) για κάθε επίπεδο κομμάτι dS βρήκε εκφράσεις για την ενεργό επιφάνεια και το αντίστοιχο άνοιγμα της ηλεκτρονικής δέσμης. Στη συνέχεια την χρησιμοποίησε για να εξάγει παραμέτρους από πειραματικά δεδομένα [45, 46]. Ας δούμε εν συντομία τη μέθοδο και τα αποτελέσματά του.

Αρχικά, πρέπει να ληφθεί ένα μοντέλο για τη μορφή του φράγματος δυναμικού. Για το ηλεκτροστατικό δυναμικό χρησιμοποιείται το μοντέλο της σφαίρας πάνω σε κώνο όπως και οι Dyke κ.α. [38]. Για το εικονικό δυναμικό γύρω από μία σφαιρική επιφάνεια, η λύση είναι αρκετά απλή. Το τελικό φράγμα δυναμικού που προκύπτει για το σφαιρικό αγωγό δίνεται από τη σχέση:

$$U(r, \theta) = W - \frac{eFRP_\nu(\cos\theta)}{2\nu+1} \left[\left(\frac{r}{R} \right)^\nu - \left(\frac{r}{R} \right)^{-\nu-1} \right] - \frac{2b}{R} \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - 1 \right]^{-1} - E. \quad (1.53)$$

Στην παραπάνω σχέση, P_ν είναι η συνάρτηση Legendre πρώτου είδους, (r, θ) είναι οι σφαιρικές συντεταγμένες με αρχή το κέντρο της σφαίρας-κορυφή του κώνου, και ν είναι ένας αριθμός μεταξύ 0 και 1, ο οποίος εξαρτάται από το άνοιγμα του κώνου και δίνεται από την επίλυση της εξίσωσης $P_\nu(\cos(\pi-\omega))=0$, όπου ω η πλήρης γωνία ανοίγματος του κώνου. Η σταθερά b είναι η ίδια που ορίστηκε στην παράγραφο 1.3.1.

Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα ανηγμένες αδιάστατες μεταβλητές: $\chi(\theta)=(W-E)(2\nu+1)/eFRP_\nu(\cos\theta)$, $\kappa=4b/(W-E)R$, $\rho=r/R$. Το φράγμα δυναμικού μπορεί να γραφτεί με χρήση των ανηγμένων μεταβλητών:

$$U(r, \theta) = (W - E) \left[1 - \frac{1}{\chi(\theta)(2\nu+1)} [\rho^\nu - \rho^{-\nu-1}] - \frac{\kappa}{2} [(\rho)^2 - 1]^{-1} \right] \quad (1.54)$$

Αν τώρα εισάγουμε αυτό το φράγμα δυναμικού στην έκφραση που δίνει η προσέγγιση JWKB για τον εκθέτη Gamow παίρνουμε:

$$G = \frac{2}{3} gR(W - E)^{1/2} \int_{\rho_1}^{\rho_2} \left[1 - \frac{1}{\chi(\theta)(2\nu+1)} [\rho^\nu - \rho^{-\nu-1}] - \frac{\kappa}{2} [(\rho)^2 - 1]^{-1} \right]^{1/2} d\rho. \quad (1.55)$$

Τα όρια $\rho_{1,2}$ και πάλι είναι τα σημεία που μηδενίζεται η υπόριζη ποσότητα. Αν ονομάσουμε $f(\chi, \kappa)$ το ολοκλήρωμα, τότε μπορούμε εύκολα να δούμε ότι η ποσότητα f/χ μπορεί να θεωρηθεί η διόρθωση σε σχέση με το ακριβώς τριγωνικό φράγμα δυναμικού, αντίστοιχη της συνάρτησης $\nu(y)$ που εισήχθη για το εικονικό δυναμικό. Το ολοκλήρωμα στην (1.55) είναι αδύνατον να υπολογιστεί αναλυτικά. Ο Edgcombe το υπολόγισε αριθμητικά. Ωστόσο η διόρθωση αυτή είναι συνάρτηση 2 μεταβλητών, και συνεπώς είναι πρακτικώς αδύνατον να δοθεί σε μορφή πίνακα. Παρόλα αυτά δίνονται κάποιες προσεγγίσεις που προκύπτουν από την προσαρμογή πολυωνύμων στις τιμές της f που υπολογίζονται αριθμητικά.

Η πυκνότητα ρεύματος μπορεί να δοθεί τώρα συναρτήσει του εκθέτη Gamow βάσει της εξίσωσης (1.51). Τελικά παίρνουμε:

$$J = \Theta \frac{e}{16\pi^2 \hbar} \frac{1}{R^2 \chi^2 w^2(\chi, \kappa)} \exp \left[-\frac{2}{3} gRW^{1/2} f(\chi, \kappa) \right] \quad (1.56)$$

όπου $w(\chi, \kappa)$ η συνάρτηση διόρθωσης για τον παράγοντα πριν τον εκθετικό, αντίστοιχη με την $t(y)$ για το επίπεδο εικονικό δυναμικό. Η συνάρτηση w δίνεται εύκολα συναρτήσει της f από τη σχέση:

$$w(\chi, \kappa) = \frac{2}{3} \frac{\sqrt{W}}{\chi} \frac{\partial(f\sqrt{W})}{\partial W} \quad (1.57)$$

Βρέθηκε, λοιπόν, η εξάρτηση που έχει η πυκνότητα ρεύματος συναρτήσει των τριών παραμέτρων του προβλήματος W, F, R , αν και οι δύο αδιάστατες παράμετροι χ, κ επαρκούν για να προσδιορίσουν πλήρως την πυκνότητα ρεύματος. Η εξίσωση (1.56) εφαρμόζεται για κάθε γωνία και δίνει το ακτινικό ρεύμα σε κάθε κατεύθυνση με γωνία θ ως προς τον άξονα, αρκεί να εισάγουμε την παράμετρο $\chi(\theta)$ που αντιστοιχεί στην κατεύθυνση αυτή. Η χ είναι και η μόνη παράμετρος που εξαρτάται από τη γωνία.

Για να βρούμε το ολικό ρεύμα δεν έχουμε παρά να ολοκληρώσουμε την πυκνότητα ρεύματος πάνω στην εκπέμπουσα επιφάνεια. Το επιφανειακό αυτό ολοκλήρωμα είναι:

$$I = 2\pi R^2 \int_0^\pi J(\theta) \sin \theta d\theta = \Omega R^2 J(0) \quad (1.58)$$

όπου Ω ορίζεται η ενεργός στερεά γωνία και $A_{eff} = \Omega R^2$ η αντίστοιχη ενεργός επιφάνεια (effective area) οριζόμενη ως η επιφάνεια με την οποία πρέπει να πολλαπλασιάσω τη μέγιστη πυκνότητα ρεύματος $J(0)$ για να πάρω το ολικό ρεύμα.

Δεν μένει, τώρα, παρά να εισάγουμε την πυκνότητα ρεύματος από την έκφραση (1.56) στην (1.58) για να βρούμε τη στερεά γωνία Ω και το αντίστοιχο ολικό ρεύμα I . Αν κάνουμε κάτι τέτοιο, το ολοκλήρωμα δεν επιλύεται αναλυτικά. Στην περίπτωση που η γεωμετρική παράμετρος είναι $\nu=0.47$, η γωνιακή εξάρτηση μπορεί να προσεγγισθεί $P_\nu(\cos\theta) \approx \cos(\theta/2)$ ενώ για κάποια μεγαλύτερη τιμή του ν η εξάρτηση αυτή μπορεί να προσεγγισθεί με $P_\nu(\cos\theta) \approx \cos(\theta)$. Στις περιπτώσεις αυτές το ολοκλήρωμα μπορεί να υπολογισθεί αναλυτικά και η ενεργός στερεά γωνία προσεγγίζεται από τις απλές σχέσεις:

$$\Omega \approx \frac{8\pi}{5+Z} \text{ για } P_\nu(\cos\theta) \approx \cos(\theta/2), \Omega \approx \frac{2\pi}{4+Z} \text{ για } P_\nu(\cos\theta) \approx \cos(\theta) \quad (1.59)$$

$$\text{όπου } Z = \left[\chi \frac{\partial G}{\partial \chi} \right]_{(\theta=0)}$$

Στη γενική περίπτωση για το ν , όπου καμία από τις παραπάνω περιπτώσεις δεν ισχύει, η γωνιακή εξάρτηση προσεγγίζεται από ένα πολυώνυμο Taylor 2^{ου} βαθμού στο θ :

$$P_\nu(\cos\theta) \approx 1 - \nu(\nu+1)\theta^2/4 = 1 - c_0(\nu)\theta^2 \quad (1.60)$$

Αναπτύσσοντας τις συναρτήσεις f, w σε πολυώνυμο Taylor πρώτου βαθμού και με χρήση της ανάπτυξης (1.60) βρίσκουμε τη γενική εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος από τη γωνία:

$$J = \Theta \frac{e}{16\pi^2 \hbar} \frac{F^2 (1 - c_0 \theta^2)^2}{W w^2(\chi(0), \kappa)} \exp \left[-\frac{2}{3} g R W^{1/2} \left(f(\chi(0), \kappa) + c_0 \theta^2 \frac{\partial f}{\partial \chi} \Big|_{\theta=0} \right) \right]. \quad (1.61)$$

Η ενεργός στερεά γωνία παίρνει την τελική έκφραση:

$$\Omega = 2\pi \int_0^\pi (1 - c_0 \theta^2)^2 \sin \theta \exp(-\gamma \theta^2) d\theta \quad (1.62)$$

με

$$\gamma = \frac{2}{3} g R W^{1/2} c_0 \frac{\partial f}{\partial \chi} \Big|_{\theta=0}. \quad (1.63)$$

Το παραπάνω υπολογίζεται συναρτήσσει του γ αναπτύσσοντας τον παράγοντα πριν το εκθετικό σε δυνάμεις του θ μέχρι 7^{ης} τάξης. Οι τιμές του δίνονται σε διάγραμμα, το οποίο προσεγγίζεται με ένα πολυώνυμο στο $1/\gamma$:

$$\Omega \approx 3.13\gamma^{-1} - 1.39\gamma^{-2} + 0.34\gamma^{-3} - 0.034\gamma^{-4} \quad (1.64)$$

Εν κατακλείδι, η θεωρία του Edgcombe για σφαιρικούς εκπομπούς που παρουσιάστηκε στην παράγραφο αυτή, γενικεύει τη θεωρία F-N για σφαιρικούς εκπομπούς. Η θεωρία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εξαχθεί η ακτίνα καμπυλότητας από δεδομένα I-V. Ωστόσο η μέθοδος που παρουσιάζεται στο [46] είναι αρκετά πολύπλοκη. Επίσης η εφαρμογή της μεθόδου απαιτεί εν γένει τον αριθμητικό υπολογισμό της συνάρτησης f , αν και δίνονται κάποιες πολυωνυμικές προσεγγίσεις της. Τέλος, η θεωρία αυτή μας δίνει μια εκτίμηση για το ενεργό άνοιγμα της δέσμης που παράγεται, ωστόσο λόγω του ότι χρησιμοποιεί μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB και θεωρεί ότι σε κάθε επιφάνεια dS το πρόβλημα είναι μονοδιάστατο, όταν πάει κανείς να προβλέψει το άνοιγμα της δέσμης από έναν νανομετρικής κλίμακας εκπομπό με βάση τη μέθοδο αυτή, πιθανότατα θα οδηγηθεί σε λάθος συμπεράσματα.

Κεφάλαιο 2: Εφαρμογές της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων με έμφαση στην ηλεκτρονική μικροσκοπία εγγύς πεδίου

2.1. Εισαγωγή-γενικά στοιχεία

Υπάρχει στη σύγχρονη εποχή πλειάδα τεχνολογικών εφαρμογών, για τις οποίες είναι απαραίτητη η ύπαρξη μίας δέσμης ηλεκτρονίων. Δύο μέθοδοι είναι γνωστές για την εκπομπή ηλεκτρονίων και τη δημιουργία δέσμης. Ο ένας είναι η θερμιονική εκπομπή και ο άλλος είναι η εκπομπή πεδίου. Υπάρχει, βέβαια, και το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, αλλά δεν προσφέρει κανένα πλεονέκτημα. Την τελευταία δεκαετία έχει προστεθεί και η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων με τη βοήθεια laser, η οποία είναι ένα εξαιρετικά ενδιαφέρον φαινόμενο με πολλά υποσχόμενες τεχνολογικές εφαρμογές. Η εκπομπή πεδίου έχει σημαντικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τη θερμιονική εκπομπή και για το λόγο αυτό χρησιμοποιείται στις περισσότερες σύγχρονες εφαρμογές που απαιτούν ηλεκτρονική δέσμη.

Τα κύρια πλεονεκτήματα μιας ηλεκτρονικής δέσμης που παράγεται με πεδιακή εκπομπή και όχι θερμιονική είναι τρία. Πρώτον, η πηγή είναι μικρή σε μέγεθος, δηλαδή το αρχικό σημείο από το οποίο προέρχεται η δέσμη είναι μία αιχμηρή ακίδα ακτίνας καμπυλότητας από 1μm μέχρι 1nm. Αντίθετα, στη θερμιονική εκπομπή είναι ολόκληρο θερμαινόμενο σύρμα μεγέθους τουλάχιστον μερικών χιλιοστών, το οποίο εκπέμπει ηλεκτρόνια σε όλο το γύρω χώρο δίνοντας αρχικό άνοιγμα δέσμης της τάξης των χιλιοστών. Δεύτερον, η δέσμη από πεδιακή εκπομπή έχει πολύ μεγαλύτερη φωτεινότητα (brightness). Αυτό σημαίνει ότι είναι πολύ πιο συγκεντρωμένη γύρω από τον άξονά της, και τα ηλεκτρόνια έχουν μικρότερη διασπορά σε θέση και ορμή. Τέλος, το ενεργειακό φάσμα των ηλεκτρονίων είναι πολύ πιο στενό. Στην πεδιακή εκπομπή τα ηλεκτρόνια προέρχονται από μία στενή περιοχή γύρω από τη στάθμη Fermi, ενώ στην θερμιονική εκπομπή η θερμική ενέργεια kT πρέπει να γίνει συγκρίσιμη με το έργο εξόδου, κάτι που σημαίνει ότι η κατανομή Fermi-Dirac έχει «απλώσει» αναλόγως δίνοντας πολύ μεγάλο εύρος ενεργειών.

Τα παραπάνω πλεονεκτήματα κάνουν τις πηγές ηλεκτρονίων (αποκαλούμενες συχνά και «πυροβόλα» ηλεκτρονίων- electron guns) από πεδιακή εκπομπή εξαιρετικά χρήσιμες σε εφαρμογές, όπως η κάθε είδους ηλεκτρονική μικροσκοπία και η λιθογραφία ηλεκτρονικής δέσμης. Ωστόσο πρέπει να επισημάνουμε και ένα σημαντικό μειονέκτημα που έχει η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων: τη μικρή χρονική αντοχή. Όταν οι συνθήκες κενού δεν είναι αρκετά ικανοποιητικές, στον εκπομπό σύντομα επικάθονται αέρια δημιουργώντας ένα στρώμα στην επιφάνειά του που εμποδίζει την εκπομπή. Το πρόβλημα αυτό επιλύεται με συχνή ανόπτηση του εκπομπού και πολύ υψηλού επιπέδου κενό, ωστόσο αυτή η απαίτηση πολλές φορές δυσχεραίνει τη χρήση της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων στις εφαρμογές. Στη θερμοϊονική εκπομπή δεν υπάρχει τέτοιο πρόβλημα, καθώς ο εκπομπός λειτουργεί σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες και συνεπώς υποβάλλεται συνεχώς σε ενός είδους ανόπτηση.

Στη σύγχρονη εποχή, εκτός από τη χρήση της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων σαν αντικαταστάτρια της θερμοϊονικής εκπομπής σε πυροβόλα ηλεκτρονίων, αρχίζουν να αναπτύσσονται πολλές εφαρμογές βασιζόμενες σε συστοιχίες πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων (Field Emission Arrays – FEA). Οι FEA δεν είναι τίποτα άλλο από συστοιχίες αιχμηρών αγώγιμων στοιχείων που λειτουργούν ως εκπομποί. Οι πρώτες FEA κατασκευάστηκαν από τον Spindt [47] αναπτύσσοντας ακίδες Mo σε υπόστρωμα Si χρησιμοποιώντας την ήδη ανεπτυγμένη μικροηλεκτρονική τεχνολογία Si. Από τότε και μετά έχει υπάρξει μεγάλο ενδιαφέρον για την περαιτέρω ανάπτυξη των FEA, ειδικότερα με την εισαγωγή των νανοσωλήνων άνθρακα (Carbon NanoTubes – CNT) [48] ως καθόδους, αλλά και την ανάπτυξη ημιαγώγιμων στηλών (pillars) [49].

Οι FEA έχουν προταθεί ως εξαιρετικές πηγές δέσμης ηλεκτρονίων υψηλού ρεύματος και φωτεινότητας για πλειάδα εφαρμογών. Η κύρια εφαρμογή που έχει προταθεί είναι αυτή των οθονών πεδιακής εκπομπής (Field Emission Displays) [50]. Ωστόσο, η εφαρμογή αυτή δεν έχει περάσει ακόμα σε στάδιο παραγωγής για λόγους που είναι περισσότερο οικονομικής φύσεως. Άλλες εφαρμογές που έχουν προταθεί είναι η παραγωγή μικροκυμάτων και ακτίνων X. Μία πολλά υποσχόμενη εφαρμογή που αναπτύχθηκε πρόσφατα είναι η λιθογραφία (ή ηλεκτρονική μικροσκοπία) πολλαπλής ηλεκτρονικής δέσμης [51] στην οποία παράγονται ταυτόχρονα πολλές ηλεκτρονικές δέσμες που μπορούν να χρησιμοποιηθούν ταυτόχρονα κατά εκατοντάδες, επιταχύνοντας τη διαδικασία της λιθογραφίας ή της σάρωσης.

Κύριο θέμα της διατριβής αυτής αποτελεί η ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης εγγύς πεδίου, τη διάταξη και τη λειτουργία της οποίας θα δούμε στην ενότητα 2.3. Πριν όμως

περάσουμε εκεί, θα αναλύσουμε στην επόμενη ενότητα την ηλεκτρονική μικροσκοπία στις κλασικές μορφές της, ως κάποιες από τις σημαντικότερες εφαρμογές της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων.

2.2. Ηλεκτρονική μικροσκοπία

2.2.1. Μικροσκόπιο πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων (Field Emission Microscope-FEM)

Η αρχική πειραματική δουλειά πάνω στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων πριν από την ανάπτυξη της θεωρίας Fowler-Nordheim (κυρίως από τον Lilienfeld [5]), είχε ως βασικό κίνητρο την ανάπτυξη μικρών σε μέγεθος και αποδοτικών πηγών ακτίνων X για ιατρικούς σκοπούς. Ωστόσο, η τεχνολογία της εποχής δεν μπορούσε να υποστηρίξει μία τέτοια προσπάθεια.

Η πρώτη εφαρμογή που στηρίχτηκε στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων αφορούσε την ανάλυση της δέσμης αυτής καθ' αυτής, η οποία μας έδινε πληροφορίες για την εκπέμπουσα επιφάνεια. Το όργανο που αναπτύχθηκε έχει ονομαστεί μικροσκόπιο πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων (Field Emission Microscope-FEM). Η ανάπτυξή του έγινε από τον Erwin Mueller το 1937 [52] και αποτέλεσε την πρώτη τεχνική απεικόνισης επιφανειών, κάτι το οποίο έδωσε μεγάλη ώθηση στην ανάπτυξη της επιστήμης των επιφανειών (surface science) η οποία έκανε τότε τα πρώτα της βήματα.

Το FEM είναι μία πολύ απλή διάταξη. Ένας εκπομπός με ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή του R -της τάξης μερικών δεκάτων του μm - τοποθετείται σε απόσταση d από την άνοδο η οποία καλύπτεται από μία φθορίζουσα ουσία και χρησιμοποιείται ως οθόνη. Στην οθόνη προσπίπτουν τα εκπεμπόμενα από την κάθοδο ηλεκτρόνια, και η φωτεινότητα της οθόνης σε κάθε σημείο είναι ανάλογη με την προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος. Με τον τρόπο αυτό στην οθόνη απεικονίζεται η κατανομή του ρεύματος πεδιακής εκπομπής που ξεκινά από την κάθοδο. Επειδή η δέσμη ανοίγει προς την άνοδο (περίπου d/R φορές) κάθε απόσταση από την εκπέμπουσα κάθοδο προβάλλεται σε πολύ μεγαλύτερη απόσταση στην άνοδο. Συνεπώς το FEM έχει πολύ μεγάλη δυνατότητα μεγέθυνσης της εικόνας (έως και 10^6 φορές).

Η εικόνα της χωρικής κατανομής της πυκνότητας ρεύματος στον εκπομπό φέρει σημαντικές πληροφορίες για την μορφή της επιφάνειας εκπομπής. Όταν η επιφάνεια εκπομπής είναι καθαρή, τα φωτεινά σημεία υποδεικνύουν ένα χαμηλό έργο εξόδου ή ένα ισχυρό τοπικό ηλεκτρικό πεδίο. Οι διακυμάνσεις στο έργο εξόδου υποδεικνύουν διαφορετικούς προσανατολισμούς επιφανειών (δείκτες Miller). Διακυμάνσεις στο ηλεκτρικό πεδίο υποδεικνύουν την ύπαρξη κάποιων μορφολογικών στοιχείων όπως αιχμηρές προεξοχές που προκαλούν τοπική ενίσχυση του πεδίου.

Αν ο εκπομπός δεν είναι καθαρός, μπορούν να εξαχθούν πληροφορίες για τα σημεία στα οποία έχει «λερωθεί» (contaminated). Τα σημεία της επιφάνειάς του, στα οποία έχουν προστεθεί ακαθαρσίες από το περιβάλλον το οποίο δεν μπορεί να είναι το τέλειο κενό, αντιστοιχούν σε σκοτεινά σημεία στην οθόνη καθώς οι «ακαθαρσίες» (contaminants) δημιουργούν ένα λεπτό στρώμα το οποίο εμποδίζει το φαινόμενο σήραγγας και μειώνει την πυκνότητα ρεύματος. Για πολλά χρόνια μάλιστα, η ανάλυση της καθαρότητας των εκπομπών ήταν μία από τις κύριες χρήσεις του FEM.

Τέλος, θα πρέπει να αναφέρουμε ότι τα ηλεκτρόνια που προέρχονται από εκπομπή ηλεκτρονίων φέρουν και μία άλλη χρήσιμη πληροφορία για την προέλευσή τους. Αυτή είναι η ενεργειακή κατανομή τους ή αλλιώς το φάσμα τους. Οι πρώτες ενεργειακές αναλύσεις της δέσμης ηλεκτρονίων από FEM έγιναν το 1939 [53]. Από τότε και μετά άνησε αυτό που σήμερα ονομάζουμε ηλεκτρονική φασματοσκοπία (electron spectroscopy), η οποία μπορεί να μας δώσει πάρα πολλές πληροφορίες για τη δομή από την οποία προέρχονται τα ηλεκτρόνια. Για παράδειγμα η λεπτομερής ενεργειακή ανάλυση ηλεκτρονίων που προέρχονται από FEM μπορεί να δώσει σημαντικές πληροφορίες για τις καταστάσεις επιφανείας [54].

2.2.2. Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διάδοσης (Transmission Electron Microscope – TEM)

Το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διάδοσης (Transmission Electron Microscope – TEM) ήταν η πρώτη μορφή ηλεκτρονικής μικροσκοπίας που αναπτύχθηκε. Κατασκευάστηκε λίγα χρόνια πριν το FEM, το 1932, από τους Knoll και Ruska [55]. Την εποχή εκείνη είχε ήδη γίνει αντιληπτό ότι η μεγέθυνση στα οπτικά μικροσκόπια υπόκεινται στον περιορισμό του υψηλού μήκους κύματος των φωτονίων και θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν σωματίδια μικρότερου μήκους κύματος τα οποία θα αλληλεπιδρούν με το δείγμα και θα δίνουν πληροφορίες για αυτό.

Το TEM είναι μία απλή διάταξη στην οποία μία δέσμη ηλεκτρονίων παρόμοια με αυτή του FEM, που περιγράψαμε παραπάνω, προσπίπτει σε ένα πολύ λεπτό δείγμα. Μέρος των ηλεκτρονίων περνάνε διαμέσου του δείγματος ενώ ένα άλλο μέρος σκεδάζεται ή απορροφάται. Τοποθετώντας μία οθόνη στο πίσω μέρος του δείγματος μπορούμε να απεικονίσουμε το δείγμα μετρώντας την κατανομή της πυκνότητας ρεύματος που το διαπερνά. Τα φωτεινά σημεία αντιστοιχούν σε σημεία του δείγματος από όπου τα ηλεκτρόνια διέρχονται εύκολα, ενώ τα σκοτεινά σε σημεία του δείγματος από όπου τα ηλεκτρόνια σε μεγάλο ποσοστό απορροφώνται ή σκεδάζονται.

Η διακριτική ικανότητα του TEM καθορίζεται κυρίως από τεχνικές παραμέτρους. Η φυσική παράμετρος που την περιορίζει είναι το μήκος κύματος των ηλεκτρονίων, το οποίο ανάλογα και με την κινητική ενέργεια μπορεί να γίνει πολύ μικρό, κάτω από \AA . Σύγχρονα TEM έχουν διακριτικές ικανότητες μέχρι και λίγο κάτω από \AA .

Για πηγή της ηλεκτρονικής δέσμης στα TEM χρησιμοποιείται συνήθως θερμιονική εκπομπή ηλεκτρονίων. Στο TEM δεν υπάρχει απαίτηση για πολύ συγκεντρωμένη δέσμη καθώς η ίδια δέσμη διαπερνά όλο το δείγμα. Ωστόσο, χρησιμοποιούνται ηλεκτρομαγνητικοί φακοί εστίασης έτσι ώστε η δέσμη να έχει τα κατάλληλα χαρακτηριστικά που χρειάζονται στο εκάστοτε δείγμα. Παρόλα αυτά μία πολύ σημαντική παράμετρος της δέσμης, η οποία ως τεχνικό χαρακτηριστικό περιορίζει τη διακριτική ικανότητα του οργάνου, είναι η φωτεινότητα (brightness) της δέσμης. Δηλαδή το κατά πόσον η δέσμη συγκεντρώνει το ρεύμα σε μικρό χώρο. Εδώ είναι που μία πηγή πεδιακής εκπομπής είναι πολύ αποδοτικότερη, καθώς δίνει αρχική δέσμη περιορισμένη στο χώρο και πολύ υψηλής φωτεινότητας σε σχέση με τη θερμιονική εκπομπή ηλεκτρονίων. Για το λόγο αυτό, τα σύγχρονα TEM χρησιμοποιούν κανόνια πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων (Field Emission Guns).

2.2.3. Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (Scanning Electron Microscopy-SEM)

Το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης αποτέλεσε την πρώτη μορφή μικροσκοπίων σάρωσης. Η ιδέα στα μικροσκόπια σάρωσης είναι ότι η αλληλεπίδραση μεταξύ του δείγματος και των ηλεκτρονίων που το «φωτίζουν» γίνεται σε ένα σημείο κάθε στιγμή. Η δέσμη εστιάζεται σε πολύ περιορισμένο χώρο γύρω από ένα σημείο του δείγματος και αλληλεπιδρά μαζί του στο συγκεκριμένο αυτό χώρο δίνοντας πληροφορίες για τα τοπικά χαρακτηριστικά του δείγματος. Στη συνέχεια η δέσμη μετακινείται σε άλλα σημεία σαρώνοντας όλο το δείγμα.

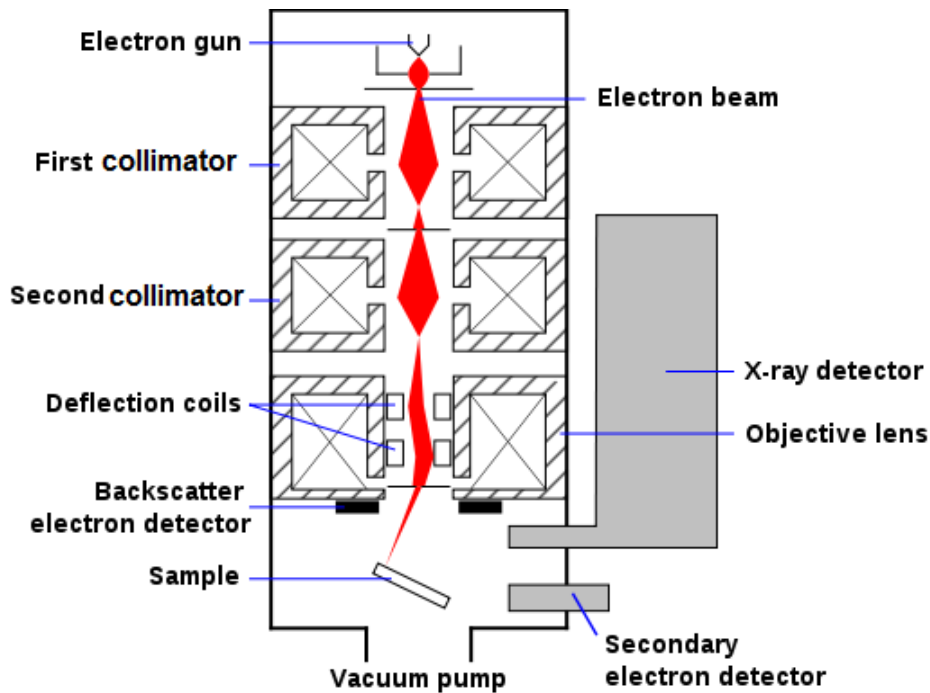
Παίρνοντας μία μέτρηση των όποιων χαρακτηριστικών του δείγματος θέλουμε να ανιχνεύσουμε κάθε στιγμή (δηλαδή σε κάθε διαφορετικό σημείο πρόσπτωσης του δείγματος) δημιουργούμε μία συνολική εικόνα του συγκεκριμένου χαρακτηριστικού που θέλουμε να απεικονίσουμε.

Η εφεύρεση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης έγινε από τον von Ardenne, το 1937 [56, 57]. Αρχικά χρησιμοποιήθηκαν κανόνια ηλεκτρονίων θερμιονικής εκπομπής. Ωστόσο, οι απαιτήσεις για όλο και καλύτερη διακριτική ικανότητα και αρχική δέσμη με μεγάλη φωτεινότητα οδήγησαν στο πέρασμα σε κανόνια πεδιακής εκπομπής. Το 1970 ερευνητές κατάφεραν να παρατηρήσουν μοναδικά άτομα [58] χρησιμοποιώντας SEM το οποίο χρησιμοποιούσε από τα πρώτα κανόνια ηλεκτρονίων πεδιακής εκπομπής.

Το μοντέλο του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου φαίνεται στο σχήμα 2.1. Η ηλεκτρονική δέσμη παράγεται με εκπομπή πεδίου από το πυροβόλο ηλεκτρονίων (electron gun). Στη συνέχεια η δέσμη αυτή συγκεντρώνεται περνώντας μέσα από ηλεκτρομαγνητικούς φακούς και καταλήγει να προσπίπτει σε ένα συγκεκριμένο σημείο του δείγματος, αφού περνάει από μαγνήτες οι οποίοι την εκτρέπουν, ώστε να την κατευθύνουν στο επιθυμητό σημείο.

Το σημείο, λοιπόν, στο οποίο προσπίπτει η δέσμη μπορεί να μεταβληθεί, κι έτσι η δέσμη σαρώνει το δείγμα. Ανάλογα με τα χαρακτηριστικά του δείγματος σε κάθε δεδομένο σημείο, αλλάζουν διάφορες ανιχνεύσιμες παράμετροι στην αλληλεπίδραση της προσπίπτουσας δέσμης με το δείγμα (όπως η δευτερεύουσα εκπομπή ηλεκτρονίων, η εκπομπή ακτίνων X, η ανάκλαση ηλεκτρονίων κ.α.). Ανιχνεύοντας αυτές τις παραμέτρους με κατάλληλους αισθητήρες, μπορούμε να απεικονίσουμε διάφορα χαρακτηριστικά του δείγματος.

Ο βασικός παράγοντας που επηρεάζει τη διακριτική ικανότητα χώρου (lateral resolution) που μας δίνει η διάταξη, είναι η διατομή της δέσμης που προσπίπτει στο δείγμα. Προφανώς, όσο μειώνεται η διατομή της δέσμης, τόσο μικρότερο είναι το κάθε «σημείο» λήψης δεδομένων, άρα τόσο καλύτερη η διακριτική ικανότητα. Συνεπώς είναι απαραίτητο να πάρουμε δέσμη με πολύ μικρό ίχνος στο δείγμα, κάτι που εξασφαλίζεται με τη χρήση των ηλεκτρονικών εστίασης. Έτσι μπορούν να εξασφαλιστούν ίχνη (στο δείγμα) δέσμης με διαμέτρους έως και 5\AA κατ' ελάχιστον.



Σχήμα 2.1: Σχηματική αναπαράσταση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης.

Το μεγάλο πλεονέκτημα που έχει το SEM σε σχέση με άλλες μορφές ηλεκτρονικής μικροσκοπίας είναι οι δυνατότητες που δίνει για πολλαπλή ανάλυση του δείγματος. Η αλληλεπίδραση του δείγματος με την προσπίπτουσα δέσμη μπορεί να δώσει μεγάλη ποικιλία πληροφοριών για τα χαρακτηριστικά του δείγματος στο συγκεκριμένο σημείο όπου προσπίπτει η δέσμη. Για το λόγο αυτό ένα SEM μπορεί να έχει στο θάλαμο γύρω του πολλών ειδών ανιχνευτές.

Η πρώτη πληροφορία που λαμβάνεται συνήθως είναι τα ανακλώμενα και γενικότερα τα σκεδαζόμενα ηλεκτρόνια από την προσπίπτουσα δέσμη. Για το λόγο αυτό πάντα στο SEM υπάρχει ανιχνευτής ηλεκτρονίων, ο οποίος συλλέγει τα ηλεκτρόνια που προκύπτουν μετά την πρόσπτωση. Ο αριθμός των ηλεκτρονίων αυτών αλλάζει ανάλογα με τον τρόπο με τον οποίο αυτά έχουν σκεδαστεί, κι αυτό με τη σειρά του εξαρτάται από τη μορφολογία του δείγματος. Με τον τρόπο αυτό, μπορούμε να δημιουργήσουμε εικόνα της μορφολογίας του δείγματος.

Ο ανιχνευτής ηλεκτρονίων, τώρα, μπορεί στη σύγχρονη εποχή εύκολα να κάνει φασματοσκοπική ανάλυση. Βάσει των ενεργειών των ηλεκτρονίων που συλλέγει μπορεί να ξεχωρίσει αν προέρχονται από ανάκλαση της πρωτογενούς δέσμης, ή αν είναι δευτερεύοντα ηλεκτρόνια (secondary electrons), ηλεκτρόνια δηλαδή που προέρχονται μέσα από το δείγμα, τα οποία διεγείρονται και εξάγονται από αυτό, όταν αλληλεπιδρούν με αυτά της πρωτογενούς δέσμης. Τα δευτερεύοντα ηλεκτρόνια μπορούν να μας δώσουν σημαντικές πληροφορίες για

τη σύσταση του δείγματος. Για παράδειγμα, μπορούν να δώσουν χημική αντίθεση (chemical contrast) δηλαδή να δώσουν διαφορετικά σήματα ανιχνευτή στα σημεία στα οποία υπάρχουν διαφορετικά χημικά στοιχεία. Επίσης τα δευτερεύοντα ηλεκτρόνια μπορούν να μας δώσουν πληροφορίες για τις μαγνητικές ιδιότητες του δείγματος στο συγκεκριμένο σημείο.

Μία ακόμα αλληλεπίδραση της προσπίπτουσας δέσμης με το δείγμα, η οποία μπορεί να ανιχνευτεί και να δώσει πληροφορίες για τη δομή του δείγματος, είναι η ακτινοβολία η οποία παράγεται. Οι σύγκρουση των υψηλής ενέργειας ηλεκτρονίων με το δείγμα δημιουργεί υψηλής ενέργειας φωτόνια, είτε λόγω της απότομης επιβράδυνσης της δέσμης, είτε λόγω της διέγερσης από τη δέσμη εσωτερικών ηλεκτρονίων του δείγματος, τα οποία επιστρέφοντας στη θεμελιώδη κατάστασή τους εκπέμπουν φωτόνια. Τα φωτόνια αυτά, ανάλογα και με την ενέργεια της προσπίπτουσας δέσμης, μπορούν να είναι στο ορατό φάσμα, στις υπεριώδεις αλλά και στις ακτίνες X. Για το λόγο αυτό στα περισσότερα SEM τοποθετούνται ανιχνευτές φωτός αλλά και ανιχνευτής ακτίνων X. Το φάσμα του φωτός το οποίο εκπέμπεται σε κάθε σημείο του δείγματος μπορεί να δώσει σημαντικές πληροφορίες για την εσωτερική δομή του υλικού του δείγματος.

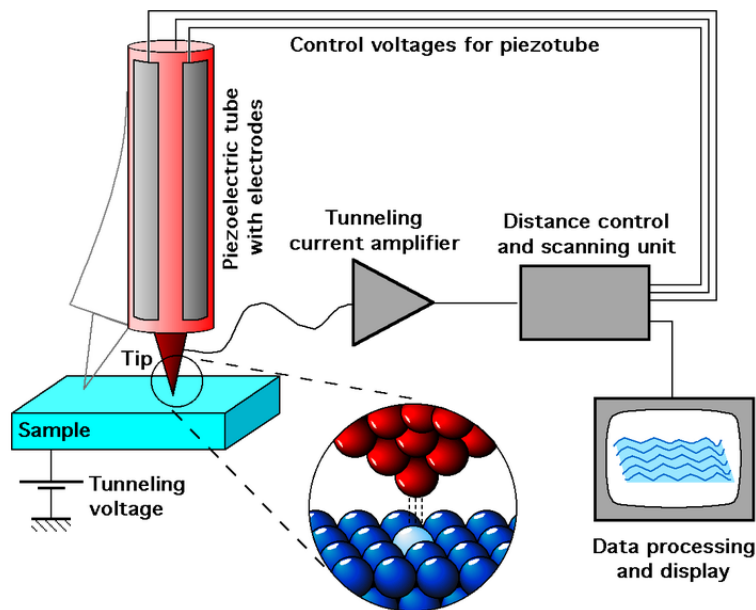
Τέλος, το SEM μπορεί να μας δώσει πληροφορίες για τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά του δείγματος. Αν αυτό είναι αγωγίμο ή ημιαγωγίμο και στα άκρα του εφαρμόζεται μία τάση, η αλληλεπίδραση με την προσπίπτουσα δέσμη του μικροσκοπίου μπορεί να επηρεάσει τη χαρακτηριστική τάσης-ρεύματος. Για παράδειγμα, αν η δέσμη πέσει πάνω στη ζώνη απογύμνωσης μίας ημιαγωγίμης επαφής p-n, διεγείρει ηλεκτρόνια από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας δημιουργώντας ζεύγη οπών-ηλεκτρονίων και δίνοντας ανάστροφο ρεύμα παρόμοιο με αυτό που δημιουργείται σε μία φωτοδίοδο. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται έγχυση ηλεκτρονικής δέσμης (electron beam injection). Αναλύοντας τη συμπεριφορά του δείγματος στην έγχυση δέσμης σε κάθε σημείο του μπορούμε να αντλήσουμε χρήσιμες πληροφορίες για την εσωτερική του δομή, την ύπαρξη κρυσταλλικών ατελειών κ.α.

Εν κατακλείδι, το SEM είναι μία από τις πιο διαδεδομένες στη σύγχρονη εποχή μορφές ηλεκτρονικής μικροσκοπίας. Οι πολλαπλές δυνατότητες ανάλυσης του δείγματος που παρέχει, σε συνδυασμό με την πολύ καλή διακριτική ικανότητά του, το καθιστούν εξαιρετικά χρήσιμο εργαλείο για πολλές επιστήμες, από τη βιολογία μέχρι την μεταλλουργία.

Η ανάπτυξη του SEM έδωσε επίσης για την ανάπτυξη του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης διέλευσης (Scanning Transmission Electron Microscope – STEM), το οποίο είναι ένα TEM στο οποίο όμως η δέσμη προσπίπτει τοπικά στο δείγμα και το σαρώνει.

2.2.4. Μικροσκόπιο σάρωσης σήραγγας (Scanning Tunneling Microscopy–STM)

Το STM είναι όργανο μικροσκοπίας, το οποίο χρησιμεύει στην αναλυτική μελέτη επιφανειών καθώς μπορεί να δώσει ανάλυση σε ατομικό επίπεδο. Στο σχήμα 3.2 φαίνεται σχηματικό διάγραμμα αναπαράστασης του STM, το οποίο εφευρέθηκε το 1982 από τους Binnig και Rohrer [59, 60], οι οποίοι και έλαβαν το βραβείο Nobel φυσικής το 1986.



Σχήμα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης.

Το ρεύμα σήραγγας μεταξύ ακίδας-δείγματος εξαρτάται από την επιβαλλόμενη τάση και από την απόσταση δείγματος-ακίδας. Η ακίδα μπορεί να μετακινείται με χρήση πιεζοηλεκτρικών και κατακόρυφα και οριζόντια με εξαιρετική ακρίβεια της τάξης κλασμάτων του Å. Η ακίδα σαρώνει λοιπόν οριζόντια την επιφάνεια του δείγματος, ενώ ταυτόχρονα κινείται κατακόρυφα με χρήση ενός μηχανισμού ανάδρασης έτσι ώστε το ρεύμα να διατηρείται σταθερό. Η κατακόρυφη αυτή κίνηση δίνει τη μορφολογία της επιφάνειας του δείγματος, καθώς επί της ουσίας η ακίδα έχει κινηθεί με τέτοιο τρόπο, ώστε να διατηρεί την απόσταση ακίδας-δείγματος σταθερή. Ο τρόπος αυτός λειτουργίας ονομάζεται λειτουργία σταθερού ρεύματος ή λειτουργία ανάδρασης.

Το STM μπορεί να λειτουργήσει και χωρίς ανάδραση στη λειτουργία σταθερού ύψους. Κρατώντας σταθερά ύψος και τάση σαρώνουμε το δείγμα μετρώντας το ρεύμα σήραγγας σε κάθε σημείο. Το ρεύμα αυτό αλλάζει ανάλογα με τη μορφολογία του δείγματος και συνεπώς η απεικόνισή του σε διδιάστατη εικόνα αντιπροσωπεύει τη μορφολογία του δείγματος.

Στο STM η διατομή της ηλεκτρονικής δέσμης είναι από μόνη της πολύ μικρή, καθώς η απόσταση ακίδας-δείγματος είναι μικρότερη από την καμπυλότητα της ακίδας. Επίσης δεν υπάρχει διάδοση της δέσμης στο κενό. Τα ηλεκτρόνια δηλαδή περνούν ευθέως από την ακίδα όπου αρχίζει η απαγορευμένη περιοχή στο δείγμα όπου τελειώνει η απαγορευμένη περιοχή. Ο μηχανισμός φαινομένου σήραγγας είναι αρκετά διαφορετικός από την περίπτωση της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων και περιγράφεται από τη θεωρία του Simmons [61].

Συνεπώς η δέσμη δεν προλαβαίνει να ανοίξει κι έτσι η διακριτική ικανότητα που δίνει το STM είναι σχεδόν σε υποατομικό επίπεδο. Η διακριτική ικανότητα στην περίπτωση αυτή καθορίζεται πλήρως από την ακτίνα καμπυλότητας της ακίδας που σαρώνει το δείγμα. Όσο πιο αιχμηρή είναι η ακίδα τόσο μικρότερο κομμάτι του δείγματος αλληλεπιδρά μαζί της σε κάθε σημείο σάρωσης, άρα τόσο μικρότερα στοιχεία του δείγματος μπορούν να αναγνωριστούν. Τα σύγχρονα STM, τα οποία είναι εφοδιασμένα με ακίδες που τερματίζονται σχεδόν με ένα μοναδικό άτομο, δίνουν τη δυνατότητα να παρατηρήσουμε ακόμα και τη δομή των τροχιακών μίας επιφάνειας, μια και σε τόσο αιχμηρές ακίδες το ρεύμα σήραγγας εξαρτάται εκτός από την επικάλυψη των τροχιακών της επιφάνειας του δείγματος με αυτά των ατόμων στην κορυφή της ακίδας.

Το STM ήταν το 1986 ο προπομπός πολλών ειδών μικροσκοπίας. Με βάση την ίδια τεχνολογία και αρχές λειτουργίας με το STM, αναπτύχθηκαν από τότε και μετά μία ολόκληρη ομάδα μικροσκοπίων, τα οποία ονομάζονται μικροσκόπια σάρωσης ακίδας (Scanning Probe Microscopy –SPM). Στα SPM η αρχή λειτουργίας είναι ίδια απλά αλλάζει η αλληλεπίδραση μεταξύ ακίδας και δείγματος η οποία μετριέται. Για παράδειγμα, στο μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (Atomic Force microscopy – AFM) που είναι από τα πιο διαδεδομένα SPM, μετρούνται οι δυνάμεις οι οποίες αναπτύσσονται μεταξύ των ατόμων, όταν αυτά έρχονται σε πολύ μικρή απόσταση.

Τα μικροσκόπια SPM δεν εντάσσονται πάντα στη γενική κατηγορία των ηλεκτρονικών μικροσκοπίων, καθώς δεν υπάρχει ηλεκτρονική δέσμη. Ο προπομπός τους, το STM, αυστηρά δεν εντάσσεται ούτε αυτό στα ηλεκτρονικά μικροσκόπια. Μολαταύτα εδώ το εντάσσουμε με την έννοια ότι στο STM υπάρχει ροή ηλεκτρονίων, η οποία καθορίζει την εικόνα που δημιουργείται. Ωστόσο, η διαφοροποίηση με τα ηλεκτρονικά μικροσκόπια θα πρέπει να είναι σαφής. Στα ηλεκτρονικά μικροσκόπια, η πληροφορία προέρχεται από την αλληλεπίδραση της προσπίπτουσας ηλεκτρονικής δέσμης με το δείγμα, ενώ στα SPM (και στο STM) προέρχεται από την αλληλεπίδραση της ακίδας με το δείγμα.

Στην επόμενη ενότητα θα ασχοληθούμε με το όργανο που αποτελεί το κεντρικό θέμα της διατριβής αυτής, που είναι το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης εγγύς πεδίου. Το μικροσκόπιο αυτό έχει στοιχεία και από το SEM αλλά και τα SPM. Η κύρια λειτουργία του είναι παρόμοια με αυτή του SEM αλλά χρησιμοποιεί τεχνογνωσία η οποία προέρχεται από τα SPM.

2.3. Ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης εγγύς πεδίου

2.3.1. Εισαγωγή

Το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης εγγύς πεδίου (Near Field Emission Scanning Electron Microscopy – NFESEM) είναι ένα υβριδικό όργανο μεταξύ ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης (SEM) και μικροσκοπίου σάρωσης σήραγγας (STM). Το κίνητρο για την ανάπτυξη του οργάνου είναι η προσπάθεια για λήψη εικόνων, όπως αυτές του SEM, χωρίς τη χρήση ηλεκτρομαγνητικών διατάξεων εστίασης της δέσμης, κάτι που έχει το πλεονέκτημα ότι μειώνει πολύ το κόστος, το μέγεθος και την πολυπλοκότητα σε σχέση με το κλασσικό SEM.

Το NFESEM βασίζεται στη διάταξη και την τεχνολογία του STM. Η βασική του διαφορά είναι ότι η ακίδα δεν τοποθετείται σε απόσταση μερικών Å από το δείγμα, αλλά σε αρκετά μεγαλύτερη απόσταση 5-25nm. Ακριβώς τέτοια διάταξη είχε και το όργανο που είχε αναπτυχθεί το 1972 από τους Young, Ward και Scire [62] και είχε ονομαστεί topographiner. Το όργανο εκείνο ήταν ο προπομπός του STM και λειτουργούσε υπό την ίδια αρχή με το STM καθώς η απεικόνιση της επιφάνειας προερχόταν από τις διακυμάνσεις του ρεύματος πεδιακής εκπομπής από την ακίδα προς το δείγμα, οι οποίες βέβαια εξαρτώνται από τις διακυμάνσεις στην επιφάνεια του δείγματος, αφού αυτές αλλάζουν το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο στην κορυφή της ακίδας. Με σημερινούς όρους, θα μπορούσε να ενταχθεί στην ομάδα των SPM μια και η εικόνα δημιουργείται μετρώντας την αλληλεπίδραση μεταξύ ακίδας και δείγματος.

Αντίθετα, το NFESEM, το οποίο αναπτύχθηκε το 2009 στο ETH της Ζυρίχης [63, 64, 65] δεν βασίζεται στην αρχή λειτουργίας του STM αλλά του SEM καθώς δημιουργεί την εικόνα βασιζόμενο κυρίως στην ανάλυση των δευτερευόντων ηλεκτρονίων (Secondary Electrons – SE) που προκύπτουν από την πρόσπτωση της δέσμης στο δείγμα, και όχι από την πρωτεύουσα δέσμη πεδιακής όπως στο topographiner.

Η μελέτη της δευτερεύουσας δέσμης ηλεκτρονίων δίνει μεγάλες δυνατότητες απεικόνισης διαφορετικών χαρακτηριστικών του δείγματος. Τα δευτερεύοντα ηλεκτρόνια φέρουν πολλές πληροφορίες για την περιοχή του δείγματος όπου προσπίπτει η πρωτεύουσα δέσμη. Για παράδειγμα το ενεργειακό φάσμα τους εξαρτάται από τη χημική σύσταση του δείγματος και η κατανομή των spin τους από τις μαγνητικές ιδιότητές του. Αν λοιπόν βρεθεί ο κατάλληλος τρόπος να ανιχνευτούν οι πληροφορίες αυτές μπορεί να απεικονιστεί το δείγμα ξεχωριστά ως προς την κάθε ιδιότητα.

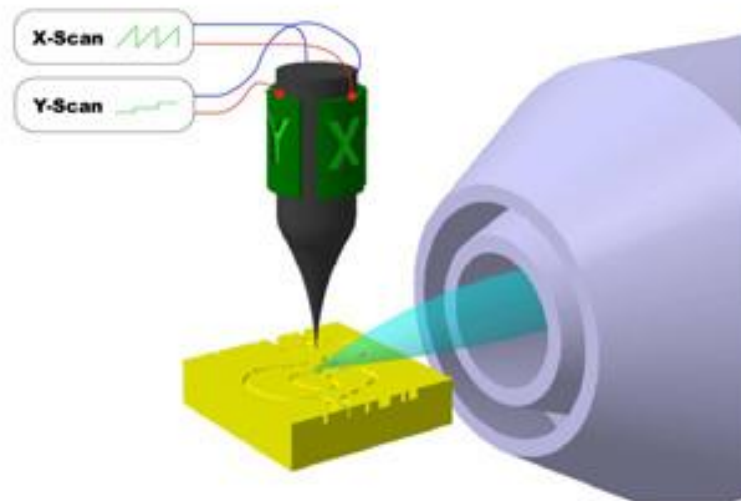
Στην επόμενη παράγραφο θα δούμε αναλυτικά την πειραματική διάταξη του NFESEM χωρίς όμως να μπούμε σε τεχνικές λεπτομέρειες αφού η διατριβή αυτή είναι θεωρητική. Στην παράγραφο 2.3.3 θα δούμε τα πειραματικά αποτελέσματα που δίνει το NFESEM και θα αναλύσουμε τις δυνατότητες απεικόνισής του και τη διακριτική του ικανότητα.

2.3.2. Η διάταξη του NFESEM

Στο σχήμα 2.3 βλέπουμε τη σχηματική αναπαράσταση του NFESEM. Μία αιχμηρή ακίδα από Βολφράμιο (W) τοποθετείται (σχεδόν κάθετα) σε απόσταση 5-25nm από το δείγμα. Αν εφαρμόσουμε τάση της τάξης των 10V μεταξύ ακίδας και δείγματος (με την άνοδο στο δείγμα) αναπτύσσεται ένα ισχυρό τοπικό ηλεκτρικό πεδίο (της τάξης των 5V/nm) στην κορυφή της ακίδας, το οποίο είναι ικανό να προκαλέσει πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από την ακίδα, δημιουργώντας ηλεκτρονική δέσμη προς το δείγμα.

Η δέσμη αυτή (πρωτεύουσα δέσμη) προσπίπτει στο δείγμα και αλληλεπιδρά μαζί του όπως ακριβώς και στο SEM. Η αλληλεπίδραση αυτή δημιουργεί μια δευτερεύουσα δέσμη ηλεκτρονίων είτε από ηλεκτρόνια της πρωτεύουσας δέσμης, τα οποία ανακλώνται στο δείγμα, (backscattered electrons) είτε από ηλεκτρόνια τα οποία διεγείρονται από την πρωτεύουσα δέσμη και εξέρχονται μέσα από το δείγμα.

Τα ηλεκτρόνια της δευτερεύουσας δέσμης τώρα συλλέγονται από έναν ανιχνευτή δευτερευόντων ηλεκτρονίων (Secondary Electrons Detector – SED) ο οποίος βρίσκεται σε πολύ υψηλή τάση για να έλκει τα ηλεκτρόνια αυτά. Τα δευτερεύοντα ηλεκτρόνια έλκονται προς την άνοδο-δείγμα με ένα πολύ ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο, το πεδίο που προκαλεί την εκπομπή της πρωτεύουσας δέσμης. Για το λόγο αυτό, ο SED βρίσκεται σε υψηλό σε σχέση με το δείγμα δυναμικό (της τάξης του 1.5kV) έτσι ώστε αρκετά από τα δευτερεύοντα ηλεκτρόνια να ξεπεράσουν την έλξη της ανόδου και να φθάσουν στον ανιχνευτή.



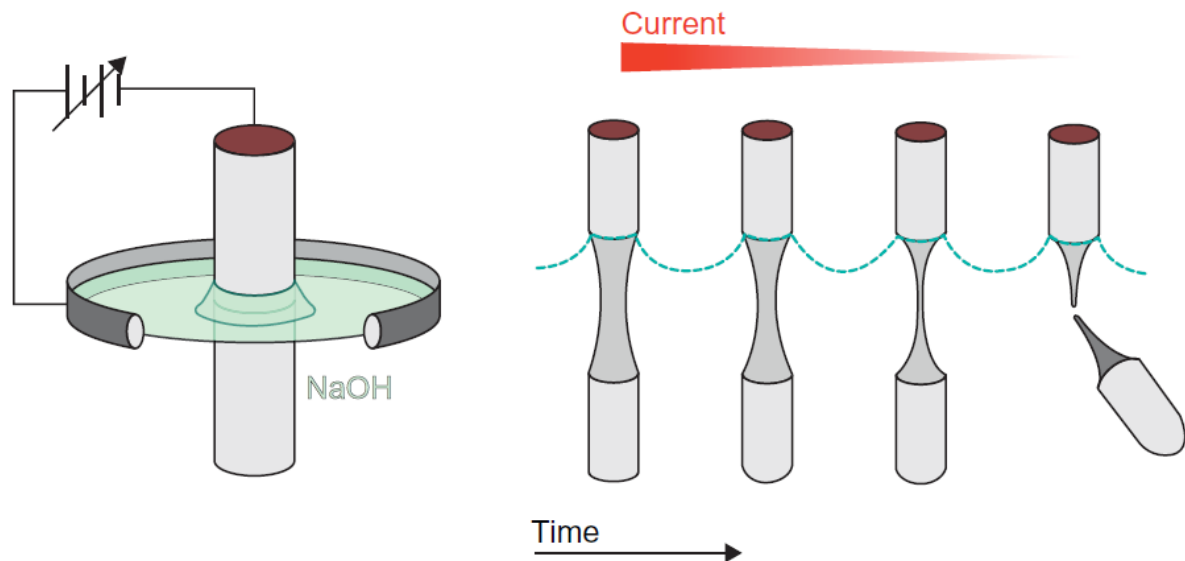
Σχήμα 2.3: Σχηματική αναπαράσταση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης εγγύς πεδίου.

Η ακίδα τώρα έχει τη δυνατότητα όπως φαίνεται στο σχήμα να κινείται οριζόντια και να σαρώνει το δείγμα. Με τον τρόπο αυτό αλλάζει το σημείο του δείγματος στο οποίο προσπίπτει η δέσμη. Μετρώντας σε κάθε σημείο το ρεύμα της πρωτεύουσας και της δευτερεύουσας δέσμης, αλλά και άλλα χαρακτηριστικά της δευτερεύουσας δέσμης, όπως το ενεργειακό φάσμα, μπορούμε να δημιουργήσουμε εικόνες του δείγματος.

Πρωταρχικό ρόλο στη λειτουργία του NFESM παίζει η πρωτεύουσα δέσμη και συνεπώς η προετοιμασία των ακίδων που την παράγουν. Οι ακίδες αυτές πρέπει να είναι όσο το δυνατόν καθαρότερες και αιχμηρότερες. Για το λόγο αυτό όλα τα πειράματα λαμβάνουν χώρο σε υπέρ-υψηλό κενό (Ultra High Vacuum – UHV) με πίεση περίπου 5×10^{-11} mbar.

Οι ακίδες κατασκευάζονται ξεκινώντας από λεπτά σύρματα πολυκρυσταλλικού Βολφραμίου διαμέτρου 0.25mm. Τα σύρματα μετατρέπονται σε εξαιρετικά αιχμηρές ακίδες με επεξεργασία ηλεκτροχημικής χάραξης (etching), η οποία λαμβάνει χώρα εκτός του θαλάμου κενού σε ατμοσφαιρικό περιβάλλον. Η διαδικασία παριστάνεται σχηματικά στο σχήμα 2.4. Το σύρμα τοποθετείται μέσα σε ένα διάλυμα NaOH, ενώ γύρω από το κέντρο του τοποθετείται ένα δαχτυλίδι από Pt το οποίο τοποθετείται σε δυναμικό μερικά V υψηλότερο σε σχέση με το σύρμα W. Καθώς το βασικό διάλυμα «τρώνει» το σύρμα, η αντίστασή του μεγαλώνει και το ρεύμα μειώνεται. Όταν το ρεύμα μειωθεί απότομα κάτω από ένα όριο, σημαίνει ότι το σύρμα κόπηκε και η επιβαλλόμενη τάση σταματάει αυτόματα τερματίζοντας τη διαδικασία. Πριν ακριβώς κοπεί, το σύρμα έχει γίνει απειροελάχιστα λεπτό. Με τον τρόπο αυτό, επιτυγχάνεται

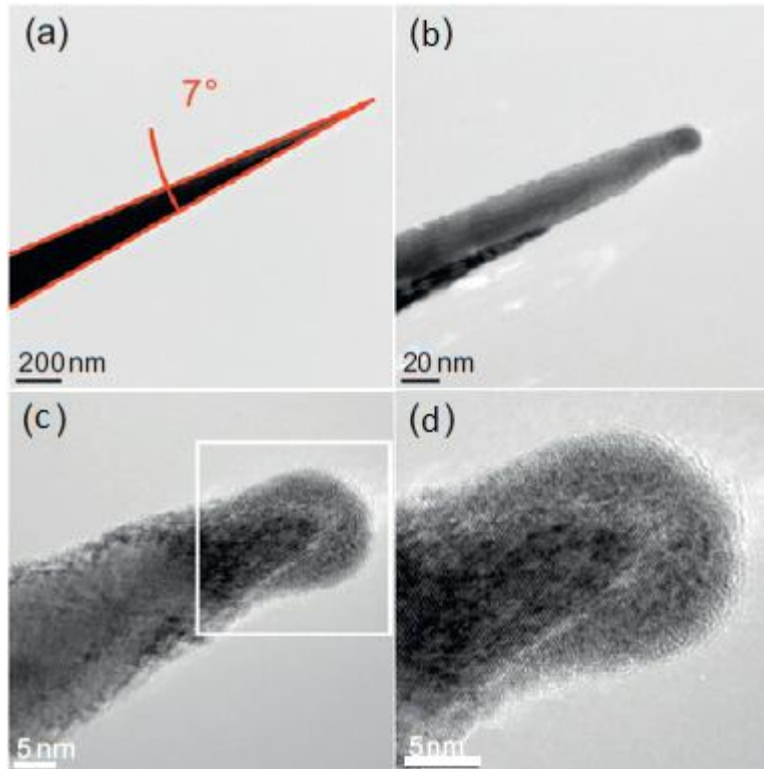
εξαιρετικά μεγάλη αιχμηρότητα στο σημείο που κόβεται. Η ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή της ακίδας είναι της τάξης των λίγων nm.



Σχήμα 2.4: [66]Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας ηλεκτροχημικής χάραξης της ακίδας.

Στη συνέχεια η ακίδα, αφού πλυθεί και στεγνωθεί, τοποθετείται στο θάλαμο κενού και υφίσταται επεξεργασία, έτσι ώστε να καθαριστεί από τις διάφορες «ακαθαρσίες» που βρίσκονται στην επιφάνειά της λόγω του περιβάλλοντος στο οποίο βρέθηκε. Η διαδικασία καθαρισμού περιλαμβάνει ανόπτηση σε πολλαπλά στάδια, έτσι ώστε να φύγουν όλες οι πιθανές «ακαθαρσίες» οι οποίες ως επί το πλείστον είναι O_2 , C και Na. Περισσότερες λεπτομέρειες για την επεξεργασία των ακίδων, που ξεφεύγουν από τους σκοπούς της διατριβής αυτής, μπορούν να βρεθούν στο [66].

Μετά την παραπάνω διαδικασία, η ακίδα είναι έτοιμη να χρησιμοποιηθεί σε πειράματα NFESM. Στο σχήμα φαίνεται η μορφή που έχει μία τυπική ακίδα σε διάφορες κλίμακες. Η εικόνα προέρχεται από μικροσκόπιο TEM. Βλέπουμε ότι η ακίδα ακολουθεί ένα περίπου κωνικό προφίλ με γωνία ανοίγματος 7° . Στην κορυφή η ακίδα τερματίζεται περίπου σφαιρικά με ακτίνα καμπυλότητας κοντά στα 5nm. Όπως δείχνουμε με υπολογισμούς στο επόμενο κεφάλαιο, το σχήμα της ακίδας παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στη δημιουργία στενής ηλεκτρονικής δέσμης, κάτι που δίνει τη δυνατότητα για πολύ καλή διακριτική ικανότητα.



Σχήμα 2.5: [66] Εικόνες TEM μίας τυπικής ακίδας που χρησιμοποιείται στο NFESEM σε 4 διαφορετικές κλίμακες.

Ένα άλλο σημαντικό στοιχείο του οργάνου είναι ο ανιχνευτής δευτερευόντων ηλεκτρονίων. Ο ανιχνευτής αποτελείται από ένα σύστημα σπινθηριστή (scintillator)-φωτοπολλαπλασιαστή (photomultiplier). Ο σπινθηριστής δεν είναι τίποτα άλλο από ένα κρύσταλλο YAlO_3 στον οποίο, όταν προσπίπτουν τα δευτερεύοντα ηλεκτρόνια δημιουργούν ζεύγη οπών-ηλεκτρονίων. Όταν τα ζεύγη αυτά επανασυνδέονται, εκπέμπουν φωτόνια τα οποία οδηγούνται μέσα από έναν οπτικό κυματοδηγό στον φωτοπολλαπλασιαστή όπου μετατρέπονται σε ηλεκτρικό ρεύμα. Το ηλεκτρικό αυτό ρεύμα, βέβαια, είναι πολύ ισχυρότερο από το αρχικό ρεύμα των δευτερευόντων ηλεκτρονίων καθώς έχει γίνει εκμετάλλευση των δυνατοτήτων που έχει ο φωτοπολλαπλασιαστής για πολύ μεγάλη ενίσχυση (έως και 160dB) με πολύ χαμηλό θόρυβο του σήματος των φωτονίων που απορροφά.

Πρόσφατα προστέθηκε από την ομάδα του ETH και ένας αναλυτής ενεργειακού φάσματος στον ανιχνευτή δευτερευόντων ηλεκτρονίων [67]. Ο αναλυτής αυτός δίνει τη δυνατότητα μέτρησης του αριθμού των ηλεκτρονίων που βρίσκονται σε κάθε δυνατή ενέργεια. Με τον τρόπο αυτό μπορούν να διαχωριστούν τα ηλεκτρόνια που προέρχονται από ελαστική ανάκλαση της πρωτεύουσας δέσμης στο δείγμα από αυτά που προέρχονται από δευτερεύουσα εκπομπή μέσα από το δείγμα. Επίσης δίνει τη δυνατότητα λήψης εικόνων απομονώνοντας το

σήμα που προέρχεται από ηλεκτρόνια συγκεκριμένης ενεργειακής περιοχής. Κάθε ενεργειακή περιοχή δίνει διαφορετική εικόνα και μπορεί να απεικονίσει διαφορετικά στοιχεία του δείγματος.

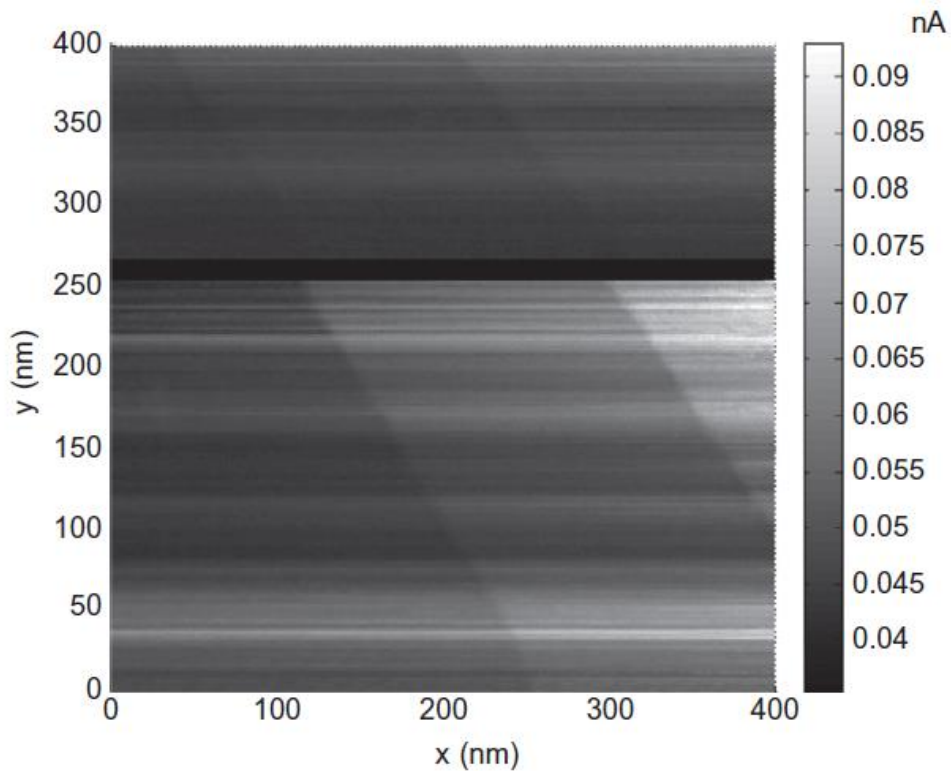
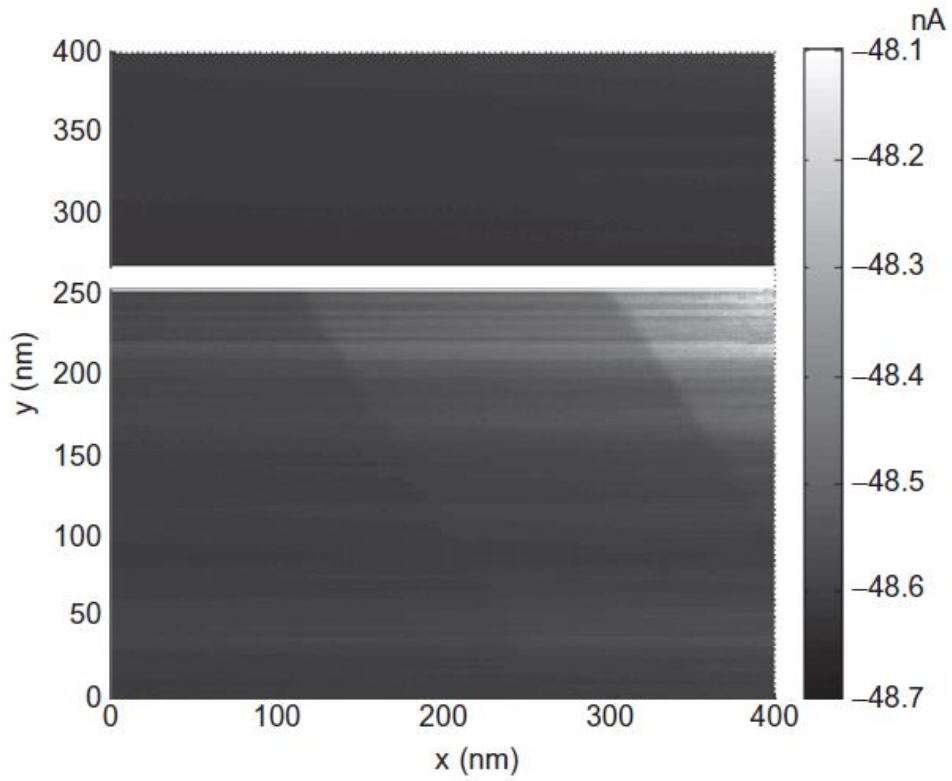
Στην επόμενη παράγραφο θα δούμε πειραματικά αποτελέσματα που δείχνουν τις δυνατότητες του NFESEM και την μη αναμενόμενα καλή διακριτική ικανότητά του.

2.3.3. Μετρήσεις-αποτελέσματα

Έχει διεξαχθεί πλειάδα πειραμάτων με το NFESEM. Έχουν σαρωθεί και απεικονιστεί πολλά διαφορετικά δείγματα για αρκετές διαφορετικές παραμέτρους της διάταξης, έτσι ώστε να ελεγχθεί η απόδοση του οργάνου και κυρίως η διακριτική του ικανότητα. Τα πειράματα αυτά θα παρουσιάσουμε εν συντομία εδώ και θα δείξουμε τις πολλαπλές δυνατότητες που δίνει το NFESEM αλλά και το γεγονός ότι η διακριτική του ικανότητα είναι λίγα nm, και εξαρτάται από την εκάστοτε επιλογή των παραμέτρων αλλά και από την ποιότητα της ακίδας που χρησιμοποιείται σε κάθε περίπτωση.

Τα πρώτα δείγματα που επιλέχθηκαν να απεικονιστούν ήταν μονοκρυσταλλικές επιφάνειες βολφραμίου (W) με προσανατολισμό (110). Τέτοιες επιφάνειες είναι γνωστό από απεικονίσεις με STM ότι έχουν μεγάλα επίπεδα τα οποία διαχωρίζονται από μονοατομικά σκαλοπάτια. Επιλέχθηκε λοιπόν να σαρωθεί και να απεικονιστεί ένα τέτοιο δείγμα σε επιφάνεια 400×400 nm. Στο σχήμα 2.6 βλέπουμε δύο απεικονίσεις που λήφθηκαν ταυτόχρονα σε αυτή τη σάρωση. Στο πάνω σχήμα βλέπουμε την εικόνα που δημιουργεί η μεταβολή του ρεύματος πεδιακής εκπομπής της πρωτεύουσας δέσμης I_{FE} . Στο κάτω σχήμα βλέπουμε την αντίστοιχη εικόνα που δημιουργεί η μεταβολή του ρεύματος της δευτερεύουσας δέσμης I_{SE} . Η σύγκριση των δύο εικόνων είναι εξαιρετικά ενδιαφέρουσα.

Η πρώτη παρατήρηση είναι ότι το I_{SE} μεταβάλλεται σε πολύ μεγαλύτερο εύρος από το I_{FE} . Πράγματι το μέγιστο I_{SE} είναι κατά 163% μεγαλύτερο από το ελάχιστο, ενώ το αντίστοιχο ποσοστό στο I_{FE} είναι 1.24%. Η δεύτερη παρατήρηση είναι ότι τα σημεία στα οποία το I_{SE} αυξάνει, το I_{FE} μειώνεται. Οι δύο αυτές παρατηρήσεις οδηγούν στο συμπέρασμα ότι η αντίθεση στις δύο εικόνες οφείλεται σε εντελώς διαφορετικές αιτίες. Δεν θα μπορούσαμε σε καμία περίπτωση να πούμε ότι η τυχούσα αύξηση στο σήμα I_{SE} οφείλεται σε αύξηση της προσπίπτουσας δέσμης, αφού στην περίπτωση αυτή τα δύο σήματα θα έπρεπε να μεταβάλλονται περίπου ανάλογα ενώ οι εικόνες δείχνουν ότι μεταβάλλονται αφενός δυσανάλογα και αφετέρου προς την αντίθετη κατεύθυνση.



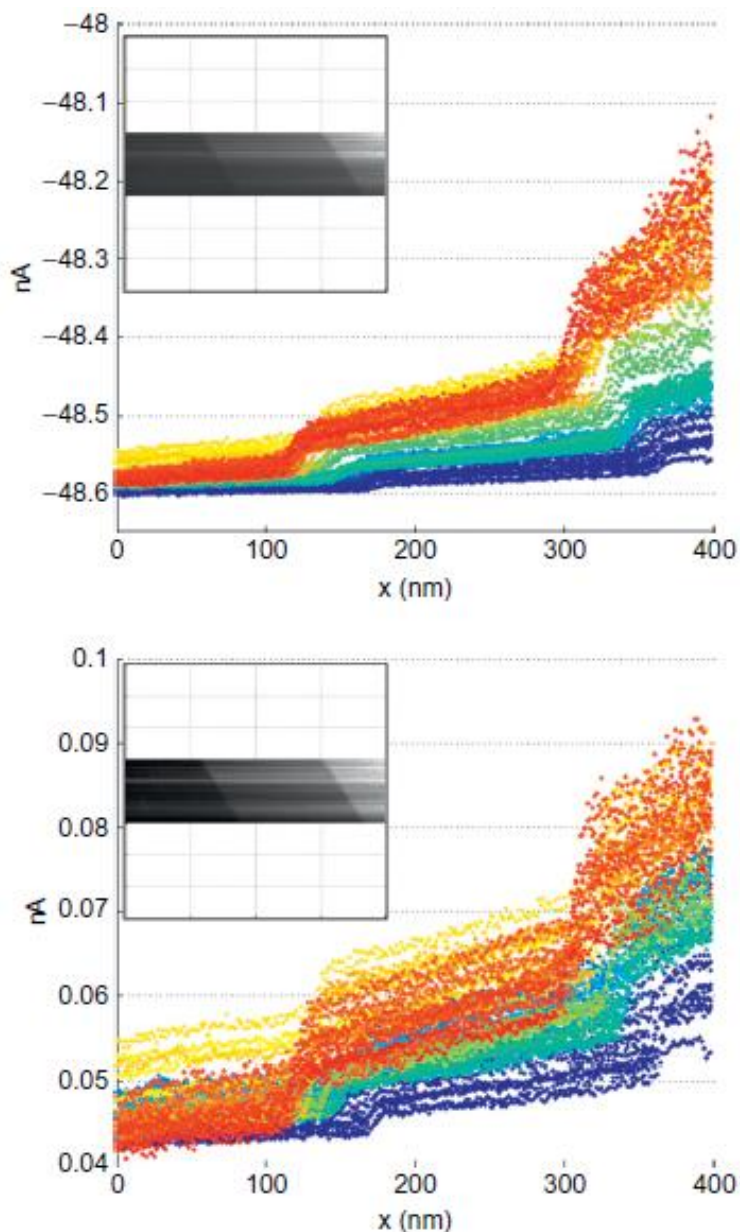
Σχήμα 2.6: [66]Απεικόνιση της σάρωσης επιφάνειας W(110). Πάνω η χρωματική κλίμακα αντιστοιχεί στο ρεύμα της πρωτεύουσας δέσμης και κάτω στο ρεύμα της δευτερεύουσας δέσμης του ανιχνευτή. Η απόσταση καθόδου-δείγματος είναι σταθερή $d=25\text{nm}$, και η επιβαλλόμενη τάση είναι $V=28.8\text{V}$. Η ταχύτητα σάρωσης είναι 450nm/sec . Οι χρωματικές κλίμακες δίνουν τις πραγματικές τιμές των ρευμάτων που μετρούνται.

Η αντίθεση στο I_{FE} οφείλεται στις διαφοροποιήσεις του ηλεκτρικού πεδίου στην κορυφή της ακίδας καθώς αυτή σαρώνει το δείγμα. Αντίθετα, η διαφοροποίηση στο I_{SE} οφείλεται στον τρόπο που αλληλεπιδρά η δέσμη με το δείγμα. Το γεγονός ότι πάνω δεξιά έχουμε μεγαλύτερες τιμές I_{SE} και μικρότερες τιμές I_{FE} αποτελεί ένδειξη ότι υπάρχει μία ελαφρά κλίση της επιφάνειας του δείγματος σε σχέση με την επιφάνεια σάρωσης της ακίδας. Δηλαδή, κάτω αριστερά η απόσταση d μειώνεται ελαφρώς σε σχέση με πάνω δεξιά. Το I_{SE} ακολουθεί την αντίθετη συμπεριφορά, κάτι που αποτελεί ένδειξη ότι πάνω δεξιά η επιφάνεια του δείγματος ανακλά μεγαλύτερο ποσοστό ηλεκτρονίων προς την κατεύθυνση του ανιχνευτή. Κάτι τέτοιο πιθανόν οφείλεται στη σχετική θέση που έχουν ο ανιχνευτής, το δείγμα και ο εκπομπός, και στην κατεύθυνση ανάκλασης της δέσμης.

Στις εικόνες παρατηρούμε δύο γραμμές που σαφώς διαχωρίζουν τρεις περιοχές στις οποίες αλλάζει απότομα η φωτεινότητα της εικόνας. Αυτές οι γραμμές αντιστοιχούν σε μονοατομικά «σκαλιά» (monoatomic steps) ύψους περίπου 0.2nm που ξέρουμε ότι υπάρχουν σε επιφάνειες W(110). Στα σημεία αυτά αυξάνει απότομα το ύψος του δείγματος, και είναι ιδανικά σημεία για να μπορέσουμε να μετρήσουμε τη διακριτική ικανότητα του οργάνου. Αν δούμε πόσο μήκος χρειάζεται μία σάρωση για να ανιχνεύσει πλήρως αυτό το σκαλί, βρίσκουμε μία εκτίμηση του ελάχιστου ανιχνεύσιμου μεγέθους από το όργανο, άρα και της διακριτικής ικανότητάς του.

Ας δούμε τώρα πιο προσεκτικά πώς συμπεριφέρονται τα σήματα I_{FE} και I_{SE} στα σημεία αυτά. Στο σχήμα 2.7 βλέπουμε την μεταβολή των σημάτων κατά μήκος του x για διάφορα y . Παρατηρούμε την απότομη μεταβολή των σημάτων στα σημεία του σκαλιού. Μπορούμε να ορίσουμε ως διακριτική ικανότητα το μήκος που διαρκεί αυτό το απότομο ανέβασμα στο I_{SE} . Αυτό κυμαίνεται ανάλογα και με το y μεταξύ 3-10nm. Θα μπορούσαμε λοιπόν να πούμε ότι η διακριτική ικανότητα στη συγκεκριμένη εικόνα είναι στην καλύτερη περίπτωση 3nm και κατά μέσον όρο περίπου 5-6nm.

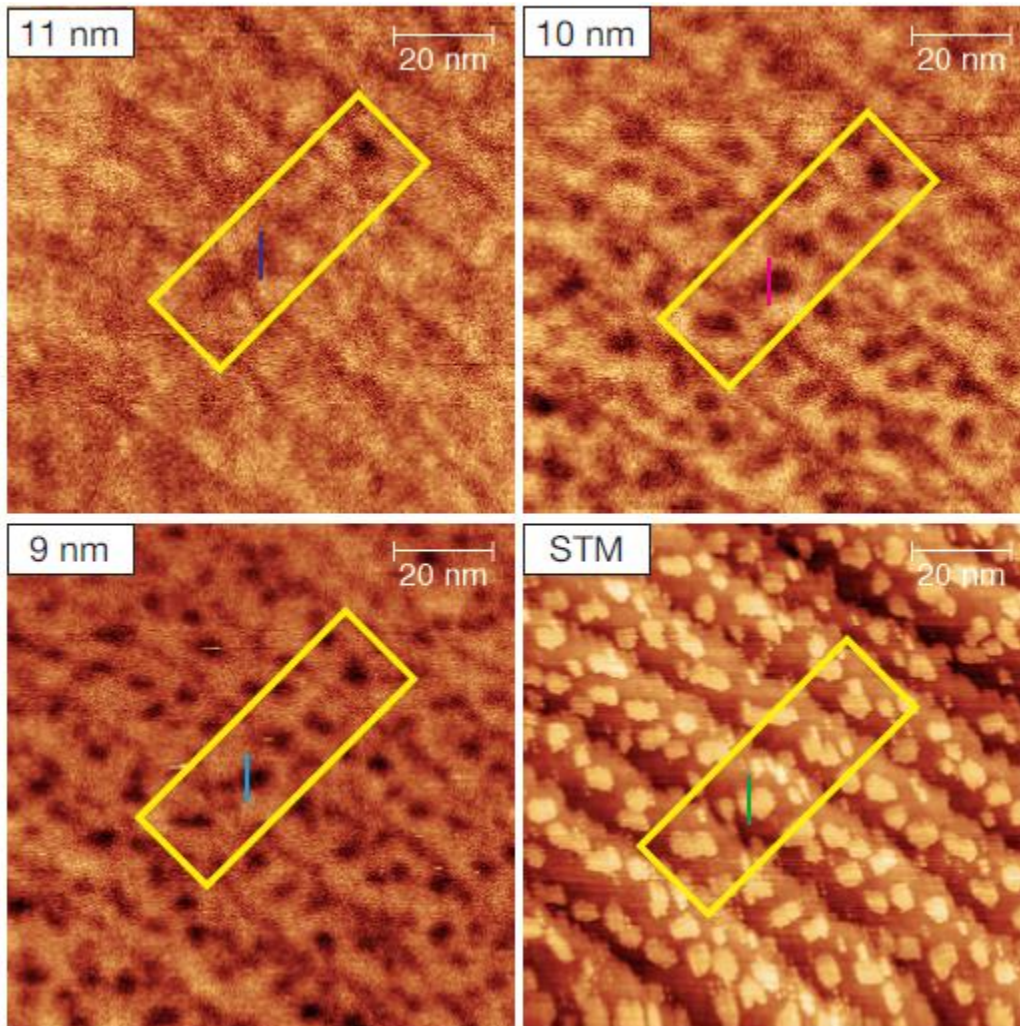
Η διακριτική ικανότητα της εικόνας του I_{SE} εξαρτάται από το εύρος της δέσμης που προσπίπτει στο δείγμα. Το μήκος σάρωσης που απαιτείται για να αλλάξει πλήρως το I_{SE} από την κατάσταση «πριν από το σκαλί» στην κατάσταση «μετά το σκαλί» ισούται με το μήκος σάρωσης που χρειάζεται για να διαβεί ολόκληρη η δέσμη το σημείο το σκαλιού (θεωρούμε ότι το σκαλί έχει αμελητέο εύρος). Είναι δηλαδή χοντρικά η διάμετρος της δέσμης στο δείγμα. Στο επόμενο κεφάλαιο θα δούμε ότι μία τόσο στενή δέσμη σε απόσταση 25nm είναι εντελώς ασύμβατη με την υπάρχουσα θεωρία.



Σχήμα 2.7: [66] Μεταβολή των ρευμάτων I_{FE} (πάνω) και I_{SE} (κάτω) κατά μήκος της κατεύθυνσης x του δείγματος για διάφορα «περάσματα» σε διαφορετικά y κατά τη διάρκεια της σάρωσης. Τα διάφορα χρώματα αντιστοιχούν σε διαφορετικά y . Στις ένθετες εικόνες βλέπουμε την περιοχή του δείγματος στην οποία αντιστοιχεί το κάθε διάγραμμα.

Μία σημαντική ικανότητα του NFESM, που δεν αναδεικνύεται από τα παραπάνω αποτελέσματα, είναι η δυνατότητα χημικής αντίθεσης (chemical contrast). Δηλαδή η δημιουργία αντίθεσης στην εικόνα του δείγματος ανάλογα με τη χημική σύστασή του σε κάθε σημείο. Για το λόγο αυτό κατασκευάστηκαν δείγματα και πάλι μονοκρυσταλλικού W(110), στα οποία, ωστόσο, τοποθετείται Fe με την τεχνική της επιταξίας μοριακής δέσμης (molecular beam epitaxy). Ο σίδηρος τότε σχηματίζει νησίδες πάνω στην επιφάνεια του W.

Στο σχήμα βλέπουμε εικόνες από ένα τέτοιο δείγμα. Η κάτω δεξιά εικόνα προκύπτει από απεικόνιση STM του δείγματος. Βλέπουμε ξεκάθαρα τις νησίδες Fe στην επιφάνεια του W να εμφανίζονται ως φωτεινές περιοχές καθώς η επιφάνεια αποκτά εξογκώματα στα σημεία αυτά. Επίσης βλέπουμε ότι τα συνήθη σκαλιά που εμφανίζονται συνήθως σε ευθείες γραμμές (βλ. σχήμα 2.6) εδώ εμφανίζονται ακανόνιστα, κάτι που υποδεικνύει ότι κομμάτια Fe επικάθονται πάνω στις αιχμές τους. Ωστόσο δεν εμφανίζονται στο STM ως φωτεινές νησίδες λόγω του ότι «κρύβονται» από το σκαλί.

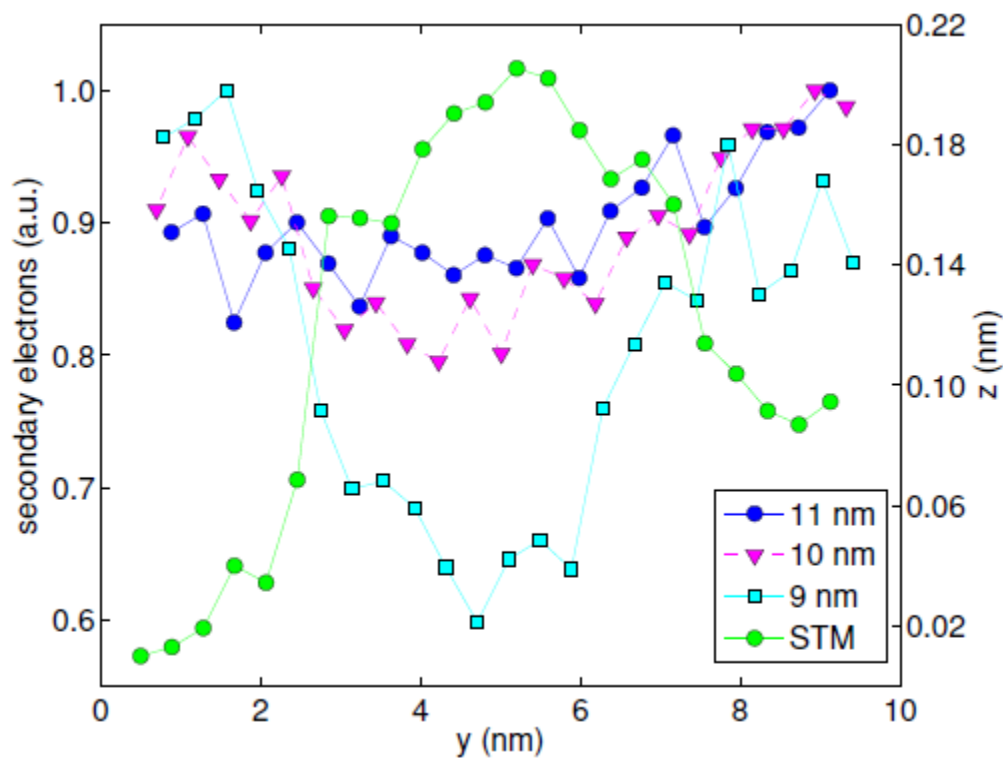


Σχήμα 2.8: [68] (Πάνω και κάτω αριστερά) Εικόνες NFESEM ενός δείγματος W(110) με νησίδες Fe για τρεις διαφορετικές αποστάσεις d οι οποίες αναγράφονται πάνω σε κάθε εικόνα. (Κάτω δεξιά) Εικόνα STM του ίδιου δείγματος.

Στις υπόλοιπες τρεις εικόνες, απεικονίζεται το ίδιο δείγμα από το ρεύμα I_{SE} του NFESEM για τρεις διαφορετικές αποστάσεις d . Οι νησίδες είναι και πάλι ευδιάκριτες, αλλά αυτή τη φορά ως σκοτεινές περιοχές. Περιοχές δηλαδή για τις οποίες παίρνουμε μικρότερο ρεύμα I_{SE} . Αυτό σε συνδυασμό με το γεγονός ότι οι γραμμές των σκαλιών εμφανίζονται επίσης

σκοτεινές, υποδεικνύει ότι πιθανότατα υπάρχει χημική αντίθεση. Δηλαδή από τα σημεία στα οποία υπάρχει σίδηρος εκπέμπονται λιγότερα ηλεκτρόνια δευτερεύουσας δέσμης λόγω της διαφορετικής χημικής σύστασης.

Στις τρεις εικόνες NFESEM επίσης βλέπουμε ότι όσο μειώνεται η απόσταση d βελτιώνεται η ευκρίνεια και η διακριτική ικανότητα της εικόνας. Για να αναλύσουμε καλύτερα τη διακριτική ικανότητα στις εικόνες αυτές θα ακολουθήσουμε μία άλλη μέθοδο από αυτή του «σκαλιού» που ακολουθήθηκε παραπάνω. Παίρνουμε μία γραμμική σάρωση κατά μήκος μίας νησίδας όπως υποδεικνύουν οι γραμμές στο σχήμα 2.8. Στο σχήμα 2.9 σχεδιάζεται η μεταβολή του σήματος που απεικονίζεται χρωματικά στις εικόνες. Στην περίπτωση των 9nm η αντίθεση στα σημεία όπου υπάρχει η νησίδα φαίνεται πιο ξεκάθαρα και είναι άμεσα συγκρίσιμη με την εικόνα STM.



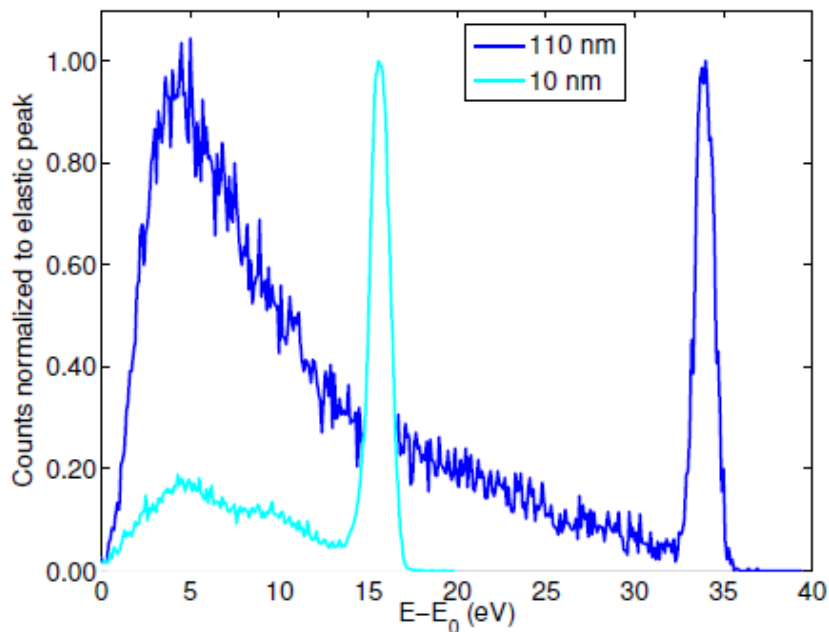
Σχήμα 2.9: [68] Τα σήματα του ανιχνευτή του NFESEM και του STM κατά μήκος της γραμμής σάρωσης που φαίνεται στο σχήμα 2.8.

Θα χρησιμοποιήσουμε την παραπάνω εικόνα για να εκτιμήσουμε τη διακριτική ικανότητα των εικόνων. Έστω L το μήκος στο οποίο το σήμα αρχίζει να πέφτει, δηλαδή η δέσμη βρίσκεται τμηματικά ή πλήρως πάνω σε ένα νησί. Έστω a το μήκος στο οποίο το σήμα βρίσκεται σταθερά σε χαμηλές τιμές, δηλαδή η δέσμη βρίσκεται πλήρως πάνω σε νησίδα. Τότε

η διακριτική ικανότητα που αντιστοιχεί στο εύρος της δέσμης είναι $w=(L-\alpha)/2$. Για την περίπτωση των 9nm που φαίνεται στο σχήμα 2.9 είναι $w\sim 1\text{nm}$.

Οι Zanin κ.α. [68] επανέλαβαν συστηματικά την παραπάνω μέτρηση της διακριτικής ικανότητας για πολλά διαφορετικά σημεία του δείγματος και πολλές διαφορετικές αποστάσεις d . Βρήκαν ότι η διακριτική ικανότητα της εικόνας συστηματικά βελτιώνεται περίπου γραμμικά όσο μειώνεται το d . Ωστόσο, αν μειωθεί πολύ το d , μειώνεται και η τάση, άρα και η ενέργεια των ηλεκτρονίων που προσπίπτουν κάτι που μειώνει τον αριθμό των δευτερευόντων ηλεκτρονίων που συλλέγει ο ανιχνευτής. Κάτι τέτοιο έχει ως αποτέλεσμα τη χειροτέρευση του σηματοθορυβικού λόγου άρα και την αδυναμία απεικόνισης του δείγματος. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με τη βελτίωση της διακριτικής ικανότητας όσο η ακίδα πλησιάζει το δείγμα ορίζουν μία βέλτιστη απόσταση. Η απόσταση αυτή βρέθηκε 6nm στην οποία η διακριτική ικανότητα έφθασε στην καλύτερη περίπτωση τα 1.4nm.

Όπως είπαμε και παραπάνω, οι ερευνητές του ETH προσέθεσαν πρόσφατα και δυνατότητες φασματοσκοπίας της δέσμης δευτερευόντων ηλεκτρονίων [67]. Στο σχήμα 2.10 βλέπουμε μετρήσεις κατανομής ενεργειών της δευτερεύουσας δέσμης για δύο διαφορετικές αποστάσεις d , και συνεπώς για δύο διαφορετικές επιβαλλόμενες τάσεις. Και οι δύο κατανομές είναι μετατοπισμένες κατά E_0 που είναι η ενέργεια που τους δίνει η τάση μεταξύ δείγματος και ανιχνευτή που τα έλκει προς αυτόν.



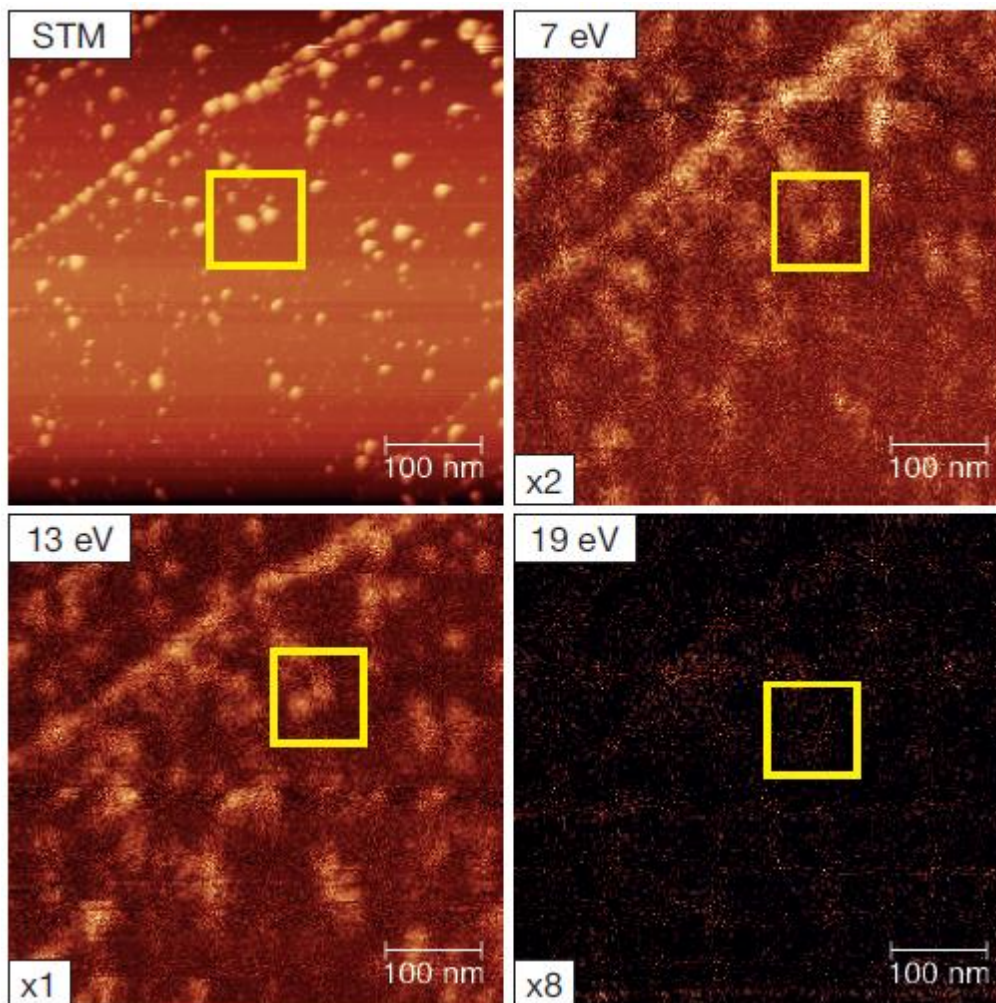
Σχήμα 2.10: [67] Ενεργειακή κατανομή της δευτερεύουσας δέσμης για δύο διαφορετικές αποστάσεις d και για το ίδιο πρωτεύον ρεύμα I_{FE} . Οι τάσεις είναι 35V (110nm) και 17V(10nm).

Στις δύο κατανομές βλέπουμε τη στενή κορυφή κάτω ακριβώς από τη μέγιστη ενέργεια, η οποία είναι παρόμοια με την ενεργειακή κατανομή των ηλεκτρονίων της πρωτεύουσας δέσμης, όπως τη γνωρίζουμε από τη θεωρία της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων. Η ενεργειακή αυτή κορυφή αντιπροσωπεύει τα ηλεκτρόνια της πρωτεύουσας δέσμης που ανακλώνται ελαστικά από το δείγμα.

Οι χαμηλότερες ενεργειακές περιοχές που παρουσιάζουν μία κατανομή με έντονες διακυμάνσεις αντιπροσωπεύουν ηλεκτρόνια που προέρχονται από δευτερεύουσα εκπομπή μέσα από το δείγμα. Αυτό που παρατηρούμε συγκρίνοντας τις δύο κατανομές είναι ότι στην περίπτωση $d=110\text{nm}$ παίρνουμε πολύ περισσότερα ηλεκτρόνια σε χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες (αναλογικά με τα ελαστικά ανακλώμενα). Κάτι τέτοιο είναι αναμενόμενο καθώς όταν η πρωτεύουσα δέσμη έχει μεγαλύτερη ενέργεια, υπάρχει μεγαλύτερη πιθανότητα διέγερσης και εξαγωγής εσωτερικών ηλεκτρονίων του δείγματος, που βρίσκονται σε χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες.

Τώρα μπορεί η διαδικασία της ενεργειακής ανάλυσης της δευτερεύουσας δέσμης να χρησιμοποιηθεί στην απεικόνιση του δείγματος. Μπορούν να κατασκευαστούν εικόνες του δείγματος οι οποίες προέρχονται από το σήμα που δίνουν ηλεκτρόνια συγκεκριμένων επιλεγμένων ενεργειακών περιοχών. Με τον τρόπο αυτό μπορεί να απομονωθεί ένα συγκεκριμένο χαρακτηριστικό του δείγματος, που πιθανώς συνδέεται με ηλεκτρόνια που προέρχονται από συγκεκριμένες ενεργειακές περιοχές, και να απεικονισθεί το δείγμα ως προς αυτό το χαρακτηριστικό.

Στο σχήμα 2.11 βλέπουμε μία πρώτη προσπάθεια της ερευνητικής ομάδας του ΕΤΗ να δημιουργήσει εικόνες του δείγματος από συγκεκριμένες ενεργειακές περιοχές. Οι τρεις εικόνες NFSESEM προέρχονται από δευτερεύοντα ηλεκτρόνια που βρίσκονται σε στενά «ενεργειακά παράθυρα» γύρω από τρεις διαφορετικές ενέργειες. Αυτό που παρατηρούμε στις εικόνες αυτές είναι ότι ο τρόπος που εμφανίζονται οι νησίδες εξαρτάται έντονα από το «ενεργειακό παράθυρο» από το οποίο λαμβάνεται το σήμα. Αν παρατηρήσουμε συγκεκριμένα την περιοχή με τις δύο νησίδες που τονίζονται από τα κίτρινα κουτιά, παρατηρούμε ότι στην περίπτωση των 19eV οριακά διακρίνεται κάτι, ενώ μεταξύ 7 και 19eV φαίνονται σχεδόν διαφορετικά σχήματα.



Σχήμα 2.11: [67] (Πάνω αριστερά) Εικόνα STM δείγματος GaAs(110) στο οποίο υπάρχουν νησίδες «ακαθαρσιών». (Κάτω αριστερά και δεξιά) Τρεις εικόνες NFESEM του ίδιου δείγματος όπως προκύπτουν από τη δέσμη δευτερευόντων ηλεκτρονίων απομονώνοντας τρεις διαφορετικές περιοχές. Η απόσταση είναι $d \sim 12\text{nm}$ και η επιβαλλόμενη τάση $V=22\text{V}$. Το πρωτεύον ρεύμα διατηρείται σταθερό μεταβάλλοντας κατάλληλα την απόσταση στα 200nA .

Η συγκεκριμένη τεχνική είναι ακόμα σε πρωταρχικό στάδιο. Είναι ωστόσο πολλά υποσχόμενη καθώς από τα πρώτα πειράματα φαίνεται η δυνατότητα απομόνωσης μίας συγκεκριμένης ιδιότητας και απεικόνισης του δείγματος ως προς αυτή. Επίσης η ανάλυση αυτή της δευτερεύουσας δέσμης δείχνει ότι είναι εφικτές και άλλου τύπου αναλύσεις της. Για παράδειγμα, σε επόμενο στάδιο, γίνεται προσπάθεια για ανάλυση των μαγνητικών ιδιοτήτων της δευτερεύουσας δέσμης με χρήση αναλυτή του Mott για το spin των ηλεκτρονίων. Κάτι τέτοιο θα δώσει νέες δυνατότητες στο NFESEM για ανάλυση των μαγνητικών ιδιοτήτων του δείγματος.

2.4. Συμπεράσματα

Εν κατακλείδι του κεφαλαίου, η ηλεκτρονική μικροσκοπία αποτελεί μία σημαντική σύγχρονη τεχνική παρατήρησης πολλών ειδών δειγμάτων σε νανομετρική κλίμακα, και είναι απαραίτητη σε πολλές επιστήμες. Το NFESSEM αποτελεί εξέλιξη του κλασσικού μικροσκοπίου σάρωσης SEM, και φαίνεται να έχει τη δυνατότητα να απεικονίσει δείγματα με ακρίβεια και ανάλυση σχεδόν ισάξια με το SEM, χρησιμοποιώντας απλούστερη και μικρότερου κόστους διάταξη.

Η ανάλυση της δευτερεύουσας δέσμης που προκύπτει από την αλληλεπίδραση της δέσμης πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων με το δείγμα, δίνει πολλαπλές δυνατότητες στο NFESSEM για μελέτη διαφορετικών ιδιοτήτων του δείγματος. Στο NFESSEM η πρωτεύουσα δέσμη προσπίπτει στο δείγμα προερχόμενη κατ' ευθείαν από τον εκπομπό ο οποίος βρίσκεται σε πολύ κοντινή απόσταση. Δεν υφίσταται κανενός είδους επεξεργασία και εστίαση όπως στις άλλες μορφές ηλεκτρονικής μικροσκοπίας.

Η κατάσταση λοιπόν της δέσμης όπως προκύπτει απ' ευθείας από τον εκπομπό είναι πολύ σημαντική για τη λειτουργία του NFESSEM. Η όσο το δυνατόν ακριβέστερη πρόβλεψη της κατανομής της δέσμης όπως αυτή προκύπτει από την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων θα βοηθούσε στην καλύτερη κατανόηση και περεταίρω ανάπτυξη των δυνατοτήτων του οργάνου. Κρίνεται λοιπόν απαραίτητη η ανάπτυξη της θεωρίας της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων ώστε να μπορεί να προβλέψει τα φαινόμενα που διέπουν τη λειτουργία του NFESSEM.

Στο επόμενο κεφάλαιο θα αναπτύξουμε τη θεωρία που είναι απαραίτητη για την πρόβλεψη της κατανομής της δέσμης του NFESSEM και θα δείξουμε ότι η διακριτική ικανότητα του οργάνου είναι αναμενόμενη, παρόλο που εκ πρώτης όψεως είναι ασύμβατη με την υπάρχουσα θεωρία.

Στο κεφάλαιο 4 θα παρουσιάσουμε και θα εξηγήσουμε το φαινόμενο της κλιμάκωσης που παρατηρείται στις ηλεκτρικές χαρακτηριστικές του NFESSEM. Το φαινόμενο αυτό δεν έχει άμεση σχέση με αυτή καθ' αυτή τη λειτουργία του οργάνου. Παρόλα αυτά αποκαλύπτει σημαντικές ιδιότητες της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων στο καθεστώς του εγγύς πεδίου οι οποίες έχουν ιδιαίτερο επιστημονικό ενδιαφέρον. Επίσης αναδεικνύουν πειραματικά τις αδυναμίες της κλασσικής θεωρίας F-N και δίνουν το έναυσμα για την επέκτασή της που θα αναπτυχθεί στο κεφάλαιο 5.

Κεφάλαιο 3: Υπολογισμοί της χωρικής κατανομής της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων

3.1. Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε ότι σε πολλές από τις τεχνολογικές εφαρμογές που βασίζονται στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων και ιδίως στην ηλεκτρονική μικροσκοπία, αποτελεί σημαντικότερη παράμετρο λειτουργίας η χωρική κατανομή του ρεύματος που εκπέμπεται από την κάθοδο. Το μέγεθος της δέσμης είναι αυτό που σε μεγάλο βαθμό καθορίζει την οριζόντια ανάλυση (lateral resolution – LR), δηλαδή τη διακριτική ικανότητα του οργάνου. Στις κλασσικές διατάξεις ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης (SEM) το εύρος της δέσμης που προσπίπτει στο δείγμα καθορίζεται κυρίως από τους ηλεκτρομαγνητικούς φακούς που χρησιμοποιούνται για την εστίασή της, ωστόσο στο SEM κοντινού πεδίου (NFESM) δεν υπάρχουν φακοί και συνεπώς καθορίζεται από την πρωτογενή εκπομπή.

Είναι, λοιπόν, εξαιρετικά σημαντικό να μπορεί να γνωρίζει κανείς τη χωρική κατανομή του ρεύματος. Ωστόσο, η θεωρία της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων δεν έχει ασχοληθεί αρκετά με το συγκεκριμένο ζήτημα, καθώς συνήθως ενδιαφέρεται για το σωστό υπολογισμό του συνολικού ρεύματος εκπομπής και όχι της κατανομής του στο χώρο. Οι διάφορες τρισδιάστατες επεκτάσεις της θεωρίας F-N, που παρουσιάσαμε στο κεφάλαιο 1 [44, 39, 38, 46], υπολογίζουν το ενεργό άνοιγμα της δέσμης. Παρόλα αυτά όλες χρησιμοποιούν μονοδιάστατη θεωρία JWKB ή ακόμα χειρότερα την εξίσωση F-N. Έτσι αποτυγχάνουν να αναδείξουν σημαντικά τρισδιάστατα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα μέσα στην απαγορευμένη περιοχή.

Στο κεφάλαιο αυτό θα χρησιμοποιήσουμε την τρισδιάστατη θεωρία JWKB [20, 27] που αναλύθηκε στο πρώτο κεφάλαιο για να υπολογίσουμε την τρισδιάστατη κατανομή στο χώρο του εκπεμπόμενου ρεύματος για διάφορες διατάξεις πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων. Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί σε 2 διατάξεις για τις οποίες οι υπολογισμοί συνδέονται με πειραματικά δεδομένα. Πιο συγκεκριμένα θα αναλυθεί το εύρος της δέσμης [69] στην άνοδο του NFESM και θα εξηγηθεί η μη αναμενόμενα (βάσει υπάρχουσας θεωρίας) καλή ανάλυσή του, και ταυτόχρονα θα αναδειχθεί το φαινόμενο της αυτοεστίασης των ηλεκτρονίων [70].

3.2. Το πρόβλημα της οριζόντιας ανάλυσης του NFESEM και η αυτοεστίαση των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων

Το NFESEM, όπως αναλύθηκε στο κεφάλαιο 2, δεν χρησιμοποιεί ηλεκτρομαγνητικούς φακούς για την εστίαση της δέσμης, αλλά λόγω του ότι η απόσταση εκπομπού-ανόδου d είναι 5-25nm, καταφέρνει πολύ καλές διακριτικές ικανότητες της τάξης των 2-10nm, ανάλογα με τα χαρακτηριστικά της διάταξης. Αυτό δείχνει ότι το εύρος της δέσμης που προσπίπτει στο δείγμα-άνοδο είναι στην περιοχή 1-9nm. Οι υπάρχουσες θεωρίες που αναλύουν την κατανομή του ρεύματος πεδιακής εκπομπής προβλέπουν πολύ μεγαλύτερα πλάτη δέσμης, κάτι το οποίο είναι ασύμβατο με τα πειραματικά δεδομένα που παίρνουμε από το NFESEM.

Πράγματι, στη θεωρία του Edgcombe που αναπτύχθηκε στο κεφάλαιο 1, αν λάβουμε τη σχέση (1.59) για μεταβολή σαν $\cos(\theta/2)$ έχουμε: $\Omega=8\pi/(5+Z)$. Η παράμετρος Z για συνήθεις τιμές παραμέτρων εκπομπής $W=4.5\text{eV}$, $F=5\text{V/nm}$, $R=4\text{nm}$, παίρνει την τιμή $Z=18.13$. Εισάγοντας την τιμή αυτή στην (1.59) παίρνουμε $\Omega\approx 1.1\text{sr}$. Το αποτέλεσμα αυτό θα λέγαμε ότι είναι αρκετά μικρή εκτίμηση, καθώς όπως εξηγεί ο Edgcombe στην [46], η πραγματική μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου με τη γωνία είναι πιο αργή από το $\cos(\theta/2)$. Η στερεά αυτή γωνία αντιστοιχεί σε επίπεδη γωνία ανοίγματος $\theta\approx 35^\circ$.

Αν η δέσμη έχει τέτοιο άνοιγμα, σε απόσταση $d=10\text{nm}$ θα έχει ένα εύρος $w=19\text{nm}$. Ένα τέτοιο εύρος δέσμης είναι παντελώς ασύμβατο με τη διακριτική ικανότητα του NFESEM, που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, η οποία είναι περίπου 1-4nm. Βλέπουμε, λοιπόν, ότι η εφαρμογή της απλουστευτικής θεωρίας του Edgcombe για την εύρεση της ενεργού γωνίας εκπομπής ή γενικότερα της χωρικής κατανομής του ρεύματος εκπομπής οδηγεί σε σοβαρές ασυμφωνίες με το πείραμα.

Από τη θεωρία των Zuber κ.α. [39] λαμβάνουμε αρκετά μικρότερο άνοιγμα δέσμης, αλλά και πάλι αρκετά μεγαλύτερο από αυτό που δείχνει το πείραμα. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (14) της [39] βρίσκουμε ότι η στερεά γωνία για τις ίδιες παραμέτρους που δώσαμε παραπάνω και για υπερβολοειδές με γωνία ανοίγματος 10° είναι $\Omega\approx 0.5\text{sr}$, που αντιστοιχεί σε $\theta\approx 23^\circ$ και $w\approx 12\text{nm}$. Αναζητούμε, λοιπόν, ποιες είναι εκείνες οι προσεγγίσεις της θεωρίας οι οποίες είναι λανθασμένες και οδηγούν σε αυτή την ασυμφωνία, και φυσικά εφαρμόζουμε τη σωστή θεωρία για να τις διορθώσουμε.

Η πρώτη προσέγγιση που γίνεται αφορά τη λύση του κβαντομηχανικού προβλήματος. Ο Edgcombe χρησιμοποιεί μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB, ενώ οι Zuber κ. α. χρησιμοποιούν επίπεδη θεωρία Fowler-Nordheim. Θεωρούν δηλαδή, ότι η καμπυλωμένη εκπέμπουσα επιφάνεια μπορεί να χωριστεί σε απειροστές επίπεδες επιφάνειες dS , και η εκπομπή από την κάθε τέτοια επιφάνεια να θεωρηθεί μονοδιάστατη. Ο Edgcombe εφαρμόζει μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB σε κάθε απειροστή επιφάνεια, ενώ οι Zuber κ. α. εφαρμόζουν (ακόμα πιο απλουστευτικά) την εξίσωση F-N θεωρώντας το πρόβλημα εντελώς επίπεδο. Η παραπάνω προσέγγιση ισχύει μόνο υπό την προϋπόθεση ότι η εκπέμπουσα επιφάνεια είναι σχεδόν επίπεδη σε σχέση με το μήκος που λαμβάνει χώρα το φαινόμενο σήραγγας. Κάτι τέτοιο ισχύει όταν το μήκος της κλασικά απαγορευμένης περιοχής L είναι αμελητέο σε σχέση με την ακτίνα καμπυλότητάς της R ($L \ll R$). Το L κυμαίνεται στις συνήθεις περιπτώσεις μεταξύ 0.5 και 2nm. Συνεπώς, για να ισχύει η παραπάνω προσέγγιση, θα πρέπει το R να είναι μεγαλύτερο από τουλάχιστον 20nm. Φυσικά, κάτι τέτοιο δεν ισχύει για τους σύγχρονους εκπομπούς όπως φαίνεται από εικόνες TEM και SEM που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο.

Η δεύτερη και η τρίτη προσέγγιση αφορούν το ηλεκτροστατικό δυναμικό το οποίο χρησιμοποιείται. Η θεωρία του Edgcombe χρησιμοποιεί σφαιρικό μοντέλο για την εκπέμπουσα επιφάνεια. Το μοντέλο αυτό δεν επαρκεί για την περιγραφή των πραγματικών ακίδων, καθώς αυτές είναι αρκετά πιο αιχμηρές. Θα δούμε παρακάτω ότι, όσο η επιφάνεια γίνεται περισσότερο μη-σφαιρική, τόσο μειώνεται το εύρος της δέσμης. Το υπερβολοειδές μοντέλο που χρησιμοποιείται από τους Zuber κ. α. δίνει αιχμηρότητα αντίστοιχη με αυτή που δίνουν τα ελλειψοειδή που θα χρησιμοποιήσουμε, και για το λόγο αυτό βλέπουμε ότι προβλέπει αρκετά μικρότερο εύρος δέσμης από το σφαιρικό. Μάλιστα, το γεγονός αυτό μας δίνει το έναυσμα να θεωρήσουμε ότι χρήση μη-σφαιρικού μοντέλου θα οδηγήσει σε μικρότερο εύρος δέσμης.

Ωστόσο, και οι δύο θεωρίες πάσχουν σε κάτι πολύ σημαντικό. Δεν έχουν ως ανεξάρτητη παράμετρο την απόσταση d μεταξύ ανόδου και καθόδου. Συγκεκριμένα το ηλεκτροστατικό μοντέλο που χρησιμοποιεί ο Edgcombe προβλέπει άπειρη απόσταση μεταξύ ανόδου και καθόδου, δηλαδή λειτουργεί στο καθεστώς του λεγόμενου μακρινού πεδίου (far-field regime). Αντίθετα, στο υπερβολοειδές μοντέλο των Zuber κ. α. γίνεται η υπόθεση ότι το υπερβολοειδές της καθόδου είναι συνεστιακό με το επίπεδο της ανόδου. Δηλαδή ο ασύμπτωτος κώνος έχει την κορυφή του στην άνοδο. Κάτι τέτοιο περιορίζει την ελευθερία στο σχήμα της καθόδου. Αν δηλαδή οριστούν η γωνία των ασυμπτώτων και η ακτίνα καμπυλότητας στην

κορυφή, έχει αυτομάτως ορισθεί και το σημείο της ανόδου. Στην παραπάνω περίπτωση, η απόσταση αυτή προκύπτει $d \approx 130\text{nm}$, δηλαδή βρισκόμαστε και πάλι στο καθεστώς μακρινού πεδίου δεδομένου ότι $d \gg R$. Όπως θα δούμε στους υπολογισμούς που παρουσιάζονται παρακάτω, όσο μειώνεται η απόσταση d , τόσο μειώνεται και το άνοιγμα της δέσμης.

Αναζητούμε, λοιπόν, ένα μοντέλο το οποίο να μπορεί να απαντά και στα δύο παραπάνω προβλήματα και να μην χρησιμοποιεί τις απλουστευτικές προσεγγίσεις. Επίσης πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τρισδιάστατη θεωρία για το πρόβλημα της σήραγγας.

Χρησιμοποιώντας στοιβα ελλειψοειδών για να μοντελοποιήσουμε τις αιχμηρές ακίδες που χρησιμοποιούνται για εκπομπή, αναλύουμε με χρήση της τρισδιάστατης μεθόδου JWKB την κατανομή της δέσμης που εκπέμπεται. Τα ελλειψοειδή έχουν δύο ακτίνες οι οποίες είναι ελεύθερες παράμετροι, ενώ η απόσταση από την άνοδο ορίζεται κι αυτή ελεύθερα. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να έχουμε μεγάλο εύρος γεωμετριών που καλύπτονται.

Επιπροσθέτως, η τρισδιάστατη μέθοδος JWKB έχει το πλεονέκτημα ότι λαμβάνει υπ' όψιν την καμπύλωση της τροχιάς των ηλεκτρονίων στην απαγορευμένη περιοχή σε αντίθεση με οποιαδήποτε μονοδιάστατη μέθοδο η οποία θεωρεί ότι η εκπομπή προέρχεται από επίπεδα τμήματα και τα ηλεκτρόνια ακολουθούν ευθείες τροχιές. Μέσα από την ανάλυση αυτή [70] δείχνουμε ότι η δέσμη είναι στην πραγματικότητα πολύ μικρότερη από αυτήν που προβλέπεται από την υπάρχουσα θεωρία, καθώς τα ηλεκτρόνια αυτοεστιάζονται (self-focusing) λόγω δύο φαινομένων: 1) της μείωσης της περιοχής από την οποία εκπέμπονται ηλεκτρόνια όσο αυξάνει η εκκεντρότητα του ελλειψοειδούς, δηλαδή ο εκπομπός γίνεται μη-σφαιρικός και 2) την καμπύλωση της τροχιάς των ηλεκτρονίων εντός της απαγορευμένης περιοχής προς τον άξονα της εκπομπής, γεγονός που μειώνει το εύρος της δέσμης σε σχέση με τη μονοδιάστατη θεωρία. Στην επόμενη ενότητα, θα δούμε αναλυτικά την εφαρμογή της θεωρίας αυτής και τα αποτελέσματα που δίνει για τις σχεδιαστικές παραμέτρους.

3.3. Εύρος ίχνους δέσμης στην άνοδο του NFESEM

3.3.1. Γεωμετρικό μοντέλο και ηλεκτροστατικό δυναμικό

Η αρχική ιδέα του μοντέλου που χρησιμοποιούμε είναι ότι τα γεωμετρικά στοιχεία που καθορίζουν τις συνοριακές συνθήκες του ηλεκτροστατικού προβλήματος μπορούν να προσομοιωθούν ως άθροισμα γεωμετρικών σχημάτων, για τα οποία γνωρίζουμε τη γενική λύση της Laplace, που ικανοποιεί οποιαδήποτε συνοριακή συνθήκη στην επιφάνειά τους. Τέτοια σχήματα είναι οι σφαίρες και τα ελλειψοειδή, τα οποία μπορούν να προσομοιώσουν το σχήμα των αιχμηρών ακίδων που χρησιμοποιούνται ως εκπομποί.

Αν έχουμε ένα επίμηκες ελλειψοειδές (prolate ellipsoid) κάπου στο χώρο σε πρόβλημα με κυλινδρική συμμετρία, τότε η γενική λύση της εξίσωσης Laplace σε επιμήκεις σφαιροειδείς συντεταγμένες (prolate spheroidal coordinate) είναι η εξής:

$$\Phi(\eta, u) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n Q_n(\cosh \eta) P_n(\cos u). \quad (3.1)$$

Στην παραπάνω εξίσωση, (η, u) είναι οι σφαιροειδείς συντεταγμένες [71] με αρχή το κέντρο του ελλειψοειδούς, και C_n είναι οι συντελεστές ανάπτυξης, οι οποίοι καθορίζονται από τις εκάστοτε συνοριακές συνθήκες πάνω στην επιφάνεια του ελλειψοειδούς. P_n και Q_n είναι οι συναρτήσεις Legendre πρώτου και δεύτερου είδους αντίστοιχα [72]. Το ελλειψοειδές στις σφαιροειδείς συντεταγμένες περιγράφεται από επιφάνεια σταθερού η , δηλαδή από τη σχέση $\eta = \eta_0$. Το αντίστοιχο ανάπτυγμα για μία σφαίρα είναι:

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n r^{-n-1} P_n(\cos \theta) \quad (3.2)$$

με (r, θ) τις σφαιρικές συντεταγμένες με αρχή το κέντρο της σφαίρας. Οι συναρτήσεις που περιλαμβάνονται στο άθροισμα των (3.1) και (3.2) ονομάζονται και σφαιροειδείς και σφαιρικές αρμονικές αντίστοιχα.

Έστω τώρα ότι υπάρχουν N αντικείμενα στο χώρο. Για το κάθε αντικείμενο η γενική λύση είναι $\Phi_i = \sum_n C_{in} \Psi_{in}$ όπου Ψ_{in} η n -στης τάξης αρμονική για το i -στο αντικείμενο. Η γενική λύση του προβλήματος θα δίνεται τότε από το άθροισμα των Φ_i . Αυτό ισχύει, διότι από τη στιγμή που η κάθε Φ_i μπορεί να ικανοποιήσει οποιαδήποτε συνοριακή συνθήκη στην επιφάνεια του i -στού γεωμετρικού στοιχείου, θα μπορεί να ικανοποιήσει και τη συνθήκη που

θα επιβάλουμε αθροισμένη με τα δυναμικά που προκαλούν πάνω στην επιφάνεια του γεωμετρικού στοιχείου όλα τα υπόλοιπα στοιχεία.

Αν, λοιπόν, έχουμε ένα σύνολο από M σφαίρες και N ελλειψοειδή που βρίσκονται στο χώρο, όλα γύρω από τον ίδιο άξονα κυλινδρικής συμμετρίας, η γενική λύση του ηλεκτροστατικού προβλήματος που μπορεί να ικανοποιήσει οποιαδήποτε συνοριακή συνθήκη στις επιφάνειες των γεωμετρικών στοιχείων είναι:

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} C_{in} Q_n(\cosh \eta_i) P_n(\cos u_i) + \sum_{i=1}^M \sum_{n=0}^{\infty} D_{in} r_i^{-n-1} P_n(\cos \theta_i) \quad (3.3)$$

όπου οι συντεταγμένες (η_i, u_i) είναι τέτοιες ώστε το i -στο ελλειψοειδές να περιγράφεται από τη σχέση $\eta_i = \text{σταθερό}$. Αντίστοιχα οι σφαιρικές συντεταγμένες (r_i, θ_i) ξεκινούν από το κέντρο της i -στης σφαίρας.

Σε ένα δεδομένο πρόβλημα, που έχουμε τοποθετήσει γεωμετρικά στοιχεία όπως περιγράψαμε παραπάνω, για να έχουμε τη λύση θα πρέπει να βρούμε τους συντελεστές ανάπτυξης. Αυτό μπορεί να γίνει αριθμητικά χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της προσαρμογής σημείων (point matching): το άπειρο άθροισμα κόβεται σε έναν αριθμό, έστω K , και επιβάλλοντας σε $(N+M) \times K$ σημεία την επιθυμητή τιμή του δυναμικού λαμβάνουμε $(N+M) \times K$ γραμμικές εξισώσεις με $(N+M) \times K$ αγνώστους. Για τους υπολογισμούς που γίνονται σε αυτή τη διατριβή χρησιμοποιήθηκε $K=12$ το οποίο δίνει πολύ μεγάλη ακρίβεια. Η παραπάνω μέθοδος για την επίλυση του ηλεκτροστατικού προβλήματος αποτελεί γενίκευση της μεθόδου που χρησιμοποιήθηκε στην [73].

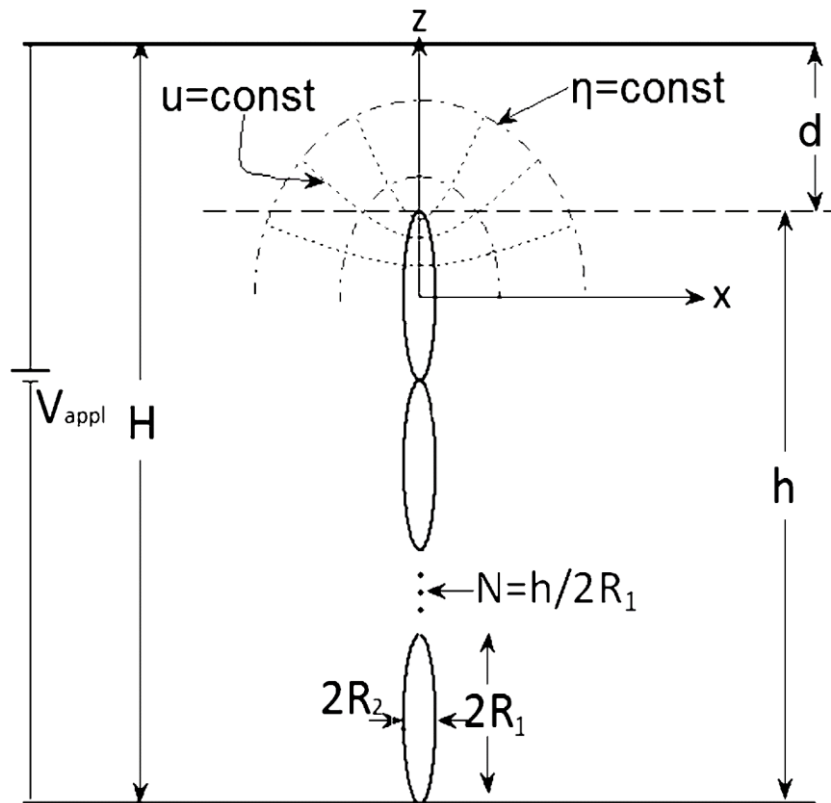
Για να προσομοιωθούν οι αιχμηρές ακίδες που χρησιμοποιούνται ως εκπομποί στο NFESSEM, θεωρούμε τη διάταξη του σχήματος 3.1 [69]. Μία στοίβα από ελλειψοειδή βρίσκεται πάνω σε ένα επίπεδο και σε απόσταση d από το επίπεδο της ανόδου. Τα ελλειψοειδή και το επίπεδο που ακουμπούν είναι η κάθοδος και βρίσκονται σε δυναμικό $\Phi=0$. Το επίπεδο απέναντι είναι η άνοδος και βρίσκεται σε δυναμικό $\Phi=V$. Τα δύο επίπεδα, τώρα, μένει να δειχθεί πώς θα προσομοιωθούν, καθώς ως γεωμετρικά στοιχεία, δεν είναι ούτε σφαίρες ούτε ελλειψοειδή. Το επίπεδο της καθόδου μπορεί να αντικατασταθεί με μία σφαίρα της οποίας η ακτίνα είναι πολύ μεγαλύτερη από τη μεγαλύτερη διάσταση του προβλήματος (το ύψος H). Εδώ για λόγους απλότητας, αντί για σφαίρα θα χρησιμοποιηθεί ελλειψοειδές με σχεδόν μηδενική εκκεντρότητα και μικρή ακτίνα $R_2=100H$.

Για να προσομοιωθεί το επίπεδο της ανόδου υπάρχει μία πιο αποδοτική λύση. Τοποθετούνται συμμετρικά ως προς το επίπεδο της ανόδου γεωμετρικά στοιχεία-είδωλα των

ελλειψοειδών και των σφαιρών. Θέτουμε ότι τα εικονικά στοιχεία βρίσκονται σε δυναμικό V και ότι η κάθοδος βρίσκεται σε δυναμικό $-V$. Τότε, αυτόματα το επίπεδο συμμετρίας (η πραγματική άνοδος) βρίσκεται σε δυναμικό 0 . Φυσικά, οι συντελεστές ανάπτυξης των ειδώλων θα είναι αντίθετοι από τους συντελεστές ανάπτυξης των αρχικών στοιχείων. Έτσι, η τελική εξίσωση για τη γενική λύση του προβλήματος είναι:

$$\Phi(r, \theta) = V + \sum_{i=1}^N \sum_{n=0}^K C_{in} \left(Q_n(\cosh \eta_i) P_n(\cos u_i) - Q_n(\cosh \eta_i^m) P_n(-\cos \theta_i^m) \right) + \sum_{n=0}^K D_n \left(r^{-n-1} P_n(\cos \theta) - (r^m)^{-n-1} P_n(-\cos \theta^m) \right) \quad (3.4)$$

όπου οι συντεταγμένες με εκθέτη m αντιστοιχούν στα γεωμετρικά στοιχεία-είδωλα. (r, θ) είναι φυσικά οι συντεταγμένες που αντιστοιχούν στην μεγάλη σφαίρα που αντικαθιστά το επίπεδο της καθόδου.

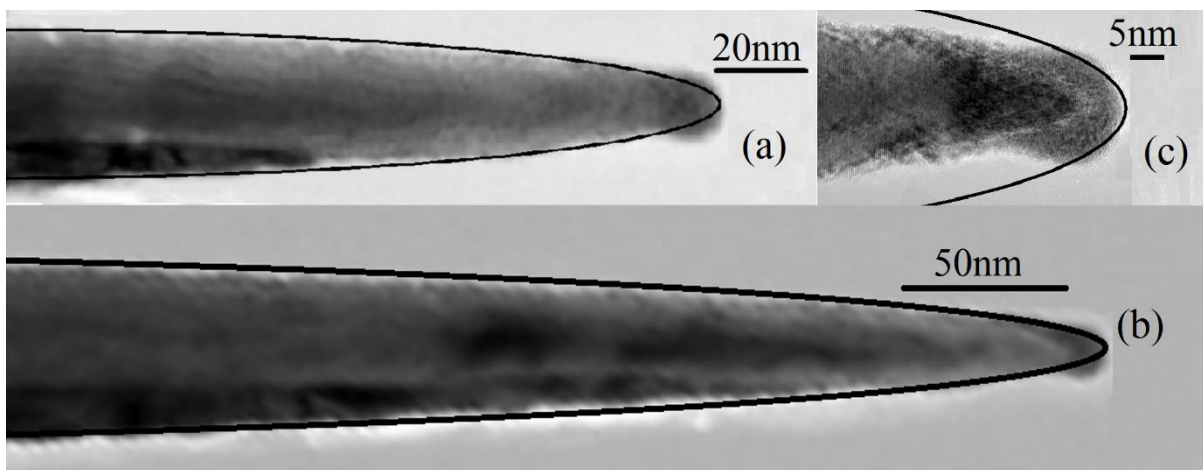


Σχήμα 3.1: Γεωμετρία και συντεταγμένες.

Για να βρούμε τους συντελεστές ανάπτυξης $((N+1) \times K$ τον αριθμό) παίρνουμε $(N+1) \times K$ σημεία στην κάθοδο και εξισώνουμε το ανάπτυγμα (3.4) με 0 . Αυτό οδηγεί σε $(N+1) \times K$ γραμμικές εξισώσεις με ίσο αριθμό αγνώστων. Το γραμμικό σύστημα λύνεται εύκολα με χρήση αριθμητικής μεθόδου που παρέχει έτοιμη το υπολογιστικό πακέτο MatLab

(Όλα τα προγράμματα MatLab που γράφτηκαν και χρησιμοποιήθηκαν δίνονται στο παράρτημα Α).

Αυτό που μένει τώρα, για να εφαρμόσουμε την παραπάνω μέθοδο, είναι η επιλογή των παραμέτρων της γεωμετρίας. Πρέπει να επιλεχθούν τα μεγέθη των ελλειψοειδών, δηλαδή οι ακτίνες $R_{1,2}$ όπως επίσης και ο αριθμός N των ελλειψοειδών (που με τη σειρά του καθορίζει το ύψος h) αλλά και η απόσταση d . Οι ακτίνες $R_{1,2}$, καθορίζουν τη γεωμετρία του προβλήματος στην περιοχή που είναι η πιο σημαντική για την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων, κοντά δηλαδή στην κορυφή της ακίδας από όπου προέρχεται η ηλεκτρονική δέσμη. Για να βρούμε ποιες ακτίνες ελλειψοειδών αντιπροσωπεύουν καλύτερα τις πραγματικές ακίδες, παίρνουμε μία εικόνα μικροσκοπίου TEM από μία αντιπροσωπευτική ακίδα αυτών που χρησιμοποιούνται στο NFESEM [66]. Η εικόνα αυτή φαίνεται στο σχήμα 3.2, μαζί με ελλειψοειδή τριών διαφορετικών γεωμετριών τα οποία έχουμε ταιριάξει στο σχήμα της ακίδας: (a) $R_1=170\text{nm}$, $R_2=17\text{nm}$), (b) $R_1=650\text{nm}$, $R_2=30\text{nm}$ και (c) $R_1=100\text{nm}$, $R_2=20\text{nm}$. Κάθε ελλειψοειδές ταιριάζει και σε διαφορετική κλίμακα μεγέθους της ακίδας.

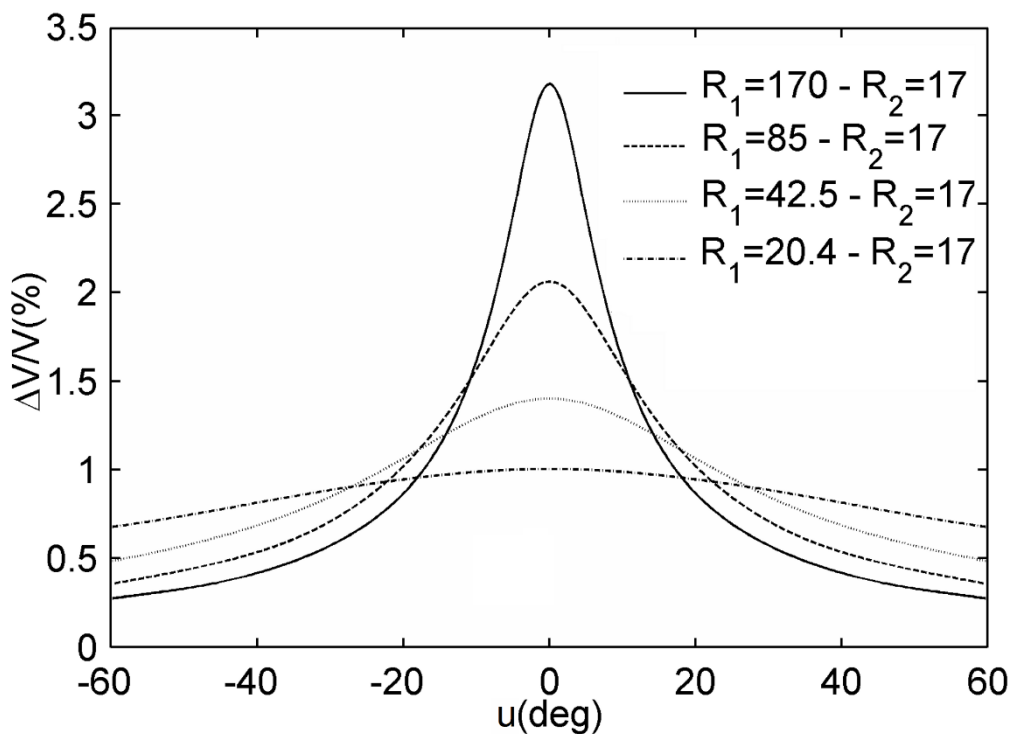


Σχήμα 3.2: Εικόνες από μικροσκόπιο TEM μίας αντιπροσωπευτικής ακίδας του NFESEM, μαζί με ελλειψοειδή που έχουμε ταιριάξει στο σχήμα του. Οι ακτίνες των ελλειψοειδών είναι (a) $R_1=170\text{nm}$, $R_2=17\text{nm}$), (b) $R_1=650\text{nm}$, $R_2=30\text{nm}$ και (c) $R_1=100\text{nm}$, $R_2=20\text{nm}$.

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω παραμέτρους θα υπολογίσουμε το άνοιγμα της δέσμης και πώς μεταβάλλεται αυτό συναρτήσει των παραμέτρων. Πρώτα όμως ας δούμε πώς συμπεριφέρεται το ηλεκτροστατικό δυναμικό συναρτήσει της γεωμετρίας των ελλειψοειδών. Στο σχήμα 3.3 βλέπουμε την γωνιακή μεταβολή (συναρτήσει της συντεταγμένης u) του ηλεκτροστατικού δυναμικού 0.1nm μακριά από τον εκπομπό για διάφορες γεωμετρίες ελλειψοειδών. Η ποσότητα αυτή είναι ανάλογη με το μέσο ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια

του εκπομπού. Κρατάμε σταθερή την ακτίνα $R_2=17\text{nm}$ και μεταβάλλουμε την ακτίνα R_1 από 20.4nm μέχρι 170nm . Δηλαδή, κρατάμε σταθερή τη μικρή ακτίνα και μεταβάλλουμε την εκκεντρότητα του ελλειψοειδούς ή το λόγο $S=R_1/R_2$, τον οποίο αποκαλούμε «αιχμηρότητα» (sharpness) [69] που κατά κάποιο τρόπο αποτελεί μέτρο του πόσο μη-σφαιρικό είναι το ελλειψοειδές.

Αυτό που παρατηρούμε είναι ότι όσο αυξάνει η αιχμηρότητα-εκκεντρότητα του ελλειψοειδούς, το πεδίο πέφτει πιο γρήγορα με τη γωνιακή συντεταγμένη u . Δηλαδή, όσο αυξάνει η εκκεντρότητα, το ηλεκτρικό γίνεται ισχυρότερο κατά μήκος του άξονα και πιο αδύναμο στα πλάγια, κάτι που σημαίνει ότι το ρεύμα εκπομπής θα είναι πιο συγκεντρωμένο στον άξονα. Το αποτέλεσμα αυτό δικαιολογεί την επιλογή μας να προσομοιάσουμε τις ακίδες με ελλειψοειδή, δεδομένου ότι, όπως είδαμε παραπάνω, η προσομοίωση με σφαιρική επιφάνεια προβλέπει πολύ μεγαλύτερο άνοιγμα δέσμης από αυτό που παρατηρείται πειραματικά. Η συμπεριφορά του ηλεκτροστατικού δυναμικού δίνει ήδη την τάση που θα έχει το άνοιγμα της δέσμης στην άνοδο συναρτήσει των γεωμετρικών παραμέτρων.



Σχήμα 3.3: Μεταβολή του ηλεκτροστατικού δυναμικού 0.1nm μακριά από τον εκπομπού συναρτήσει της σφαιροειδούς συντεταγμένης u για τέσσερις διαφορετικές εκκεντρότητες ελλειψοειδών.

3.3.2. Εφαρμογή της τρισδιάστατης προσέγγισης JWKB – μονοπάτια στην απαγορευμένη περιοχή

Για να βρούμε τώρα την πυκνότητα ρεύματος σήραγγας εφαρμόζουμε την τρισδιάστατη μέθοδο JWKB όπως αυτή αναπτύχθηκε στην παράγραφο 1.2.3. Πρώτα, όμως, πρέπει να γράψουμε το φράγμα δυναμικού το οποίο, αν έχουμε λύσει το ηλεκτροστατικό πρόβλημα και έχουμε βρει το Φ , γράφεται σε αντιστοιχία με την (1.53):

$$U(\eta, u) = W - e\Phi - 4bR[r^2 - R^2]^{-1} - E. \quad (3.5)$$

Στην (3.5) R είναι η ακτίνα καμπυλότητας του ελλειψοειδούς στην κορυφή του $R=(R_2)^2/R_1$ και r η απόσταση από το κέντρο καμπυλότητας. Με (η, u) συμβολίζουμε τις σφαιροειδείς συντεταγμένες που αντιστοιχούν στο πρώτο ελλειψοειδές από το οποίο προέρχεται το ρεύμα. Για την περιγραφή του εικονικού δυναμικού θεωρούμε ότι είναι επαρκές το εικονικό δυναμικό που αντιστοιχεί στην σφαίρα καμπυλότητας στην κορυφή του εκπομπού. Για ακτίνες καμπυλότητας μεγαλύτερες από 1nm έχουμε πράγματι επιβεβαιώσει αριθμητικά ότι το σφαιρικό εικονικό δυναμικό σχεδόν ταυτίζεται με το αντίστοιχο υπερβολοειδές που υπολογίζουν οι He κ.α. [41].

Θεωρούμε τώρα ότι τα ηλεκτρόνια προσπίπτουν κάθετα στην επιφάνεια του εκπομπού. Για να βρούμε το συντελεστή διέλευσης, επιλύουμε το πρόβλημα κλασσικής μηχανικής με αντεστραμμένο το φράγμα και αρχική συνθήκη ότι το μονοπάτι ξεκινάει κάθετα στην απαγορευμένη περιοχή. Έτσι, προσδιορίζουμε το ηλεκτρονικό μονοπάτι στην απαγορευμένη περιοχή και βρίσκουμε το συντελεστή διέλευσης βάσει των (1.39-1.40).

Έπειτα, συνεχίζουμε το μονοπάτι στην προσβάσιμη περιοχή επιλύοντας τις εξισώσεις της κλασσικής μηχανικής, πάλι με αρχική συνθήκη την καθετότητα στην επιφάνεια καμπής της απαγορευμένης περιοχής. Το μονοπάτι συνεχίζεται προς την άνοδο συγκλίνοντας ελαφρώς προς τον άξονα. Στο σημείο που βρίσκει την άνοδο θεωρούμε ότι προσπίπτει πυκνότητα ρεύματος ίση με αυτή που αντιστοιχεί στο συγκεκριμένο μονοπάτι. Φυσικά, ξεκινώντας από διαφορετικό σημείο (που καθορίζεται από την πλάγια συντεταγμένη u πάνω στην επιφάνεια του εκπομπού $\eta=\eta_0$) βρίσκουμε ένα διαφορετικό μονοπάτι το οποίο καταλήγει σε διαφορετικό σημείο της ανόδου. Σε κάθε τέτοιο μονοπάτι αντιστοιχεί και ένας συντελεστής διέλευσης και αν εφαρμόσουμε την (1.46) βρίσκουμε και την αντίστοιχη πυκνότητα ρεύματος.

Εδώ, βέβαια, έχουμε θεωρήσει ότι το ηλεκτρονικό μονοπάτι είναι ίδιο για όλες τις ενέργειες, κάτι το οποίο δεν ισχύει εν γένει. Ωστόσο, οι ενέργειες που συμμετέχουν στο ρεύμα

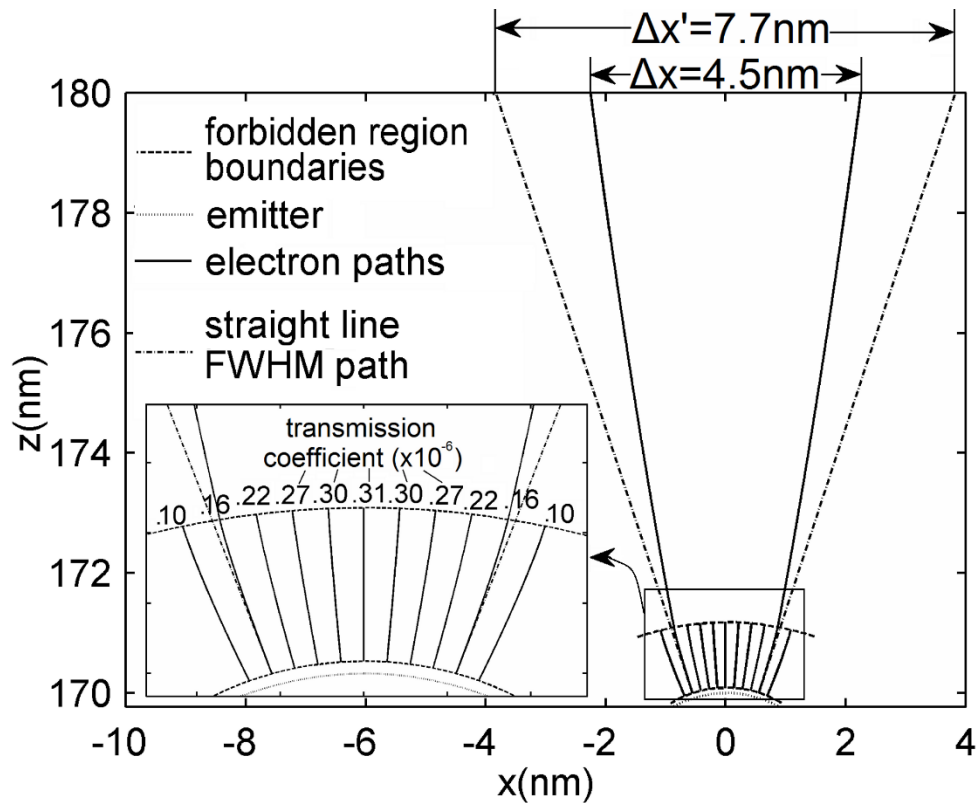
βρίσκονται σε απόσταση το πολύ 0.5eV από την ενέργεια Fermi. Συνεπώς θεωρούμε ότι το μονοπάτι που αντιστοιχεί στην ενέργεια Fermi είναι το πιο αντιπροσωπευτικό τους, μια και τα μονοπάτια των υπόλοιπων ενεργειών θα διαφέρουν ελάχιστα από αυτό.

Για την εύρεση των μονοπατιών επιλύουμε τη συνήθη διαφορική εξίσωση που καθορίζει το μονοπάτι $z(x)$ στο επίπεδο x - z (λόγω κυλινδρικής συμμετρίας, αρκεί να εργαστούμε στο επίπεδο αυτό). Η εξίσωση αυτή προκύπτει άμεσα από το 2^ο νόμο του Newton και είναι:

$$\frac{d^2 z}{dx^2} = \frac{1 + \left(\frac{dz}{dx}\right)^2}{2(U - E)} \left(\frac{\partial U}{\partial z} - \frac{dz}{dx} \frac{\partial U}{\partial x} \right). \quad (3.6)$$

Η (3.6) είναι ίδια και εντός και εκτός απαγορευμένης περιοχής.

Στο σχήμα 3.4 βλέπουμε αποτελέσματα από υπολογισμούς μονοπατιών για το ελλειψοειδές με ακτίνες $R_1=170\text{nm}$, $R_2=17\text{nm}$ και $d=10\text{nm}$. Η επιβαλλόμενη τάση έχει επιλεγεί έτσι ώστε το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο στην κορυφή της ακίδας να είναι $F=5\text{V/nm}$, κάτι το οποίο επιλέγεται έτσι σε όλους τους υπολογισμούς που θα ακολουθήσουν. Ο αριθμός που συνοδεύει κάθε μονοπάτι αντιστοιχεί στο συντελεστή διέλευσης. Θέτοντας ως όριο για το άνοιγμα της δέσμης το όριο ημίσεος μεγίστου (Full Width at Half Maximum-FWHM), επεκτείνουμε το μονοπάτι για το οποίο ο συντελεστής διέλευσης γίνεται μισός του μεγίστου μέχρι την άνοδο. Βλέπουμε ότι το άνοιγμα της δέσμης στην άνοδο είναι 4.5nm, συμβατό με τις πειραματικές παρατηρήσεις για τη διακριτική ικανότητα του NFESSEM.



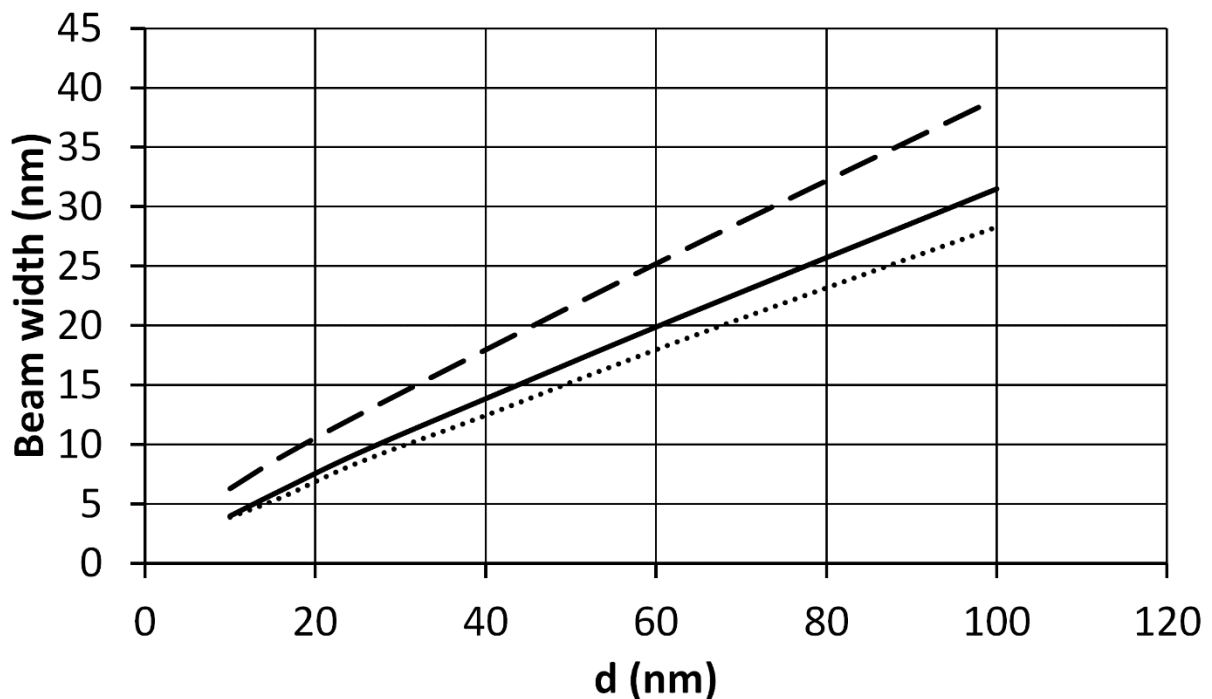
Σχήμα 3.4: Υπολογιζόμενα μονοπάτια και ο αντίστοιχος συντελεστής διέλευσης. Το μονοπάτι FWHM εκτείνεται στην προσβάσιμη περιοχή μέχρι την άνοδο. Μία ευθεία γραμμή στην κατεύθυνση εκκίνησης του μονοπατιού FWHM σχεδιάζεται για να τονίσει την καμπύλωση των μονοπατιών και τη μείωση του ανοίγματος της δέσμης σε σχέση με τη μονοδιάστατη μέθοδο JWKB.

Για να δείξουμε το κατά πόσον η χρήση τρισδιάστατης θεωρίας JWKB μειώνει την πρόβλεψη του ανοίγματος της δέσμης, επεκτείνουμε σε ευθεία γραμμή το μονοπάτι FWHM στην κατεύθυνση εκκίνησής του από τον εκπομπό. Κατά προσέγγιση η ευθεία αυτή μας δείχνει το άνοιγμα της δέσμης, αν ακολουθούσαμε μεθοδολογία παρόμοια με του Edgcombe, στην οποία θεωρείται ότι σε κάθε κατεύθυνση τα ηλεκτρόνια κινούνται ευθεία και εφαρμόζεται μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB. Βλέπουμε ότι η καμπύλωση του μονοπατιού μέσα στην απαγορευμένη περιοχή –γίνεται εμφανής στην εστιασμένη ένθετη εικόνα– αθροιζόμενη με μία μικρή καμπύλωση στην προσβάσιμη περιοχή, είναι αρκετή για να μειώσει το άνοιγμα της δέσμης στην άνοδο κατά 40%.

3.3.3. Αποτελέσματα: Το άνοιγμα της δέσμης συναρτήσει των παραμέτρων του NFESEM

Αν κάνουμε τον ίδιο υπολογισμό του σχήματος 3.4 τοποθετώντας την άνοδο πολύ μακριά από την κάθοδο ($d \gg h$), δηλαδή στην διάταξη του SEM, βρίσκουμε άνοιγμα δέσμης σε απόσταση 10nm από την ακίδα 5nm, 20% μεγαλύτερο από αυτό του σχήματος 3.4. Αυτή η μικρή διαφοροποίηση μπορεί εύκολα να εξηγηθεί βάσει της ηλεκτροστατικής. Όταν είμαστε στη διάταξη κοντινού πεδίου, οι δυναμικές γραμμές πρέπει σε μικρή απόσταση (στην άνοδο) να γίνουν κατακόρυφες. Αυτό αυξάνει την προς τον άξονα καμπύλωσή τους και κατά συνέπεια αυξάνει την αντίστοιχη καμπύλωση στα ηλεκτρονικά μονοπάτια, αλλά και την ταχύτητα μείωσης του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια του εκπομπού, καθώς απομακρυνόμαστε από τον άξονα. Αντίθετα, στην περίπτωση του μακρινού πεδίου οι δυναμικές γραμμές «έχουν» πολύ χώρο για να μπορέσουν να γίνουν κατακόρυφες και συνεπώς δεν συγκλίνουν τόσο έντονα και γρήγορα προς τον άξονα.

Το αποτέλεσμα αυτό φαίνεται και στο σχήμα 3.5 όπου σχεδιάζουμε το άνοιγμα της δέσμης συναρτήσει της απόστασης της ανόδου από την ακίδα για τις τρεις διαφορετικές περιπτώσεις ελλειψοειδών που ταιριάξαμε στην πραγματική ακίδα στο σχήμα 3.2. Αυτό που βλέπουμε είναι μία περίπου γραμμική εξάρτηση, όπως θα περιμέναμε, αν το γωνιακό άνοιγμα της δέσμης ήταν το ίδιο για όλες τις αποστάσεις. Ωστόσο, βλέπουμε ότι οι καμπύλες έχουν μία ελαφριά καμπύλωση προς τα κάτω, η οποία οφείλεται στο φαινόμενο που περιγράψαμε παραπάνω. Το γενικότερο συμπέρασμα είναι ότι, όταν η άνοδος πλησιάζει την ακίδα, η δέσμη στην άνοδο γίνεται μικρότερη για δύο λόγους. Ο πρώτος και βασικότερος είναι ότι δεδομένης της στερεάς γωνίας ανοίγματος, η δέσμη έχει μικρότερο χώρο για να ανοίξει. Ο δεύτερος είναι ότι το γωνιακό άνοιγμα της δέσμης μειώνεται λόγω του ηλεκτροστατικού φαινομένου που περιγράψαμε στην παραπάνω παράγραφο.



Σχήμα 3.5: Άνοιγμα της δέσμης στην άνοδο συναρτῆσει της απόστασης ανόδου-καθόδου d . Οι τρεις διαφορετικές καμπύλες αντιστοιχούν στα τρία διαφορετικά ελλειψοειδή του σχήματος 3.2. Η διακεκομμένη αντιστοιχεί στις ακτίνες $R_1=100$, $R_2=20$, η συμπαγής στις $R_1=170$, $R_2=17$ και η γραμμῆ με τις τελείες στις $R_1=650$, $R_2=30$.

Ας δούμε τώρα πιο προσεκτικά τα αποτελέσματα του σχήματος 3.5 και ας εστιάσουμε αρχικά στις δύο γραμμές που αντιστοιχούν στις προσαρμογές (a) και (b) του σχήματος 3.2. Τα ελλειψοειδή αυτά προσαρμόζονται καλά στην ακίδα για μία εκτεταμένη περιοχή της ακίδας. Μία κλίση περίπου 0.33 περιγράφει την καμπύλη της προσαρμογής (a). Αυτή η κλίση είναι πολύ μικρότερη από την αντίστοιχη των 1.65 που υπολογίστηκε από τον Kirk [65] χρησιμοποιώντας τη θεωρία του Edgcombe [46] και την ενεργό στερεά γωνία.

Η διακριτική ικανότητα της συγκεκριμένης ακίδας στα $d=25\text{nm}$ υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας ένα «σκαλί» στο δείγμα στα 6.8nm [65]. Το άνοιγμα της δέσμης που αντιστοιχεί στην συμπαγή γραμμῆ του σχήματος 3.5 είναι 9nm σε πολύ καλή συμφωνία με τη μέτρηση της διακριτικής ικανότητας. Βεβαίως, δεν είναι δυνατόν να υπάρξει 100% ταύτιση της θεωρητικής και της πειραματικής τιμής επειδή η διακριτική ικανότητα δεν ορίζεται εν γένει αυστηρά και υπάρχουν διάφοροι τρόποι να τη μετρήσει κανείς όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο.

Η πειραματική μέτρηση της διακριτικής ικανότητας είναι εντελώς διαφορετική φυσική ποσότητα από το FWHM άνοιγμα της δέσμης που υπολογίζουμε θεωρητικά εδώ, αν και είναι γενικώς παραδεκτό στη θεωρία του SEM ότι οι δύο ποσότητες είναι πολύ κοντά μεταξύ τους.

Αυτό που είναι σίγουρα απαραίτητο για να υπάρχει συμφωνία θεωρίας-πειράματος είναι η διακριτική ικανότητα και το άνοιγμα της δέσμης να είναι της ίδιας τάξης μεγέθους. Σίγουρα μία διαφορά ενός παράγοντα 7 που προβλέπεται από τη σφαιρική θεωρία είναι παντελώς ασύμβατη με το πείραμα.

Το ελλειψοειδές (c) που αντιστοιχεί στη διακεκομμένη γραμμή αντιπροσωπεύει καλά μόνο ένα μικρό τμήμα του εκπομπού κοντά στην κορυφή, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.2. Το άνοιγμα δέσμης που αντιστοιχεί στα $d=25\text{nm}$ είναι $w=12.5\text{nm}$. Σχεδόν το διπλάσιο της πειραματικής τιμής των 6.8nm , που αναφέραμε παραπάνω. Βέβαια αυτό δεν σημαίνει απαραίτητα ασυμφωνία αλλά υποδεικνύει ότι οι προσαρμογές (a) και (b) είναι καταλληλότερες για την περιγραφή της ακίδας, λόγω του ότι ταιριάζουν σε μεγαλύτερο μέρος της δείχνοντας ότι κάτι τέτοιο είναι πιθανότατα σημαντικό.

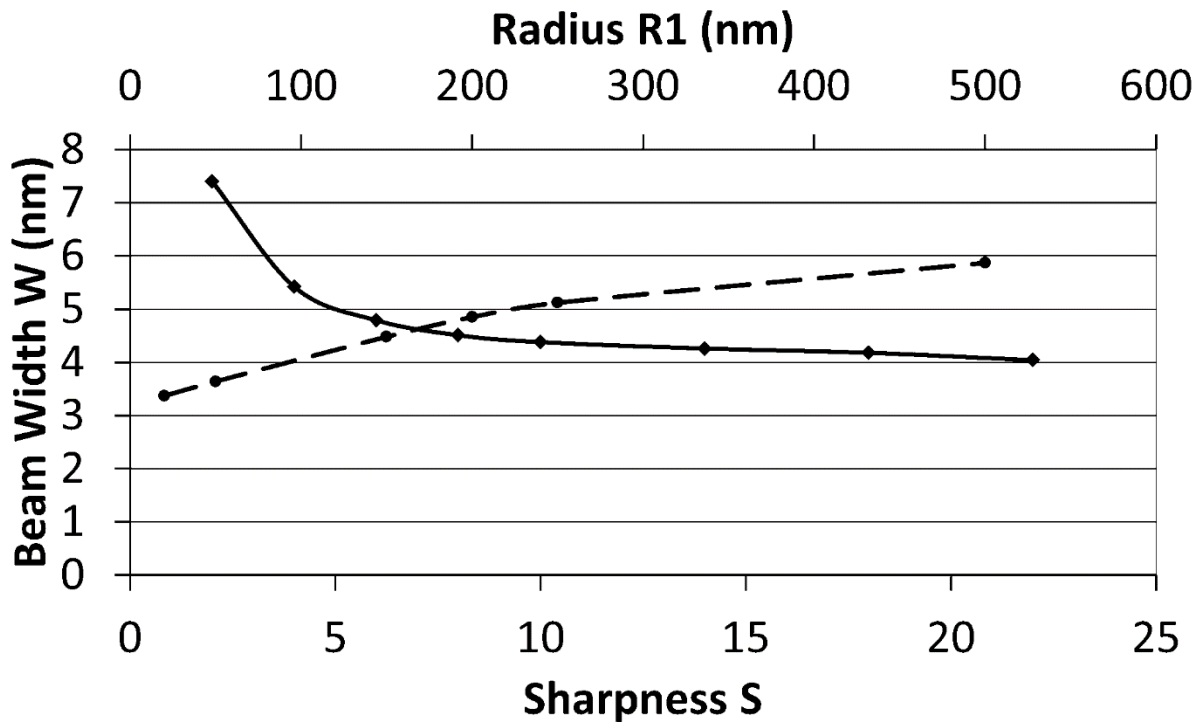
Τέλος, ας δούμε πώς μεταβάλλεται το άνοιγμα της δέσμης όταν αλλάζουμε τις ακτίνες $R_{1,2}$, δηλαδή τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του εκπομπού. Στο σχήμα 3.6 βλέπουμε ότι κρατώντας σταθερή τη μία ακτίνα και μεταβάλλοντας την άλλη, εμφανίζεται μία έντονη εξάρτηση του ανοίγματος της δέσμης από την αιχμηρότητα S . Μεταξύ $S=2$ και $S=20$ το άνοιγμα της δέσμης πέφτει σχεδόν στο μισό. Ωστόσο βλέπουμε ότι αυτή η εξάρτηση εμφανίζει έναν κορεσμό για αιχμηρότητες $S>20$. Παρόμοια μείωση εμφανίζεται, αν κρατώντας σταθερό το λόγο S αυξήσουμε και τις δύο ακτίνες αναλόγως.

Οι παραπάνω πληροφορίες είναι πολύ χρήσιμες στη σχεδίαση και στην επιλογή των ακίδων του NFESSEM. Για παράδειγμα, φαίνεται ότι όσο πιο αιχμηρή είναι η ακίδα τόσο πιο καλή διακριτική ικανότητα θα δίνει. Ωστόσο το γεγονός ότι κάτι τέτοιο έχει κορεσμό ως προς την αιχμηρότητα δείχνει ότι από ένα σημείο και μετά προσπάθεια για δημιουργία ακόμα αιχμηρότερων ακίδων δεν θα έχει σημαντικό αποτέλεσμα στη βελτίωση της διακριτικής ικανότητας.

Τέλος να αναφέρουμε ότι επαναλαμβάνοντας τους παραπάνω υπολογισμούς για διαφορετικές επιβαλλόμενες τάσεις V βρίσκουμε ότι το άνοιγμα της δέσμης w αυξάνει όσο αυξάνει το V . Κάτι τέτοιο προβλέπεται και στις θεωρίες των Dyke [38], Egcombe [46] και Zuber [39]. Η εξήγησή του βρίσκεται στον τρόπο που μεταβάλλεται κατά απόλυτες τιμές το ηλεκτρικό πεδίο με τη γωνία, και θα δοθεί λεπτομερέστερα στην παράγραφο 5.4.2.

Εν κατακλείδι, αφού αναπτύξαμε μία ακριβή και αποδοτική μέθοδο για να προσομοιώνουμε την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από τις αιχμηρές ακίδες του NFESSEM, υπολογίσαμε το άνοιγμα της δέσμης εκπομπής. Τα αποτελέσματα ήταν σε πολύ καλή

συμφωνία με την πειραματικά παρατηρούμενη διακριτική ικανότητα του οργάνου. Επίσης αναλύθηκε η μεταβολή του ανοίγματος της δέσμης συναρτήσει των γεωμετρικών στοιχείων της διάταξης, κάτι που δίνει χρήσιμες πληροφορίες για τη σχεδίαση του οργάνου και για το τι είναι σημαντικό στην προσπάθεια βελτίωσης της διακριτικής του ικανότητας.



Σχήμα 3.6: Μεταβολή του ανοίγματος της δέσμης συναρτήσει (a) της αιχμηρότητας $S=R_1/R_2$ για σταθερό $R_1=170\text{nm}$ (κάτω άξονας-συνπαγής γραμμή) και (b) της ακτίνας R_1 για σταθερή αιχμηρότητα $S=10$ (πάνω άξονας-διακεκομμένη γραμμή).

Κεφάλαιο 4: *Κλιμάκωση (scaling) τάσης στην εκπομπή ηλεκτρονίων από κοντινό πεδίο*

4.1. *Εισαγωγή*

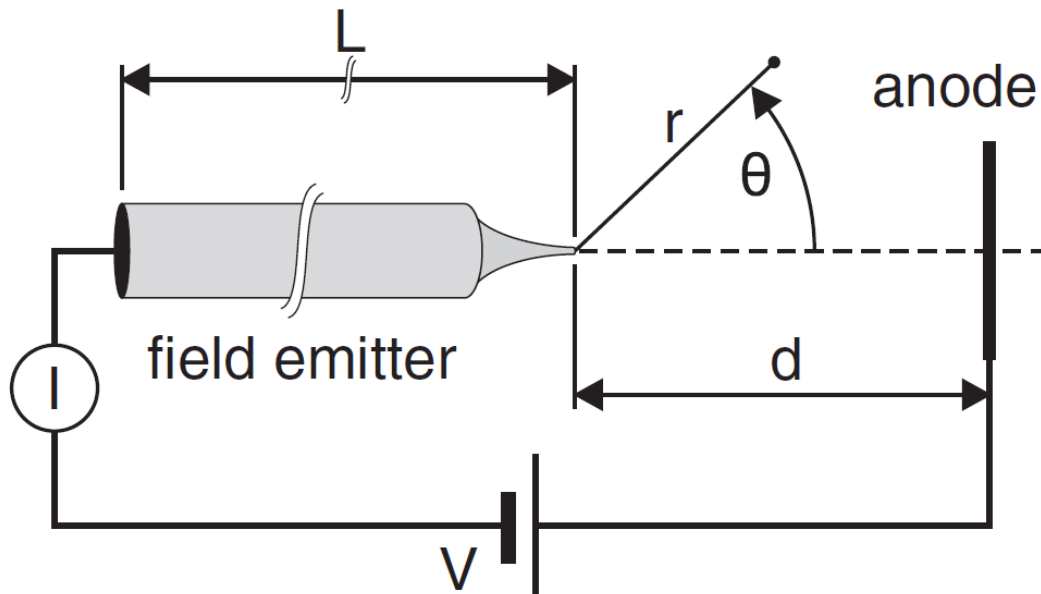
Η κλιμάκωση αποτελεί μία πολύ σημαντική έννοια στην ηλεκτρονική αλλά και στη φυσική γενικότερα. Αφορά την ανάλογη αλλαγή των γεωμετρικών μεγεθών μίας διάταξης και τη μελέτη του πώς μεταβάλλεται η συμπεριφορά της κατά τη διαδικασία αυτή. Η προς τα κάτω κλιμάκωση της κλασσικής ηλεκτρονικής στερεάς κατάστασης σχετίζεται άμεσα με τις ραγδαίες τεχνολογικές εξελίξεις του σύγχρονου πολιτισμού. Η ταχεία σμίκρυνση των διατάξεων βασίζεται στο ότι οι ηλεκτρονικές διατάξεις στερεάς κατάστασης είναι «αμετάβλητες κλίμακας» (scale invariant), δηλαδή παρουσιάζουν την ίδια συμπεριφορά σε πολλές κλίμακες μεγεθών. Αν δηλαδή κάνουμε σμίκρυνση των γεωμετρικών μεγεθών μίας διάταξης, και βρούμε και την κατάλληλη κλιμάκωση των αντίστοιχων ηλεκτρικών μεγεθών, η συμπεριφορά της διάταξης παραμένει περίπου ίδια. Το γεγονός αυτό μας έχει επιτρέψει να κατασκευάσουμε ολοκληρωμένα κυκλώματα με δισεκατομμύρια τρανζίστορ.

Στο παρόν κεφάλαιο θα μελετήσουμε τη συμπεριφορά μίας διάταξης πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων, όταν κλιμακώνεται το γεωμετρικό μέγεθος της απόστασης μεταξύ ανόδου και καθόδου d , και το πώς πρέπει να κλιμακωθεί το αντίστοιχο ηλεκτρικό μέγεθος της επιβαλλόμενης τάσης V έτσι ώστε η συμπεριφορά της διάταξης να παραμείνει σταθερή. Δίνουμε πειραματικά δεδομένα αλλά και θεωρητική ανάλυση που δείχνει ότι η συμπεριφορά της συγκεκριμένης διάταξης παραμένει σχεδόν σταθερή, όταν η απόσταση d μεταβάλλεται από μερικά nm σε μερικά mm. Η ιδιότητα αυτή μπορεί να αποδειχθεί πολύτιμη στο μέλλον για τη σμίκρυνση των ηλεκτρονικών διατάξεων κενού που βασίζονται στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων. Επίσης τα αποτελέσματα χρησιμεύουν στην απλοποίηση της θεωρητικής μελέτης και προσομοίωσης τέτοιων διατάξεων, καθώς δείχνουμε ότι η συμπεριφορά τους παραμένει ίδια σε όλες τις κλίμακες και συνεπώς οι υπολογισμοί μπορούν να παραμείνουν ίδιοι για διαφορετικά d . Η ανάλυση που παρουσιάζεται στο κεφάλαιο αυτό έγινε σε συνεργασία με το εργαστήριο μικροδομών του τομέα φυσικής στερεάς κατάστασης του ETH της Ζυρίχης [74, 75].

4.2. Πειραματικά δεδομένα που δείχνουν τις ιδιότητες κλίμακας

4.2.1. Η πειραματική διάταξη

Η διάταξη της οποίας τις ιδιότητες θα μελετήσουμε είναι απλή. Μία αιχμηρή κάθοδος βολφραμίου (W) τοποθετείται σε απόσταση d από μία επίπεδη άνοδο, όπως φαίνεται στο σχήμα 4.1. Η διάταξη είναι αυτή του NFESSEM που περιγράψαμε στο 2^ο κεφάλαιο. Δεν θα μπορούμε εδώ σε τεχνικές λεπτομέρειες της πειραματικής διαδικασίας αφού η διατριβή αυτή είναι κατά βάση θεωρητική. Ας αρκεστούμε στο να πούμε ότι η πειραματική διαδικασία είναι πολύ σχολαστική και οι μετρήσεις ακριβείς και αξιόπιστες. Περισσότερες λεπτομέρειες για την πειραματική διαδικασία υπάρχουν στο [74].



Σχήμα 4.1 Πειραματική διάταξη και μεταβλητές. Το σχήμα του εκπομπού είναι αρκετά πιστό στην πραγματικότητα.

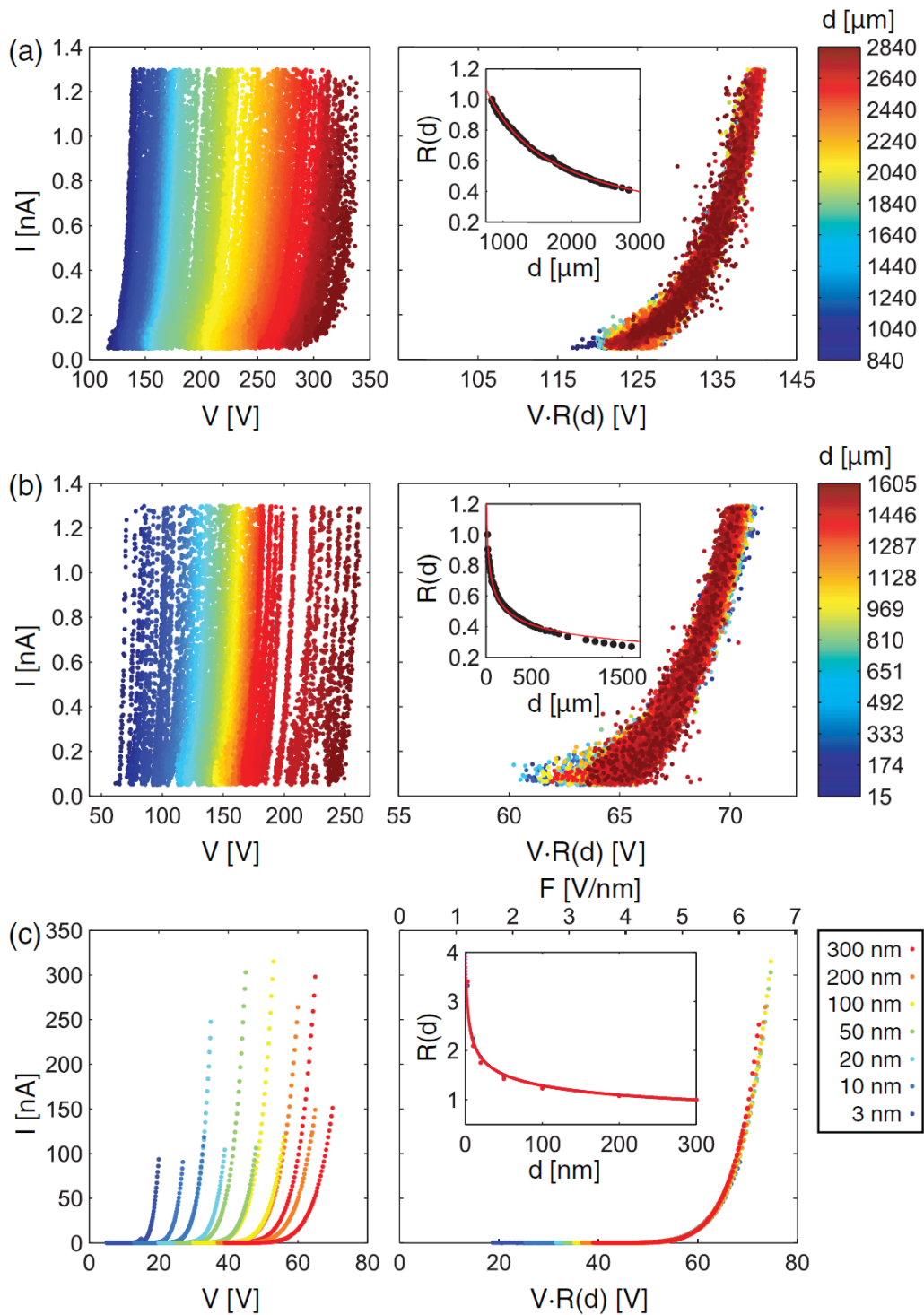
Οι ποσότητες που μετριοούνται στο πείραμα είναι η επιβαλλόμενη τάση V , το ρεύμα της πεδιακής εκπομπής I και η απόσταση ανόδου-κάθόδου d . Οι ανεξάρτητες μεταβλητές οι οποίες ελέγχονται ελεύθερα είναι η επιβαλλόμενη τάση και η απόσταση d , ενώ το ρεύμα που προκύπτει είναι συνάρτηση των δύο αυτών ποσοτήτων. Το κύριο πείραμα που διεξάγεται είναι η λήψη χαρακτηριστικών $I-V$ της διάταξης για διάφορες αποστάσεις d . Η οικογένεια καμπυλών $I-V$ που λαμβάνονται με τον τρόπο αυτό, μπορούν να «καταρρεύσουν» (collapse) σε μία μοναδική καμπύλη αν το ρεύμα σχεδιασθεί σε διάγραμμα με την κλιμακωμένη μεταβλητή

(scaling variable) $V \cdot d^{-\lambda}$. Με άλλα λόγια, αν σε κάθε καμπύλη η τάση πολλαπλασιαστεί με μία συνάρτηση $R_s(d) = ad^{-\lambda}$ όλες οι καμπύλες πέφτουν η μία πάνω στην άλλη.

Η παραπάνω ιδιότητα φαίνεται στο σχήμα 4.2. Στα διαγράμματα που βρίσκονται αριστερά βλέπουμε τις μετρήσεις $I-V$ όπως ακριβώς λήφθηκαν για διάφορες αποστάσεις d . Στα δεξιά διαγράμματα όλες οι καμπύλες έχουν σχεδόν «καταρρεύσει» (εντός ορίων πειραματικού θορύβου) πάνω σε μία από τις αρχικές καμπύλες, καθώς για κάθε καμπύλη η τάση V έχει πολλαπλασιαστεί με έναν παράγοντα κλιμάκωσης (scaling factor) $R_s(d)$ και το ρεύμα έχει σχεδιασθεί ως συνάρτηση της κλιμακωμένης μεταβλητής $R_s(d) \cdot V$. Το παραπάνω σημαίνει ότι μία ολόκληρη καμπύλη $I-V$ σε μία δεδομένη απόσταση d απεικονίζεται πάνω σε μία καμπύλη αναφοράς (η οποία μπορεί να επιλεγθεί τυχαία) πολλαπλασιάζοντας όλες τις τάσεις με τον ίδιο αριθμό $R_s(d)$, ο οποίος είναι συνάρτηση μόνο του d . Δηλαδή το ρεύμα ως συνάρτηση των V, d εκφράζεται ως συνάρτηση μίας μεταβλητής:

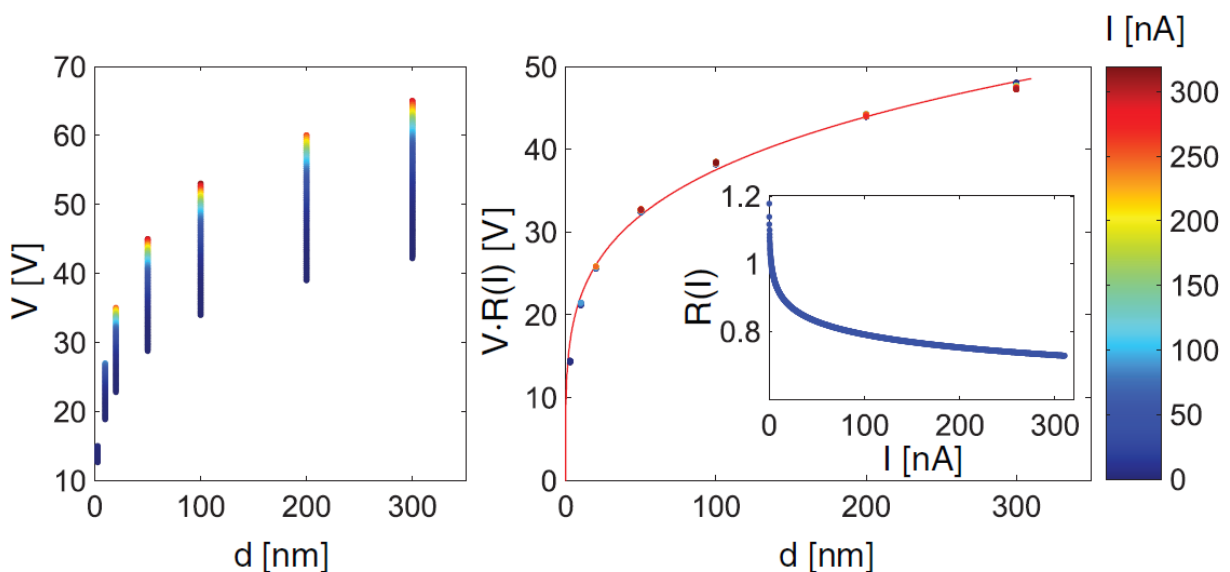
$$I = i(V \cdot R_s(d)) \quad (4.1)$$

Στις ένθετες εικόνες, στα δεξιά του σχήματος 4.2, βλέπουμε τις τιμές που παίρνει ο $R_s(d)$ ο οποίος συμπεριφέρεται περίπου σαν συνάρτηση δύναμης $R_s \propto d^{-\lambda}$ (η κόκκινη γραμμή που περνάει ανάμεσά τους σε κάθε ένθετο είναι μία καμπύλη της μορφής $R_s \propto d^{-\lambda}$ η οποία προσαρμόζεται (fitting) πολύ καλά στις τιμές του $R_s(d)$). Ο εκθέτης λ παίρνει διάφορες τιμές ανάλογα με την κλίμακα των αποστάσεων: $\lambda \approx 0.71$ (Σχήμα. 4.2(a), $d = 850-3000 \mu\text{m}$), $\lambda \approx 0.27$ (Σχήμα 4.2(b), $d = 15-1600 \mu\text{m}$), $\lambda \approx 0.22$ (Σχήμα 4.2(c), $d = 3-300 \text{ nm}$).



Σχήμα 4.2: Αριστερά: Οικογένεια καμπυλών I - V σε 3 διαφορετικές περιοχές αποστάσεων d : (a) 0.84-2.84mm, (b) 15-1605μm, και (c)3-300nm. Δεξιά: Οι καμπύλες από αριστερά έρχονται να «καταρρεύσουν» πάνω σε μία καμπύλη που αντιστοιχεί σε (a) $d=0.84$ mm, (b) 14μm, (c) 300nm, πολλαπλασιάζοντας την τάση με τον παράγοντα κλιμάκωσης $R_s(d)$, οι τιμές του οποίου φαίνονται στα αντίστοιχα ένθετα διαγράμματα. Οι συνεχείς κόκκινες καμπύλες αντιστοιχούν σε συναρτήσεις δύναμης της μορφής $\alpha d^{-\lambda}$ με $\lambda=0.71$ (a), 0.27 (b), 0.22 (c) αντίστοιχα. Η μεταβλητή d αντιστοιχεί στη χρωματική κλίμακα που φαίνεται δεξιά από κάθε εικόνα.

Το ίδιο σύνολο πειραματικών δεδομένων μπορεί να παρουσιαστεί εναλλακτικά σε ένα διάγραμμα $V-d$, το οποίο βέβαια δεν αποτελεί τίποτα άλλο από τις ισοδυναμικές καμπύλες (contours) της συνάρτησης $I(V,d)$. Ένα διάγραμμα δηλαδή στο οποίο μεταβάλλεται ως ανεξάρτητη μεταβλητή η απόσταση d και σχεδιάζεται η τάση V που χρειάζεται για να προκύψει το ίδιο ρεύμα I σε όλη την καμπύλη. Η οικογένεια καμπυλών που προκύπτει με τον τρόπο αυτό για διάφορα ρεύματα φαίνεται στο σχήμα 4.3 (αριστερά). Στα δεξιά του σχήματος αυτού βλέπουμε ότι και αυτή η οικογένεια καμπυλών μπορεί να «καταρρεύσει» σε μία καμπύλη της επιλογής μας, αν η τάση πολλαπλασιαστεί και πάλι με έναν παράγοντα κλιμάκωσης, ο οποίος τώρα εξαρτάται από το ρεύμα στο οποίο αντιστοιχεί η κάθε καμπύλη $R(I)$. Στο ένθετο σχεδιάζονται και πάλι οι τιμές του $R(I)$.



Σχήμα 4.3: Αριστερά: οικογένεια καμπυλών $V-d$ [δεδομένα από το Σχήμα 2(c)] στην περιοχή από 0.2 έως 300nA, ε κάθε καμπύλη να αντιστοιχεί στο αντίστοιχο χρώματος ρεύμα όπως φαίνεται στο χρωματικό πίνακα δεξιά. Δεξιά: Η οικογένεια καμπυλών που έχουν «καταρρεύσει» σε μία καμπύλη που αντιστοιχεί σε $I=2.3$ nA πολλαπλασιάζοντας την τάση με έναν αριθμό $f(I)$ ο οποίος σχεδιάζεται ως συνάρτηση του I στο ένθετο διάγραμμα. Η κόκκινη γραμμή που παρεμβάλλεται των σημείων αντιστοιχεί σε συνάρτηση δύναμης με εκθέτη $\lambda=0.22$.

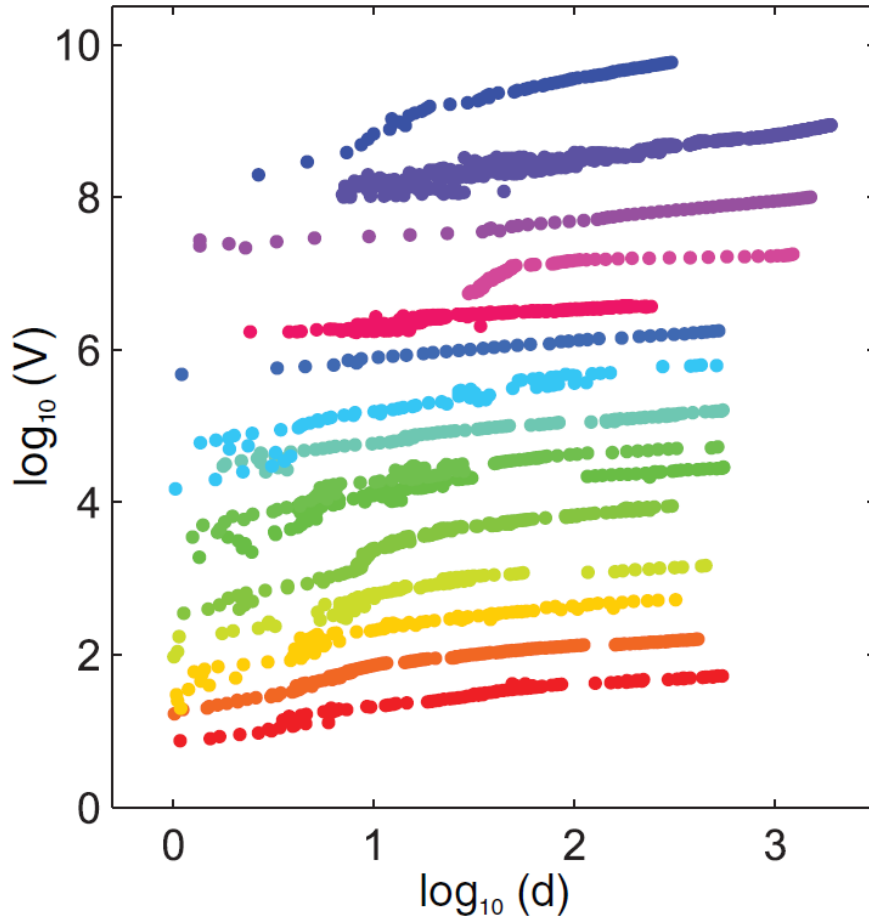
Το γεγονός ότι και η οικογένεια των καμπυλών $V-d$ μπορεί να πέσει σε μία καμπύλη δεν αποτελεί έκπληξη, καθώς είναι ευθεία απόρροια του γεγονότος ότι οι καμπύλες $I-V$ μπορούν να καταρρεύσουν. Πράγματι, αν το ρεύμα είναι μία συνάρτηση της μορφής $I=i(V \cdot R_s(d))$ τότε η τάση ως συνάρτηση του d εκφράζεται

$$V(I, d) = i^{-1}(I) / R_s(d) \quad (4.2)$$

και συνεπώς αν κάθε καμπύλη πολλαπλασιαστεί με ένα παράγοντα $1/i^{-1}(I)$ προκύπτει μία και μοναδική καμπύλη. Οι καμπύλες $V-d$ μπορούν πολύ εύκολα να μας δώσουν τη μορφή

που παίρνει ο παράγοντας κλιμάκωσης $R_s(d)$ ως συνάρτηση του d . Από την (4.2) μπορούμε ευθέως να δούμε ότι $V(I,d) \propto 1/R_s$. Στο διάγραμμα 4.3(δεξιά) η κόκκινη γραμμή που παρεμβάλλεται στα σημεία του διαγράμματος $V-d$ είναι της μορφής $V \propto d^\lambda$ με $\lambda=0.22$. Βρίσκοντας τη μορφή της καμπύλης $V-d$ βρίσκουμε τη μορφή του παράγοντα κλιμάκωσης $R_s(d)$ η οποία είναι σε συμφωνία με τη μορφή που βρήκαμε στο σχήμα 4.2c. Να σημειώσουμε εδώ ότι παρόμοιες ιδιότητες κλιμάκωσης έχουν παρατηρηθεί και σε άλλα πειράματα. Στο [76] έχει παρατηρηθεί κατάρρευση των καμπυλών $I-V$ στην περιοχή αποστάσεων 0.1-0.8mm ενώ στο [77] έχει παρατηρηθεί ένας νόμος δύναμης με εκθέτη 0.19 για αποστάσεις 2-14 μ m.

Με βάση λοιπόν τις μετρήσεις $V-d$ μπορούμε συστηματικά να προσδιορίσουμε τον εκθέτη λ . Στο σχήμα 4.4 βλέπουμε μία σειρά μετρήσεων $V-d$ από διαφορετικούς εκπομπούς σε λογαριθμικές κλίμακες. Όταν 2 μεγέθη που η εξάρτησή τους είναι σε μορφή δύναμης μπουνε σε διάγραμμα λογαρίθμου-λογαρίθμου, προκύπτει ευθεία γραμμή η κλίση της οποίας δίνει την τιμή του εκθέτη. Βλέπουμε ότι όλες οι σειρές μετρήσεων στο σχήμα 4.4 ακολουθούν ένα γραμμικό προφίλ στην περιοχή $10 < d < 2000$ nm, με την κλίση λ να παίρνει τιμές γύρω από το 0.2. Επίσης βλέπουμε ότι υπάρχει μία συστηματική καμπύλωση προς τα κάτω των γραμμών σε περιοχές $d < 10$ nm. Αυτό δείχνει μια αλλαγή συμπεριφοράς σε χαμηλές αποστάσεις προς εκθέτη μεγαλύτερης τιμής, κάτι το οποίο θα εξηγηθεί παρακάτω, ενώ έχει παρατηρηθεί σε προσομοιώσεις στη βιβλιογραφία [78].



Σχήμα 4.4: Σειρά μετρήσεων $V-d$ για σταθερό ρεύμα $I=0.2\text{nA}$ σε κλίμακα λογαρίθμου-λογαρίθμου για αποστάσεις $3\text{nm}<d<2\mu\text{m}$. Οι καμπύλες έχουν μετακινηθεί κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα για λόγους οπτικής διακρισιμότητας.

4.2.2. Ο εκθέτης λ

Η παρουσία του εκθέτη λ και της τιμής του μπορεί να εξηγηθεί ποιοτικά βάσει ενός πολύ απλού μοντέλου για την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων. Γνωρίζουμε ότι η τιμή του εκπεμπόμενου μέσω φαινομένου σήραγγας ρεύματος εξαρτάται από την κατανομή του ηλεκτροστατικού δυναμικού στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή, δηλαδή έως το πολύ 2nm απόσταση από τον εκπομπό. Αν θεωρήσουμε ένα κωνικό μοντέλο για τη γεωμετρία του εκπομπού μπορούμε να βρούμε μία απλή ποιοτική προσέγγιση για τη μορφή που παίρνει το ηλεκτροστατικό δυναμικό, βάσει της οποίας μπορούμε να εξηγήσουμε την συμπεριφορά κλιμάκωσης που παρατηρήσαμε παραπάνω. Ορίζουμε (r,θ) τις σφαιρικές συντεταγμένες με αρχή την κορυφή του κωνικού εκπομπού. Το δυναμικό στη γειτονιά της κορυφής μπορεί να γραφεί [79]:

$$\Phi(r, \theta; d) = V \sum_i A_i(d) r^{\lambda_i} P_{\lambda_i}(\cos \theta) \quad (4.3)$$

όπου λ_i είναι οι ρίζες της εξίσωσης $P_{\lambda_i}(\cos(\pi - \omega/2)) = 0$ όπου ω είναι η πλήρης γωνία του ανοίγματος του κώνου. Οι συντελεστές της (4.3) προσδιορίζονται από τη συνοριακή συνθήκη στην άνοδο το δυναμικό να είναι V :

$$\Phi(d / \cos \theta, \theta; d) = V \sum_i A_i(d) (d / \cos \theta)^{\lambda_i} P_{\lambda_i}(\cos \theta) = V \quad (4.4)$$

Από την παραπάνω εξίσωση προκύπτει εύκολα ότι

$$A_i(d) = d^{-\lambda_i} A_i(1) \quad (4.5)$$

Στη σειρά (4.4) όταν $r \ll 1$ ο επικρατών όρος είναι ο πρώτος και συνεπώς καταλήγουμε:

$$\Phi(d / \cos \theta, \theta; d) \approx V d^{-\lambda_1} A_1(1) r^{\lambda_1} P_{\lambda_1}(\cos \theta), r \rightarrow 0 \quad (4.6)$$

Βάσει της παραπάνω εξίσωσης, το δυναμικό στη γειτονιά της κορυφής του εκπομπού παραμένει αμετάβλητο όταν παραμένει αμετάβλητο το γινόμενο $V \cdot d^{-\lambda}$ και συνεπώς η συμπεριφορά κλιμάκωσης που εμφανίστηκε στα πειραματικά δεδομένα του σχήματος 4.2 εξηγείται ποιοτικά.

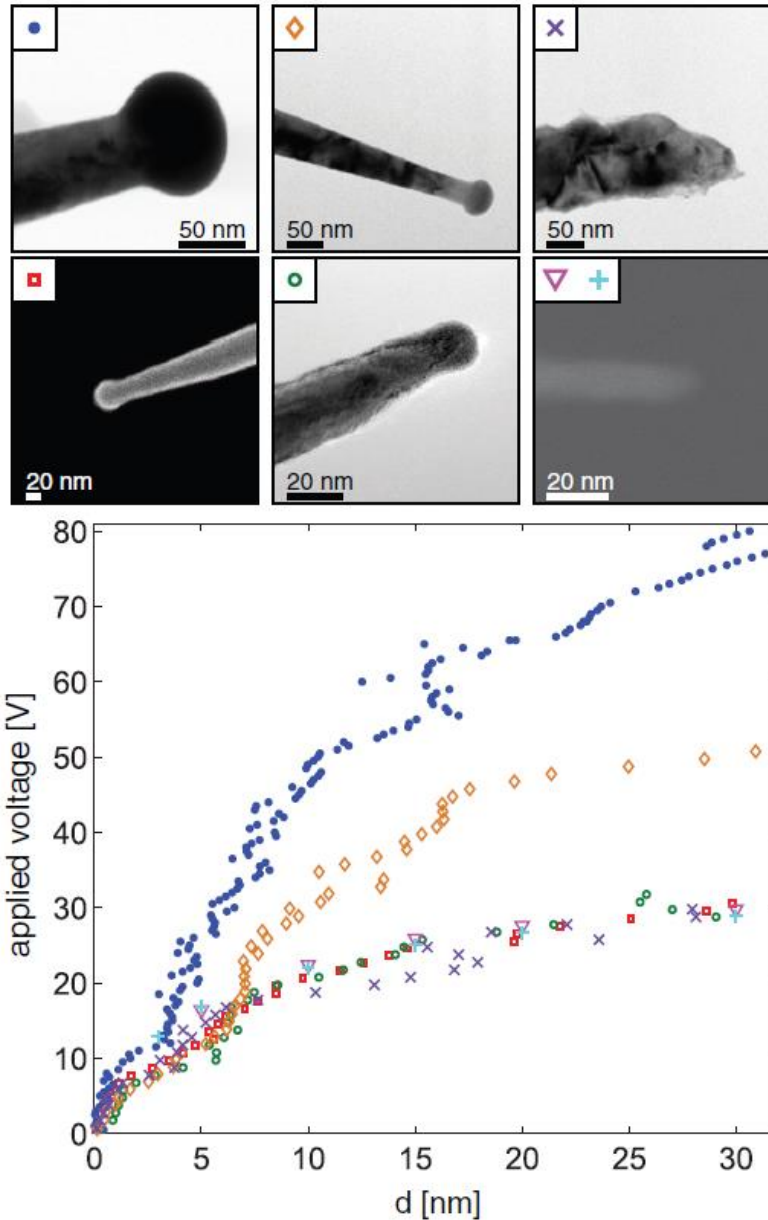
Το παραπάνω μοντέλο δεν μπορεί να χρησιμεύσει για πιο ποσοτικές προβλέψεις καθώς είναι υπεραπλουστευμένο. Το κύριο πρόβλημά του είναι ότι ο κώνος εισάγει μία ασυνέχεια στην κορυφή του η οποία δίνει ανωμαλία στο ηλεκτρικό πεδίο. Οι πραγματικοί εκπομποί, όπως φαίνεται σε εικόνες από TEM και SEM στο σχήμα 4.5, έχουν πράγματι κωνικό προφίλ αλλά στην κορυφή αυτό τελειώνει με μία λεία σφαίρα. Το παραπάνω μοντέλο συνεπώς δίνει μία καλή ποιοτική εικόνα εξήγησης της συμπεριφοράς κλιμάκωσης αλλά δεν μπορεί να αποτελέσει αξιόπιστο υπολογιστικό μοντέλο.

Η μεταβλητή κλιμάκωσης $R_s(d) \cdot V$ μπορεί να συσχετιστεί άμεσα με την τιμή του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου πάνω στην επιφάνεια του εκπομπού. Στην κλασική θεωρία Fowler-Nordheim που περιγράφει την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων θεωρείται ότι το εκπεμπόμενο ρεύμα εξαρτάται μόνο από αυτή την παράμετρο. Αυτό όπως θα δούμε παρακάτω και περισσότερο στο επόμενο κεφάλαιο, δεν ισχύει για αιχμηρούς εκπομπούς ακτίνας καμπυλότητας κάτω από 50nm. Ωστόσο ξέρουμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο είναι ανάλογο της τάσης $F = \beta V$, ενώ από την εξίσωση (4.6) προκύπτει ότι το πεδίο κοντά στην κορυφή εξαρτάται κι αυτό από τα V, d σαν $F \propto V \cdot d^{-\lambda}$. Συνεπώς δεν μπορεί παρά να συσχετιστεί με τη μεταβλητή κλιμάκωσης $V \cdot R(d)$. Δηλαδή κρατώντας σταθερή τη μεταβλητή αυτή, άρα και το ρεύμα, κρατάμε σταθερό και το πεδίο στην επιφάνεια του εκπομπού. Στην επόμενη παράγραφο θα δείξουμε θεωρητικά γιατί είναι το ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια του εκπομπού αυτό που

μένει σταθερό ώστε να κρατηθεί σχεδόν σταθερό ρεύμα και θα δούμε το ηλεκτρικό πεδίο ποιου ακριβώς σημείου είναι αυτό το οποίο πρέπει να παραμείνει σταθερό.

4.2.3. Χρήση της κλιμάκωσης για πειραματικό προσδιορισμό του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου F

Ξέρουμε ότι η μεταβλητή κλιμάκωσης $V \cdot R(d)$ είναι ανάλογη του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια του εκπομπού. Ωστόσο οι τιμές του $R(d)$ έχουν απροσδιοριστία μίας πολλαπλασιαστικής σταθεράς (ανάλογα με το σε ποια από τις $I-V$ καμπύλες θα επιλέξουμε να «ρίξουμε» τις υπόλοιπες). Για να μπορέσουμε να προσδιορίσουμε το ηλεκτρικό πεδίο αρκεί να βρούμε τη σταθερά αναλογίας ανάμεσα σε αυτό και τη δεδομένη μεταβλητή $V \cdot R(d)$. Για να γίνει αυτό εκτελείται μία σειρά μετρήσεων $V-d$ για διάφορους εκπομπούς. Οι μετρήσεις αυτές φαίνονται στο σχήμα 4.5 μαζί με τις εικόνες TEM των αντίστοιχων εκπομπών για τους οποίους λήφθηκαν. Σκοπός αυτών των μετρήσεων είναι να πέσουμε σε χαμηλές αποστάσεις όπου ισχύει περίπου η σχέση του επίπεδου πυκνωτή $F=V/d$. Ωστόσο, από το σχήμα 4.5 βλέπουμε ότι τέτοια γραμμική συμπεριφορά δεν εμφανίζεται ακόμα και σε πολύ μικρά d (λόγω της αιχμηρότητας των ακίδων). Για τόσο αιχμηρούς εκπομπούς η μόνη σχέση που μπορεί να γραφεί με σιγουριά είναι ότι $F \geq V/d$. Με χρήση των μετρήσεων από τον πιο μη-αιχμηρό εκπομπό (πάνω αριστερά) μπορούμε να καταλήξουμε στο συμπέρασμα ότι $F=4.2 \pm 0.5 \text{V/nm}$ για ρεύμα 0.2nA βρίσκοντας τη βέλτιστη ευθεία στο $V-d$ γράφημα για $d < 10 \text{nm}$. Με τον τρόπο αυτό δίνουμε και τιμές στον βοηθητικό πάνω άξονα του σχήματος 4.2c δεξιά.



Σχήμα 4.5: Πάνω: Εικόνες TEM των εκπομπών που χρησιμοποιήθηκαν για τις $V-d$ μετρήσεις. Κάτω $V-d$ μετρήσεις για σταθερό ρεύμα $I=0.2\text{ nA}$ για τους διάφορους εκπομπούς των παραπάνω εικόνων. Κάθε εκπομπός αντιστοιχεί σε διαφορετικό χαρακτηριστικό σημάδι (marker).

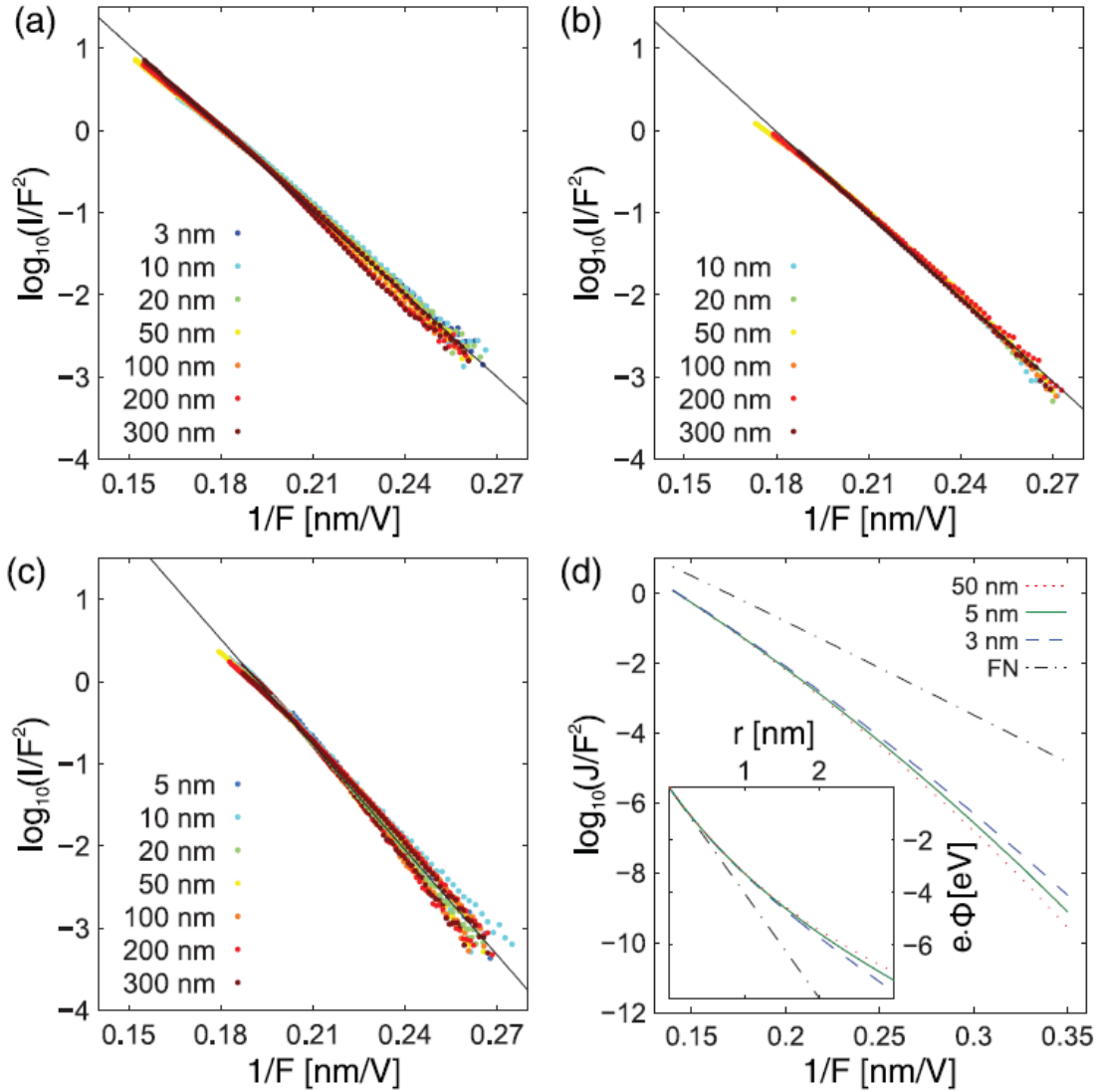
4.2.4. Η καμπύλωση των διαγραμμάτων F-N

Στο σχήμα 4.5 (a-c) βλέπουμε πειραματικά διαγράμματα $I-V$ που έχουν ληφθεί σε αποστάσεις d μεταξύ 3-300nm και έχουν έρθει να «καταρρεύσουν» σε μία καμπύλη ακριβώς όπως το διάγραμμα 4.2c (δεξιά). Στον οριζόντιο άξονα ωστόσο χρησιμοποιείται αντί για τη μεταβλητή κλιμάκωσης $V-R(d)$ το ηλεκτρικό πεδίο F για το οποίο η σταθερά αναλογίας που το συνδέει με τη μεταβλητή κλιμάκωσης υπολογίζεται όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Τα διαγράμματα είναι σε μορφή διαγράμματος Fowler-Nordheim (F-N). Τα

διαγράμματα αυτά αποκαλύπτουν τρία βασικά στοιχεία: (1) για δεδομένο ηλεκτρικό πεδίο το ρεύμα παίρνει περίπου την ίδια τιμή. (2) Ενώ στην κλασσική θεωρία F-N για επίπεδους εκπομπούς τα διαγράμματα FN είναι ευθείες γραμμές, εδώ εμφανίζεται μία μικρή αλλά ανιχνεύσιμη προς τα κάτω καμπύλωση των γραμμών. Τέτοιες αποκλίσεις από τη θεωρία F-N έχουν αναφερθεί από τη δεκαετία του 1990 [41, 43]. (3) Αυτή η καμπύλωση είναι ελαφρώς μικρότερη στις κοντινές αποστάσεις $d < \sim 10\text{nm}$ από τις μακρινές και έχει ως αποτέλεσμα για μικρά ρεύματα και μικρές αποστάσεις να εμφανίζεται μία μικρή απόκλιση από την «κατάρρευση», δηλαδή οι καμπύλες δεν συμπίπτουν επακριβώς.

Στο σχήμα 4.6d δίνουμε παρόμοιο διάγραμμα, το οποίο προέρχεται από αριθμητικούς υπολογισμούς βάσει του αρκετά ρεαλιστικού μοντέλου της στοίβας σφαιρών που θα συζητηθεί αναλυτικότερα στην επόμενη ενότητα 4.3. Βάσει αυτού του μοντέλου υπολογίζουμε το ηλεκτροστατικό δυναμικό κατά μήκος του άξονα συμμετρίας του εκπομπού κοντά στην κορυφή του απ' όπου προέρχεται η μέγιστη πυκνότητα ρεύματος J . Το ηλεκτροστατικό αυτό δυναμικό φαίνεται στο ένθετο του διαγράμματος για 3 διαφορετικές αποστάσεις d , όταν η τάση είναι τέτοια ώστε το ηλεκτρικό πεδίο να κρατείται σταθερό στην κορυφή $F=4\text{V/nm}$.

Στο κύριο μέρος της εικόνας φαίνεται η υπολογιζόμενη μέσω της μεθόδου JWKB πυκνότητα ρεύματος σε μορφή διαγράμματος FN. Στο διάγραμμα αυτό οι υπολογισμοί έρχονται σε συμφωνία με το πείραμα και στα τρία στοιχεία που παρατηρήθηκαν στην προηγούμενη παράγραφο. Η συμπεριφορά του ηλεκτροστατικού δυναμικού είναι αυτή που εξηγεί τις ποιοτικές αυτές παρατηρήσεις για την πυκνότητα ρεύματος καθώς 1) η χωρική κατανομή του ηλεκτροστατικού δυναμικού φαίνεται να είναι σχεδόν ανεξάρτητη της απόστασης d , 2) το δυναμικό φαίνεται να έχει μία καμπύλωση προς τα πάνω σε σχέση με το γραμμικό δυναμικό που χρησιμοποιείται στην κλασσική θεωρία FN, κάτι το οποίο μακραίνει την απαγορευμένη περιοχή και δίνει με τη σειρά του την προς τα κάτω καμπύλωση του διαγράμματος FN, το οποίο είναι ευθεία στην κλασσική θεωρία και 3) σε χαμηλές αποστάσεις d μακριά από το r υπάρχει μία μικρή εξάρτηση του δυναμικού από το d .



Σχήμα 4.6: (a-c). Πειραματικές καμπύλες ρεύματος-ηλεκτρικού πεδίου σε μορφή διαγραμμάτων FN για 3 διαφορετικούς εκπομπούς και διάφορες αποστάσεις στην περιοχή αποστάσεων $3\text{nm} < d < 300\text{nm}$. Το ρεύμα δίνεται σε nA και το ηλεκτρικό πεδίο σε V/nm. Οι ευθείες μαύρες γραμμές είναι γραμμικές προσεγγίσεις στα πειραματικά δεδομένα που δίνουν τη μέση κλίση του διαγράμματος. Οι μετρήσεις του 4.6a είναι οι ίδιες με αυτές του 4.2c. (d) Θεωρητικός υπολογισμός πυκνότητας ρεύματος-ηλεκτρικού πεδίου σε μορφή διαγράμματος FN για 3 διαφορετικές αποστάσεις. Το διάγραμμα διακεκομμένης-τελείας είναι το διάγραμμα που προκύπτει από την κλασική εξίσωση FN. Στο ένθετο φαίνονται τα ηλεκτροστατικά δυναμικά που αντιστοιχούν στους υπολογισμούς των ρευμάτων για σταθερό πεδίο στην κορυφή $F=4\text{V/nm}$. Η μέθοδος με την οποία έγιναν οι υπολογισμοί αναλύονται διεξοδικά στην επόμενη παράγραφο.

Μία ποσοτική σύγκριση ανάμεσα στα πειραματικά δεδομένα του σχήματος 4.6a-c και των θεωρητικών υπολογισμών του 4.6d μπορεί να γίνει στη βάση της μέσης κλίσης των διαγραμμάτων FN (μέση κλίση γιατί όπως φαίνεται το διάγραμμα είναι καμπυλωμένο και η κλίση του αλλάζει από σημείο σε σημείο) στην περιοχή $3.33 < F < 6.25\text{V/nm}$. Ως μονάδα βάσης για την κλίση χρησιμοποιούμε αυτήν που δίνεται από την κλασική έκφραση της εξίσωσης F-

N για το ακριβώς τριγωνικό φράγμα [21] η οποία είναι $sl=28.32\text{V/nm}$ δεδομένου του φράγματος δυναμικού του εκπομπού (βολφράμιο) που είναι $W=4.5\text{eV}$. Η μέση πειραματική κλίση των διαγραμμάτων 4.6(a-c) προκύπτει στην περιοχή $1.2sl-1.5sl$, ενώ η θεωρητική κλίση του 4.6d προκύπτει $(1.43\pm 0.1)sl$. Σε προηγούμενες θεωρητικές αναλύσεις της πεδιακής εκπομπής από αιχμηρούς εκπομπούς [41, 43] η αντίστοιχη μέση κλίση προκύπτει στην περιοχή $1.15sl-1.44sl$ για ακτίνες καμπυλότητα 4-8nm, ενώ η τιμή που δίνεται στη βιβλιογραφία της κλασσικής θεωρίας F-N για το τριγωνικό φράγμα με τη διόρθωση της εικονικής αλληλεπίδρασης (image interaction) είναι περίπου $0.95sl$. Βλέπουμε ότι πράγματι εμφανίζεται στα πειραματικά δεδομένα μία απόκλιση από την κλασσική θεωρία F-N, η οποία αποδίδεται στην αιχμηρότητα του εκπομπού και στην καμπύλωση του ηλεκτροστατικού δυναμικού που προκύπτει λόγω αυτής.

Η απόκλιση αυτή προβλέπεται και ποσοτικά από τους θεωρητικούς υπολογισμούς και θα αναλυθεί λεπτομερέστερα στην επόμενη παράγραφο. Στο 5^ο κεφάλαιο θα αναπτυχθεί μία θεωρία που την περιγράφει διεξοδικά. Να σημειώσουμε πως το γεγονός ότι τα διαγράμματα καμπυλώνονται και δεν ακολουθούν την κλασσική εξίσωση F-N δείχνει ότι το ρεύμα δεν εξαρτάται μόνο από το ηλεκτρικό πεδίο F στην επιφάνεια του εκπομπού όπως συμβαίνει στην θεωρία F-N, αλλά από ολόκληρη την κατανομή του δυναμικού. Κάτι τέτοιο κάνει την «κατάρρευση» των καμπυλών μη αναμενόμενη και την εξήγησή της μη τετριμμένη. Αυτό θα συζητηθεί αναλυτικά στην επόμενη παράγραφο.

4.2.5. Συμπεράσματα

Στην ενότητα 4.2 δώσαμε πειραματικά δεδομένα που δείχνουν ότι μία επαφή σήραγγας πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων είναι αμετάβλητη κλίμακας ως προς την απόσταση καθόδου-ανόδου, όταν αυτή αλλάζει από nm μέχρι mm. Δώσαμε επίσης μία ποιοτική θεωρητική εξήγηση του φαινομένου βάσει ενός απλού ηλεκτροστατικού μοντέλου. Η ακρίβεια της κλιμάκωσης των καμπυλών είναι πολύ καλή με εξαίρεση μικρές αποκλίσεις που εμφανίζονται για πολύ μικρά ρεύματα, όταν η απόσταση ανόδου-καθόδου πέφτει κάτω από 10nm. Οι καμπύλες $I-V$ σε μορφή διαγραμμάτων FN εμφανίζουν μία προς τα κάτω καμπύλωση που αντιστοιχεί σε καμπύλωση του ηλεκτροστατικού δυναμικού και σχετίζεται με τη μεγάλη αιχμηρότητα των εκπομπών.

4.3. Θεωρητική ανάλυση και εξήγηση των ιδιοτήτων κλίμακας

4.3.1. Εισαγωγή

Στην προηγούμενη ενότητα του παρόντος κεφαλαίου δείξαμε ότι οι πειραματικές χαρακτηριστικές τάσης-ρεύματος (I - V) μίας επαφής σήραγγας πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων παραμένουν αμετάβλητες, όταν αλλάζει η απόσταση ανόδου-καθόδου d υπό το μετασχηματισμό κλίμακας (scaling transformation) της τάσης $V \rightarrow VR_s(d)$. Η μη μεταβλητότητα αυτή παρατηρήθηκε για ευρείας κλίμακας αποστάσεις από nm μέχρι mm. Εμφάνισε ωστόσο μικρές αποκλίσεις όταν η απόσταση d γινόταν λίγα nm. Στην παρούσα παράγραφο θα αναλύσουμε θεωρητικά και θα εξηγήσουμε το φαινόμενο αυτό.

Για επίπεδες ή σχεδόν επίπεδες (ακτίνα καμπυλότητας $R > 40$ nm) επιφάνειες εκπομπής, για τις οποίες ισχύει η εξίσωση και η θεωρία F-N, η εξήγηση της «κατάρρευσης» των καμπυλών είναι πολύ απλή: Η εξίσωση F-N περιέχει μονάχα μία μεταβλητή, το ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια του εκπομπού, και φυσικά όταν κάποιος κλιμακώνει την τάση κλιμακώνει και το ηλεκτρικό πεδίο κρατώντας το σταθερό. Συνεπώς βάσει της εξίσωσης F-N διατηρεί αμετάβλητο το εκπεμπόμενο ρεύμα.

Τα πειράματα, ωστόσο, διεξήχθησαν με εκπομπούς με ακτίνες καμπυλότητας 4-10nm. Σε τέτοιες περιπτώσεις το ηλεκτροστατικό δυναμικό δεν είναι γραμμικό στην απαγορευμένη περιοχή και η εξίσωση F-N δεν επαρκεί για τον υπολογισμό της πυκνότητας ρεύματος [7-8]. Επιπροσθέτως, η μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου με τη γωνία θ , δηλαδή πλαγίως του άξονα συμμετρίας του εκπομπού είναι σημαντική. Κοντολογίς, το φράγμα δυναμικού έχει τρισδιάστατη φύση και το ρεύμα εξαρτάται από το σύνολο των τιμών του στην απαγορευμένη περιοχή. Συνεπώς δεν υπάρχει (τουλάχιστον εκ πρώτης όψεως) μία βαθμωτή ποσότητα η οποία να είναι ανάλογη της επιβαλλόμενης τάσης και η οποία όταν παραμένει σταθερή να διατηρείται αμετάβλητο το σύνολο του δυναμικού και συνεπώς το εκπεμπόμενο ρεύμα. Εδώ θα δείξουμε δίνοντας αριθμητικούς αλλά και αλγεβρικούς υπολογισμούς ότι όταν $d \gg R$, τότε πράγματι υπάρχει μία τέτοια παράμετρος και αυτή είναι το ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια του εκπομπού (θα δούμε σε ποιο ακριβώς σημείο της επιφάνειας). Επίσης θα δώσουμε αριθμητικά δεδομένα που συμφωνούν στο γεγονός ότι ο παράγοντας κλιμάκωσης $R_s(d)$ κλιμακώνεται σαν

συνάρτηση δύναμης $R_s(d)=ad^{-\lambda}$ όταν ο εκπομπός διατηρεί ένα κωνικό προφίλ με στρογγυλεμένη κορυφή.

4.3.2. Το δυναμικό: Αριθμητικοί υπολογισμοί

Για να διεξάγουμε εύκολα ακριβείς υπολογισμούς, το κωνικό αυτό σχήμα των εκπομπών προσομοιώνεται μέσα από το μοντέλο της στοιβάς σφαιρών με αυξανόμενη ακτίνα. Το μοντέλο αυτό φαίνεται στο σχήμα 4.7 μαζί με τις συντεταγμένες, τις παραμέτρους και τις μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για τη γεωμετρία του προβλήματος. Οι σφαίρες αυξάνουν την ακτίνα τους με γεωμετρική πρόοδο έτσι ώστε να εφάπτονται στον κώνο, ενώ ο λόγος γ της γεωμετρικής προόδου καθορίζεται από τη γωνία ανοίγματος του κώνου βάσει της σχέσης:

$$\gamma = \frac{1 + \sin(\omega / 2)}{1 - \sin(\omega / 2)} \quad (4.7)$$

Για να βρούμε τη γενική λύση του ηλεκτροστατικού προβλήματος πολλών γεωμετρικών στοιχείων στο χώρο, δεν έχουμε παρά να προσθέσουμε τις γενικές λύσεις που αντιστοιχούν για κάθε στοιχείο, όπως ακριβώς περιγράψαμε στο 3^ο κεφάλαιο, στην παράγραφο 3.3.1. Θεωρώντας ότι το δυναμικό είναι 0 στην κάθοδο και V στην άνοδο παίρνουμε τη γενική λύση του προβλήματος, ανάλογη με την (3.4):

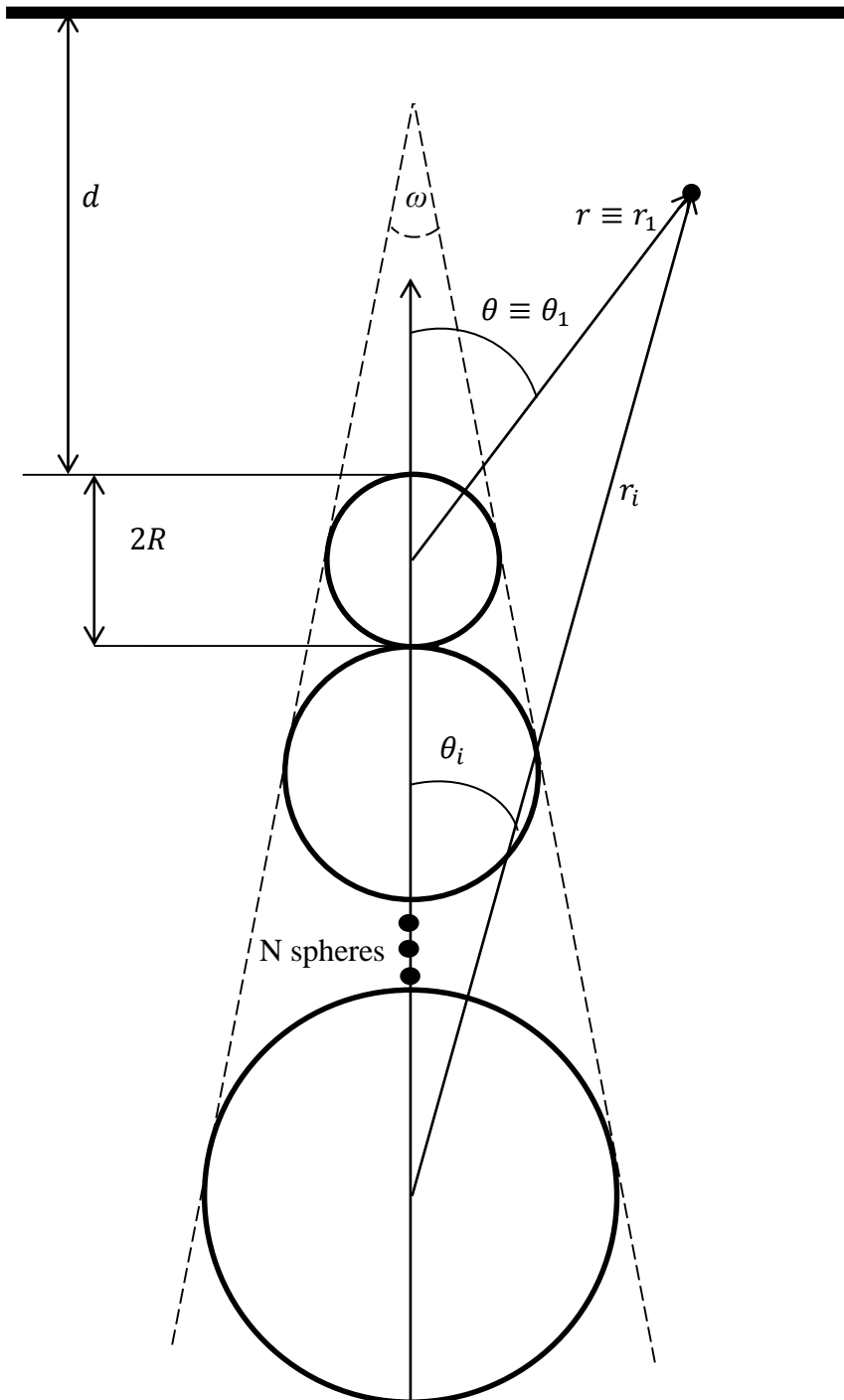
$$\Phi(r, \theta) = V + \sum_{i=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} A_{in} \left(r_i^{(-n-1)} P_n(\cos \theta_i) - r_i^{n(-n-1)} P_n(-\cos \theta_i^m) \right) \quad (4.8)$$

Θυμίζουμε ότι Φ είναι το ηλεκτροστατικό δυναμικό, P_n είναι τα πολυώνυμα Legendre n τάξης και A_{in} είναι συντελεστές ανάπτυξης που καθορίζονται βάσει των συνοριακών συνθηκών. Η εσωτερική άθροιση ως προς n αφορά τη γενική λύση για την κάθε σφαίρα ξεχωριστά, ενώ η εξωτερική άθροιση ως προς i προσθέτει τις λύσεις των διαφόρων σφαιρών. Οι συντελεστές A_{in} παίρνουν τιμές μέσα από την αριθμητική μέθοδο της προσαρμογής σημείων (point matching) ακριβώς όπως και στο μοντέλο των ελλείψεων του κεφαλαίου 3: το άπειρο άθροισμα κόβεται σε έναν αριθμό έστω M , και επιβάλλοντας σε $M \times N$ σημεία στην κάθοδο το δυναμικό να είναι 0 λαμβάνουμε $M \times N$ γραμμικές εξισώσεις με $M \times N$ αγνώστους. Για τους υπολογισμούς χρησιμοποιήσαμε $M=12$, το οποίο δίνει πολύ μεγάλη ακρίβεια υπολογισμών. Η παραπάνω μέθοδος για την επίλυση του ηλεκτροστατικού προβλήματος αποτελεί επέκταση της μεθόδου που χρησιμοποιήθηκε στην αναφορά [73], ενώ είναι παρόμοια με αυτή που χρησιμοποιήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο και στο [69].

Στο ηλεκτροστατικό δυναμικό που υπολογίζεται από την (4.8) πρέπει να προσθέσουμε και το δυναμικό λόγω εικονικής αλληλεπίδρασης (image interaction) και το έργο εξόδου του

μετάλλου ώστε να λάβουμε το συνολικό φράγμα δυναμικού που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται στην ενέργεια Fermi και βγαίνει από το μέταλλο:

$$U(r, \theta) = W - e\Phi(r, \theta) - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{R}{r^2 - R^2} \quad (4.9)$$



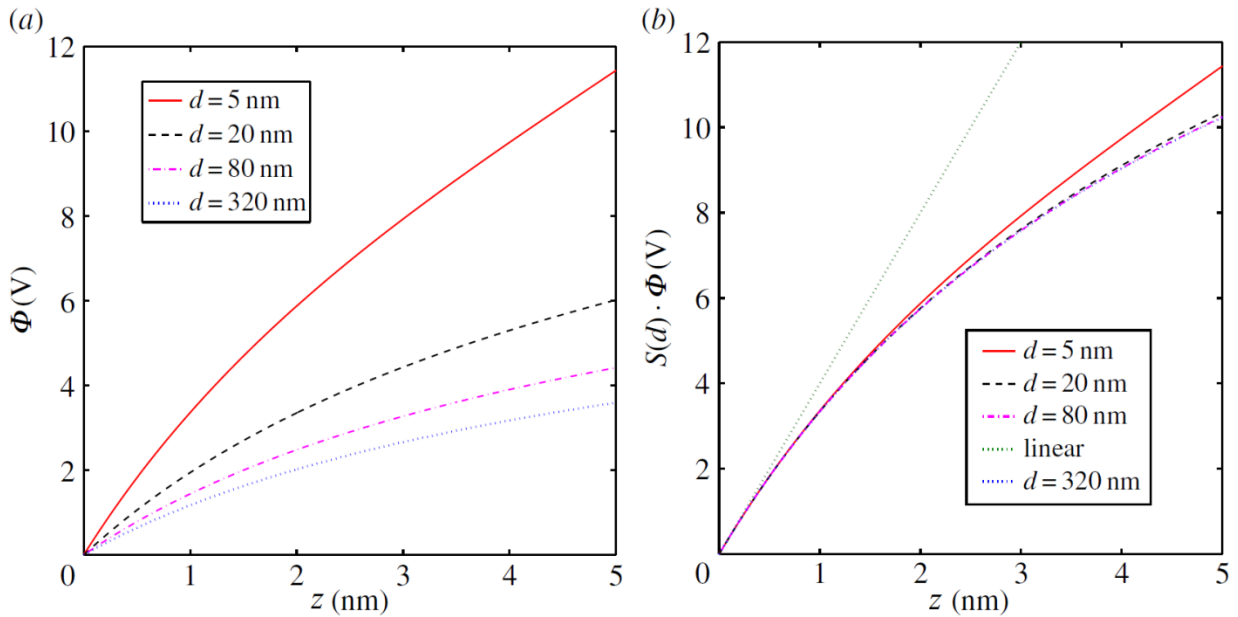
Σχήμα 4.7: Γεωμετρικό μοντέλο για τον εκπομπό, παράμετροι και συντεταγμένες.

Στο σχήμα 4.8a δίνεται το υπολογισμένο ηλεκτροστατικό δυναμικό Φ ως συνάρτηση της μεταβλητής $z=r-R$ για $\theta=0$ σε σταθερή εφαρμοζόμενη τάση $V=11.43V$ για διάφορες αποστάσεις d . Ο υπολογισμός αυτός, όπως και όλοι οι υπολογισμοί της παρούσας ενότητας (εκτός αν αναφερθεί διαφορετικά) διεξάγονται για κωνικό εκπομπό με ακτίνα της πρώτης σφαίρας $R=4nm$, $\omega=7^\circ$, και ολικό μήκος εκπομπού $L=1.2456\mu m$. Η τιμή της τάσης έχει επιλεγεί έτσι ώστε το ηλεκτρικό πεδίο στο σημείο $(r=R, \theta=0)$ F για την απόσταση $d_0=5nm$ να είναι $F_0=4V/nm$. Τώρα εφαρμόζουμε τον κανόνα κλιμάκωσης: πολλαπλασιάζουμε την τάση V για κάθε υπολογισμό με έναν παράγοντα κλιμάκωσης $S(d)$, τέτοιο ώστε το ηλεκτρικό πεδίο στην κορυφή για κάθε απόσταση d να είναι ίσο με το $F(d_0)$. Ο κανόνας αυτός είναι προφανώς:

$$S(d) = \frac{F(d_0)}{F(d)} \quad (4.10)$$

όπου $F(d)$ είναι το ηλεκτρικό πεδίο στην κορυφή όπως υπολογίζεται πριν από την κλιμάκωση. Να αναφερθεί ότι η ιδέα της κανονικοποίησης της κατανομής του δυναμικού ώστε να τηρείται σταθερό το ηλεκτρικό πεδίο στην κορυφή του εκπομπού έχει εφαρμοστεί και στο παρελθόν [80]. Τα αποτελέσματα της διαδικασίας κλιμάκωσης φαίνονται στο σχήμα 4.8b. Παρατηρούμε ότι όλες οι καμπύλες «καταρρέουν» πάνω στην καμπύλη $d=d_0=5nm$ για μία περιοχή του z η οποία: 1) είναι σίγουρα πολύ ευρύτερη από την περιοχή γραμμικότητας του Φ , 2) είναι αρκετά ευρύτερη από το μήκος της απαγορευμένης περιοχής (συνήθως 0.5-1.5nm) και 3) αυξάνει, όσο αυξάνει η απόσταση d . Είναι σημαντικό ότι η παραπάνω ιδιότητα παρόλο που δείχθηκε για $V=11.43V$ ισχύει για οποιαδήποτε άλλη τάση V .

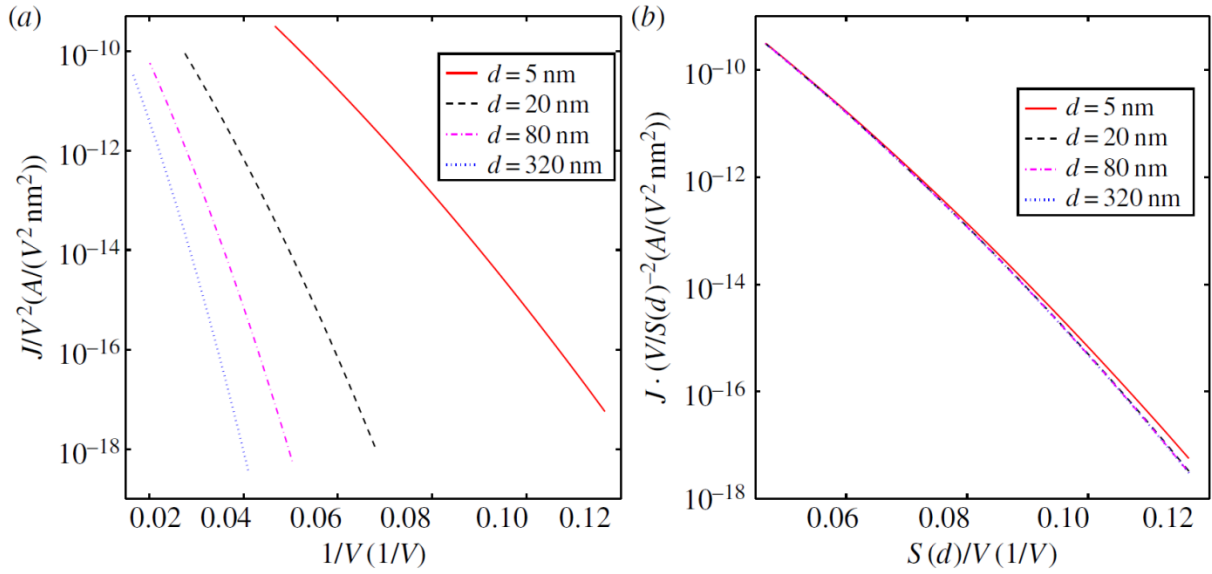
Αν το δυναμικό είναι αμετάβλητο υπό αυτόν τον κανόνα κλιμάκωσης, τότε και η πυκνότητα ρεύματος στον άξονα θα παραμένει αμετάβλητη, βάσει της προσέγγισης JWKB (και όχι βάσει της θεωρίας F-N). Στο σχήμα a δείχνουμε τις διάφορες καμπύλες $J_0(V, d)$ (στη μορφή διαγραμμάτων F-N) όπου J_0 είναι η πυκνότητα ρεύματος στην κατεύθυνση $\theta=0$ για τάση V και απόσταση ανόδου-καθόδου d . Οι καμπύλες αυτές λήφθησαν βάσει της μεθόδου JWKB με χρήση του φράγματος της εξίσωσης (4.9).



Σχήμα 4.8: Υπολογιζόμενο δυναμικό κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα για διάφορες αποστάσεις: (a) πριν από την κλιμάκωση, δηλαδή με την ίδια τάση $V=11.43V$ και (b) μετά την κλιμάκωση, δηλαδή με τάση $V'=S(d)V$. Ένα γραμμικό δυναμικό ίδιας αρχικής κλίσης σχεδιάζεται επίσης για να αναδείξει συγκριτικά την καμπύλωση του δυναμικού.

Στο σχήμα 4.9b σχεδιάζουμε τις ίδιες καμπύλες συναρτήσεως της μεταβλητής $V/S(d)$. Μπορούμε να παρατηρήσουμε εύκολα ότι όλες οι καμπύλες καταρρέουν σε μία καμπύλη. Ο λόγος για τον οποίο η τάση διαιρείται και όχι πολλαπλασιάζεται (όπως ίσως θα περίμενε κανείς βάσει των πειραματικών δεδομένων που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα) είναι ο εξής: Στο σχήμα 4.8a παίρνουμε το ίδιο J_0 για μία σειρά τιμών V , μία για κάθε d . Σύμφωνα με τα αποτελέσματα του σχήματος 4.8, οι τάσεις για τις οποίες λαμβάνουμε το ίδιο J_0 για κάθε d μπορούν να βρεθούν πολλαπλασιάζοντας την τάση του d_0 με $S(d)$, δηλαδή $V(J_0, d) = S(d)V(J_0, d_0)$. Συνεπώς, αν διαιρέσουμε κάθε τάση V με το $S(d)$, τότε θα λάβουμε την ίδια καμπύλη, που είναι αυτή που αντιστοιχεί στο $d=d_0$. Με άλλα λόγια, όλες οι καμπύλες καταρρέουν πάνω σε μία, όταν ως ανεξάρτητη μεταβλητή στον οριζόντιο άξονα μπει η κλιμακωμένη μεταβλητή $V/S(d)$. Καταλαβαίνουμε τώρα τη συσχέτιση του παράγοντα κλιμάκωσης $S(d)$ που χρησιμοποιείται εδώ και του παράγοντα $R_s(d)$ που χρησιμοποιήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο και αυτή είναι $S(d) \propto 1/R_s(d)$. Κάτι τέτοιο βέβαια φαίνεται και από την (4.10).

Μία πολύ μικρή απόκλιση από την κατάρρευση εμφανίζεται για μικρές τάσεις και μικρά d . Αυτή μπορεί εύκολα να εξηγηθεί από το γεγονός ότι, όταν το πεδίο γίνει πολύ μικρό, η απαγορευμένη περιοχή εκτείνεται σε εύρος όπου η κατάρρευση του δυναμικού στο σχήμα 4.8 δεν είναι τέλεια.



Σχήμα 4.9: Πυκνότητα ρεύματος συναρτήσει της τάσης σε μορφή διαγραμμάτων FN για διάφορες αποστάσεις d : (a) πριν από την κλιμάκωση και (b) μετά την κλιμάκωση.

Το δυναμικό ως συνάρτηση του r στις άλλες κατευθύνσεις $\theta \neq 0$ ακολουθεί ακριβώς την ίδια ποιοτική συμπεριφορά όπως αυτή που δείξαμε παραπάνω για $\theta = 0$. Προφανώς για να καταρρεύσουν οι καμπύλες θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί άλλος παράγοντας κλιμάκωσης $S(d)$ ο οποίος βέβαια θα εξαρτάται από τη γωνία θ και σε αντιστοιχία με την εξίσωση (4.10) θα παίρνει τη μορφή:

$$S_{\theta}(d) = \frac{F(\theta, d_0)}{F(\theta, d)} \quad (4.11)$$

όπου $F(\theta, d)$ είναι το ακτινικό ηλεκτρικό πεδίο πάνω στην επιφάνεια του εκπομπού στην κατεύθυνση θ για απόσταση d ανόδου-καθόδου. Παρομοίως τα διαγράμματα F-N $J_{\theta}(V)$ (πυκνότητα ρεύματος στην κατεύθυνση θ) καταρρέουν πάνω σε μία καμπύλη, αν σχεδιαστούν συναρτήσει της κλιμακωμένης μεταβλητής $V/S_{\theta}(d)$.

Η πειραματικά μετρούμενη ποσότητα είναι το συνολικό ρεύμα I και όχι η πυκνότητα ρεύματος J . Το I είναι το επιφανειακό ολοκλήρωμα του J , και συνεπώς για να καταρρέουν οι καμπύλες του I θα πρέπει η μεταβολή του F να είναι ίδια με το θ για κάθε d . Αυτό δεν ισχύει εν γένει, και δεν είναι προφανές γιατί καταρρέουν και οι καμπύλες του ρεύματος. Το πώς γίνεται αυτό θα το δούμε παρακάτω αλλά πριν φθάσουμε εκεί θα παρουσιαστεί μία γενική αλγεβρική εξήγηση για τη συμπεριφορά κλιμάκωσης που παρουσιάζει το ηλεκτροστατικό δυναμικό στο σχήμα 4.8, η οποία αποδεικνύεται ότι είναι γενική και δεν σχετίζεται με το συγκεκριμένο σφαιρικό γεωμετρικό μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε για τον εκπομπό.

4.3.3. Το δυναμικό: Αναλυτική προσέγγιση

Αρχικά υποθέτουμε ότι το σχήμα του εκπομπού κοντά στην κορυφή από όπου προέρχεται το ρεύμα είναι σφαιρικό. Σε όλο τον υπόλοιπο εκπομπό το σχήμα είναι αυθαίρετο. Αργότερα θα γενικεύσουμε το επιχείρημα για οποιαδήποτε γεωμετρία. Δεδομένου ότι το ρεύμα καθορίζεται από τις τιμές του ηλεκτροστατικού δυναμικού στην απαγορευμένη περιοχή (δηλαδή σε απόσταση το πολύ 1.5nm από την επιφάνεια του εκπομπού) μπορούμε να αναπτύξουμε το δυναμικό ως συνάρτηση της ακτινικής συντεταγμένης r σε δεδομένη κατεύθυνση $\theta=\theta_0$ σε σειρά Taylor. Όπως φαίνεται και από το σχήμα 4.8 ο γραμμικός όρος δεν επαρκεί για να περιγράψει το δυναμικό στην απαγορευμένη περιοχή. Για το λόγο αυτό θα κρατήσουμε και το δεύτερο όρο του αναπτύγματος Taylor. Έχουμε:

$$\Phi(r, \theta_0) = \Phi(R, \theta_0) + F \cdot (r - R) + \frac{\partial^2 \Phi(r, \theta_0)}{\partial r^2} \cdot \frac{(r - R)^2}{2} + \dots \quad (4.12)$$

Η εξίσωση Laplace σε σφαιρικές συντεταγμένες για πρόβλημα με κυλινδρική συμμετρία (όλες οι αζιμουθιακές παράγωγοι μηδενίζονται) παίρνει τη μορφή:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\cot(\theta)}{r^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} = 0 \quad (4.13).$$

Ωστόσο η επιφάνεια του εκπομπού ($r=R$) είναι ισοδυναμική και συνεπώς όλες οι παράγωγοι σε κατευθύνσεις παράλληλες με αυτή μηδενίζονται. Άρα:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \theta}(R, \theta_0) = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2}(R, \theta_0) = 0 \quad (4.14).$$

Η εξίσωση (4.13) δεδομένης της (4.14) γίνεται:

$$\left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} \right|_{(R, \theta_0)} = - \frac{2}{R} \left. \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|_{(R, \theta_0)} \quad (4.15).$$

Η εξίσωση (4.15) δείχνει ότι αν κλιμακώσουμε το πεδίο F σε οποιαδήποτε κατεύθυνση θ_0 , τότε η δεύτερη παράγωγος στην ίδια κατεύθυνση κλιμακώνεται ανάλογα, ή διαφορετικά, ο λόγος τους είναι ανεξάρτητος της απόστασης d .

Οι όροι υψηλότερης τάξης εξαρτώνται εν γένει από το d , αλλά είναι πολύ μικροί (εντός της απαγορευμένης περιοχής) και εκτός από ακραίες περιπτώσεις μπορούν να αμεληθούν. Παρόλα αυτά προκαλούν μικρές αποκλίσεις από την ακριβή κατάρρευση οι οποίες εμφανίζονται στα σχήματα 4.8 και 4.9. Στο 4.8b φαίνεται ότι για $z > 2\text{nm}$ αποκλίνουν ελαφρώς οι καμπύλες για μικρά d (συγκρίσιμα με την ακτίνα καμπυλότητας R), ενώ για μικρά ρεύματα

(σε τόσο μικρά ρεύματα η απαγορευμένη περιοχή εκτείνεται έως και 2-3nm από την επιφάνεια) οι αντίστοιχες καμπύλες αποκλίνουν ελαφρώς και στο σχήμα 4.9b.

Η παραπάνω ανάλυση μπορεί να επεκταθεί και σε μη σφαιρικές επιφάνειες. Ας υποθέσουμε ένα οποιοδήποτε σύστημα καμπυλόγραμμων συντεταγμένων (u, v, φ) στο οποίο το εκπέμπον τμήμα της καθόδου περιγράφεται από την επιφάνεια $u=u_0$ =σταθερά. Η εξίσωση Laplace στο συγκεκριμένο σύστημα συντεταγμένων παίρνει τη μορφή:

$$\frac{1}{h_u h_v h_\varphi} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{h_u h_v h_\varphi}{h_u^2} \frac{\partial \Phi}{\partial u} \right) + \frac{1}{h_u h_v h_\varphi} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{h_u h_v h_\varphi}{h_v^2} \frac{\partial \Phi}{\partial v} \right) = 0 \quad (4.16)$$

όπου h_i είναι οι μετρικοί συντελεστές (είναι συναρτήσεις των u, v, φ). Οι παράγωγοι ως προς το v είναι μηδενικές πάνω στην επιφάνεια καθώς αυτή είναι ισοδυναμική, και συνεπώς ο δεύτερος όρος της (4.16) είναι μηδέν. Άρα η (4.16) γίνεται:

$$\frac{1}{h_u h_v h_\varphi} \left[\frac{\partial \Phi}{\partial u} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{h_u h_v h_\varphi}{h_u^2} \right) + \left(\frac{h_u h_v h_\varphi}{h_u^2} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u^2} \right] = 0 \quad (4.17).$$

Ξαναγράφοντας το τελευταίο σε μία πιο συμπτηγμένη μορφή παίρνουμε:

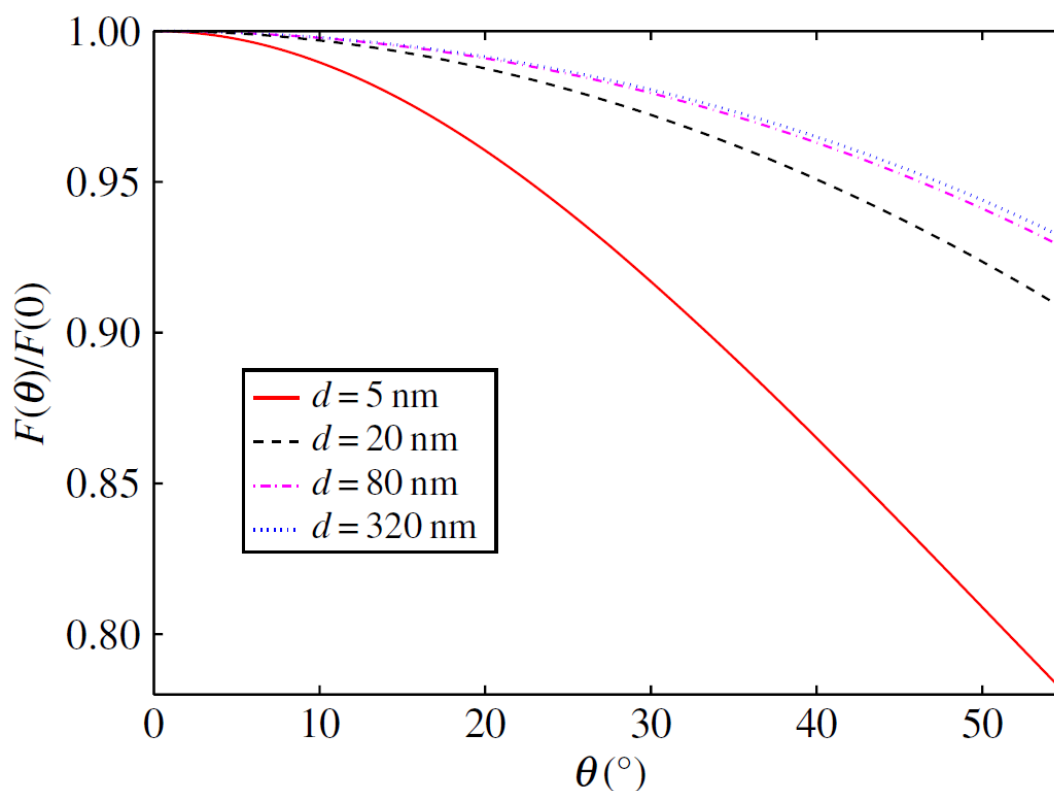
$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u^2} \Big|_{(u_0, v)} = f(u_0, v) \frac{\partial \Phi}{\partial u} \Big|_{(u_0, v)} \quad (4.18).$$

Η τελευταία εξίσωση είναι αντίστοιχη της (4.15) και σημαίνει ότι αν αναπτύξουμε το Φ κοντά στο σημείο της επιφάνειας (u_0, v_0) κατά μήκος μίας γραμμής $v=v_0$ (αντίστοιχης με την ακτινική γραμμή της σφαιρικής περίπτωσης), ο δεύτερος όρος του αναπτύγματος Taylor κατά μήκος της γραμμής αυτής θα είναι ανάλογος του πρώτου με το λόγο τους να είναι ανεξάρτητος του d . Κατά συνέπεια, και πάλι αν το δυναμικό κλιμακωθεί ώστε να διατηρηθεί ίδιος ο πρώτος όρος της ανάπτυξης αυτής, αυτομάτως διατηρείται ίδιος και ο δεύτερος.

Να σημειώσουμε εδώ ότι ο συντελεστής διέλευσης T , όπως εκφράζεται στην προσέγγιση JWKB είναι ένα επικαμπύλιο ολοκλήρωμα κατά μήκος του πιο πιθανού μονοπατιού του ηλεκτρονίου εντός της απαγορευμένης περιοχής, όπως είδαμε στο 1^ο και στο 3^ο κεφάλαιο [20, 28, 27]. Αυτό το μονοπάτι σε τρισδιάστατες περιπτώσεις δεν είναι ευθύ (ούτε στην σφαιρική περίπτωση), και ο υπολογισμός του είναι αρκετά περίπλοκος. Ωστόσο μπορούμε να το προσεγγίσουμε με τη γραμμή $v=v_0$ που εν γένει είναι καλύτερη προσέγγιση από την ευθεία. Για το λόγο αυτό διαλέξαμε να αναπτύξουμε το δυναμικό κατά μήκος της ευθείας αυτής.

4.3.4. Η εξάρτηση του ηλεκτρικού πεδίου από τη γωνία θ

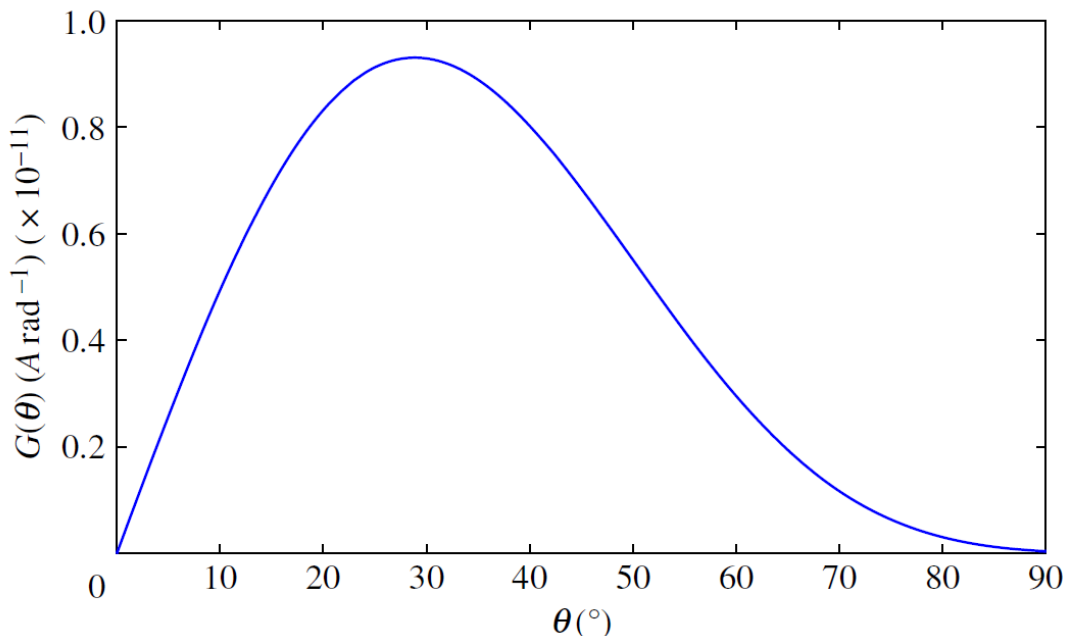
Ως τώρα έχουμε αποδείξει ότι ο λόγος του πρώτου με τον δεύτερο όρο για οποιαδήποτε γωνιακή κατεύθυνση θ είναι ανεξάρτητοι του d για κάθε θ . Ωστόσο και οι δύο είναι ταυτόχρονα εξαρτώμενοι από το θ με διαφορετικό τρόπο εν γένει για κάθε d . Στο σχήμα 4.10 βλέπουμε την εξάρτηση του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια συναρτήσει της γωνίας θ για διάφορα d (κανονικοποιημένα ως προς το μέγιστο). Παρατηρούμε ότι για αποστάσεις $d \gg R$, ο τρόπος που μεταβάλλεται το $F(\theta)$ είναι ίδιος για όλες τις αποστάσεις d , δηλαδή το $F(\theta, d)$ δεν εξαρτάται από το d . Συνεπώς βάσει των 4.15 ή 4.18, κλιμακώνοντας την τάση έτσι ώστε να μείνει σταθερό το $F(0)$, παραμένει ίδιος και ο δεύτερος όρος της 4.12, αλλά και το ηλεκτρικό πεδίο και η παράγωγός του σε οποιαδήποτε κατεύθυνση θ . Δηλαδή παραμένει ίδιο όλο το δυναμικό εντός της απαγορευμένης περιοχής, συνεπώς και το ρεύμα.



Σχήμα 4.10: Μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια ως προς τη γωνία θ , για διάφορες αποστάσεις d . Το ηλεκτρικό πεδίο κανονικοποιείται ως προς το κατακόρυφο ($\theta=0$).

Ωστόσο, βλέπουμε στο σχήμα ότι, όταν το d γίνεται συγκρίσιμο με το R , η συνάρτηση $F(\theta)$ αλλάζει με πολύ διαφορετικό τρόπο για κάθε d . Βλέποντας την κόκκινη καμπύλη του σχήματος 4.10 εκπλήσσεται κανείς από το πόσο ακριβής είναι η κατάρρευση των αντίστοιχων πειραματικών καμπυλών I-V. Η απάντηση βρίσκεται στο γεγονός ότι ένα μικρό εύρος γωνιών συμβάλλει στον υπολογισμό του ρεύματος, όπως φαίνεται στο σχήμα 4.11.

Στο σχήμα 4.11 σχεδιάζεται το ρεύμα ανά μονάδα γωνίας, ως συνάρτηση της γωνίας. Δηλαδή το ρεύμα μεταξύ θ και $\theta+d\theta$ το οποίο είναι $G(\theta)=2\pi R^2 J(\theta)\sin(\theta)$ (Amps ανά rad). Είναι ξεκάθαρο ότι το μέγιστο αυτής της ποσότητας δεν εμφανίζεται στον κατακόρυφο άξονα όπου παίρνει μέγιστη τιμή η πυκνότητα ρεύματος αλλά η στοιχειώδης επιφάνεια είναι μηδενική. Αντίθετα εμφανίζεται στη γωνία $\theta=\theta_{max}=30^\circ$ (η τιμή του θ_{max} εξαρτάται εν γένει από το d). Από το σχήμα 4.11 συμπεραίνουμε ότι το συνολικό ρεύμα καθορίζεται από τις τιμές του δυναμικού σε ένα μικρό εύρος γωνιών γύρω από το θ_{max} . Αν η τάση κλιμακωθεί έτσι ώστε το ηλεκτρικό πεδίο στη γωνία θ_{max} να παραμείνει το ίδιο, η αλλαγή του πεδίου αυτού γύρω από το θ_{max} είναι σχετικά μικρή και συνεπώς θα δώσει το ίδιο ρεύμα. Φυσικά, και πάλι θα εμφανιστεί απόκλιση από την κατάρρευση, αντίστοιχη με αυτήν που εμφανίστηκε στις πειραματικές καμπύλες.

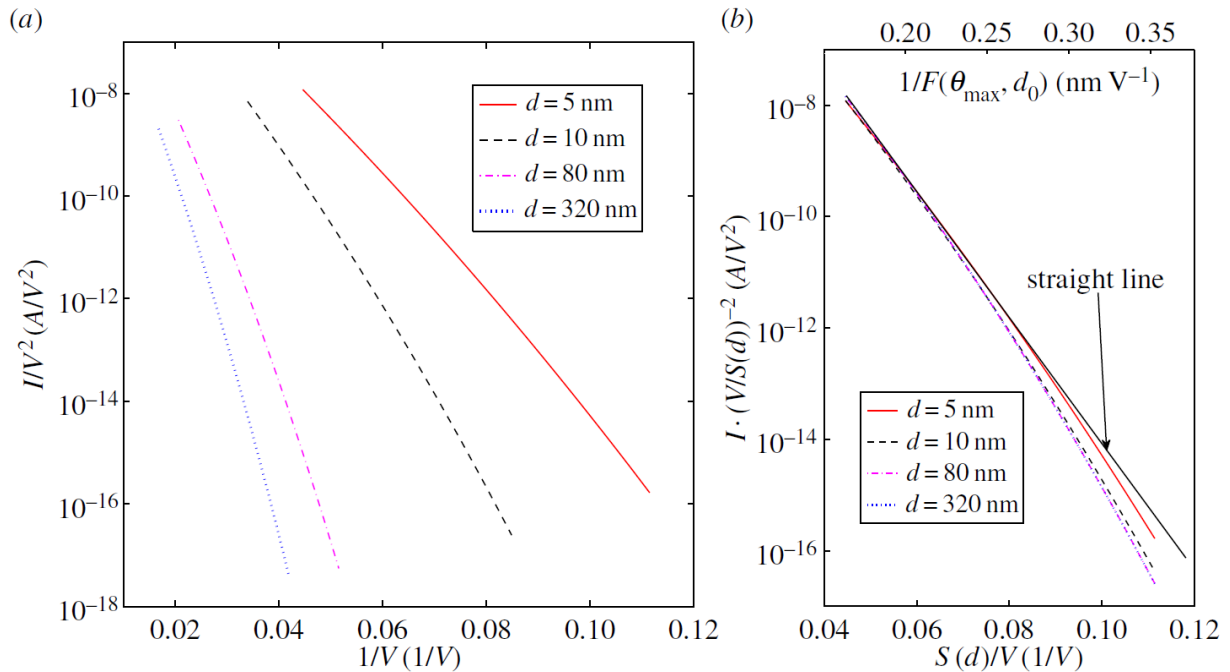


Σχήμα 4.11: Ρεύμα ανά μονάδα γωνίας μεταξύ θ και $\theta+d\theta$ ως συνάρτηση του θ για $d=50\text{nm}$, $V=26\text{V}$. Το μέγιστο εμφανίζεται στις 30° .

4.3.5. Το ολικό ρεύμα και σύγκριση με το πείραμα

Στο σχήμα 4.12 βλέπουμε τη μεταβολή του ολικού ρεύματος συναρτήσει της τάσης V . Στο σχήμα 4.12a βλέπουμε ένα διάγραμμα F-N με το ολικό ρεύμα συναρτήσει της επιβαλλόμενης τάσης για διάφορες αποστάσεις d . Στο διπλανό διάγραμμα 4.12b βλέπουμε τις ίδιες καμπύλες αφού η τάση έχει κλιμακωθεί βάσει της εξίσωσης 4.11 με επιλεγμένο θ να είναι το $\theta_{max}=30^\circ$. Είναι φανερό ότι η κατάρρευση είναι αρκετά ακριβής, ανάλογη με αυτήν που είδαμε στα πειραματικά διαγράμματα 4.6(a-c).

Επιπροσθέτως, τα διαγράμματα F-N καταρρέουν ενώ είναι προς τα κάτω καμπυλωμένα και όχι ευθεία, κάτι που αναδεικνύει μη γραμμικότητα του ηλεκτροστατικού δυναμικού. Για να κάνουμε ευδιάκριτη την καμπύλωση στο διάγραμμα 4.12b σχεδιάζουμε μία ευθεία γραμμή η οποία εφάπτεται στις καμπύλες στο μέγιστο σημείο τους. Αν τα διαγράμματα F-N ήταν ευθείες γραμμές, η εξήγηση της κατάρρευσης θα ήταν τετριμμένη καθώς το ρεύμα θα εξαρτιόταν μόνο από την τιμή του ηλεκτρικού πεδίου στην κορυφή, όπως περιγράφεται από τη θεωρία F-N. Η τιμή αυτή μπορεί εύκολα να κρατηθεί σταθερή κλιμακώνοντας την τάση.



Σχήμα 4.12: Συνολικό ρεύμα ως συνάρτηση της επιβαλλόμενης τάσης για διάφορες αποστάσεις d παρουσιασμένο σε μορφή διαγράμματος F-N (a) πριν από την κλιμάκωση και (b) μετά την κλιμάκωση. Σχεδιάζεται επίσης μία ευθεία γραμμή με την ίδια αρχική κλίση με τις καμπύλες $I-V$ η οποία αναδεικνύει την καμπύλωση των διαγραμμάτων. Στον επάνω δευτερεύοντα οριζόντιο άξονα του δεξιού διαγράμματος δίνεται το κοινό ηλεκτρικό πεδίο σε γωνία $\theta_{max}=30^\circ$.

Οι μικρές αποκλίσεις που εμφανίζονται για μικρές αποστάσεις αποδίδονται σε δύο παράγοντες. Πρώτον, σε μικρές αποστάσεις και μικρά ρεύματα όπου το μήκος της απαγορευμένης περιοχής γίνεται συγκρίσιμο με το d , οι υψηλότερης τάξης όροι στην ανάπτυξη (4.12) γίνονται σημαντικοί και συμβάλλουν στην απόκλιση του δυναμικού που εμφανίζεται στα σχήματα 4.8 και 4.9. Ωστόσο οι καμπύλες του σχήματος 4.12b εμφανίζουν μεγαλύτερη απόκλιση από αυτές της πυκνότητας ρεύματος (σχήμα 4.9). Αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι το F αρχίζει να μεταβάλλεται διαφορετικά με το θ για κάθε d , όταν το d γίνεται συγκρίσιμο με την ακτίνα καμπυλότητας του εκπομπού R .

Στο σημείο αυτό αξίζει να γίνει ένα σχόλιο σχετικό με τους παράγοντες κλιμάκωσης. Ο παράγοντας κλιμάκωσης $R_s(d)$ που χρησιμοποιήθηκε στα πειραματικά δεδομένα παραπάνω πήρε τιμές βάσει βελτιστοποίησης της κατάρρευσης και δεν σχετίστηκε άμεσα με κάποια φυσική ποσότητα. Εδώ δείχνουμε ότι η βέλτιστη κατάρρευση επιτυγχάνεται, όταν ο παράγοντας είναι τέτοιος ώστε να διατηρεί σταθερό το ηλεκτρικό πεδίο στη γωνία θ_{max} . Συνεπώς η συσχέτιση που δίνουμε εδώ του παράγοντα κλιμάκωσης με φυσικές ποσότητες είναι:

$$R_s(d) = \frac{1}{S_{\theta_{max}}(d)} = \frac{F(\theta_{max}, d)}{F(\theta_{max}, d_0)} \quad (4.19)$$

Προφανώς η μεταβλητή κλιμάκωσης $V/S_{\theta}(d)$ είναι ανάλογη στο κοινό ηλεκτρικό πεδίο F σε γωνία θ_{max} και για το λόγο αυτό εισάγουμε στο σχήμα 4.12b έναν δευτερεύοντα άξονα με τη μεταβλητή $1/F(\theta_{max}, d_0)$ στην κορυφή του διαγράμματος. Για λόγους απλότητας αφού έχουμε βρει τη μεταβλητή κλιμάκωσης $S_{\theta_{max}}(d)$ θα την γράφουμε απλώς $S(d)$.

4.3.6. Ο παράγοντας κλιμάκωσης σε μορφή δύναμης $S(d)=ad^\lambda$

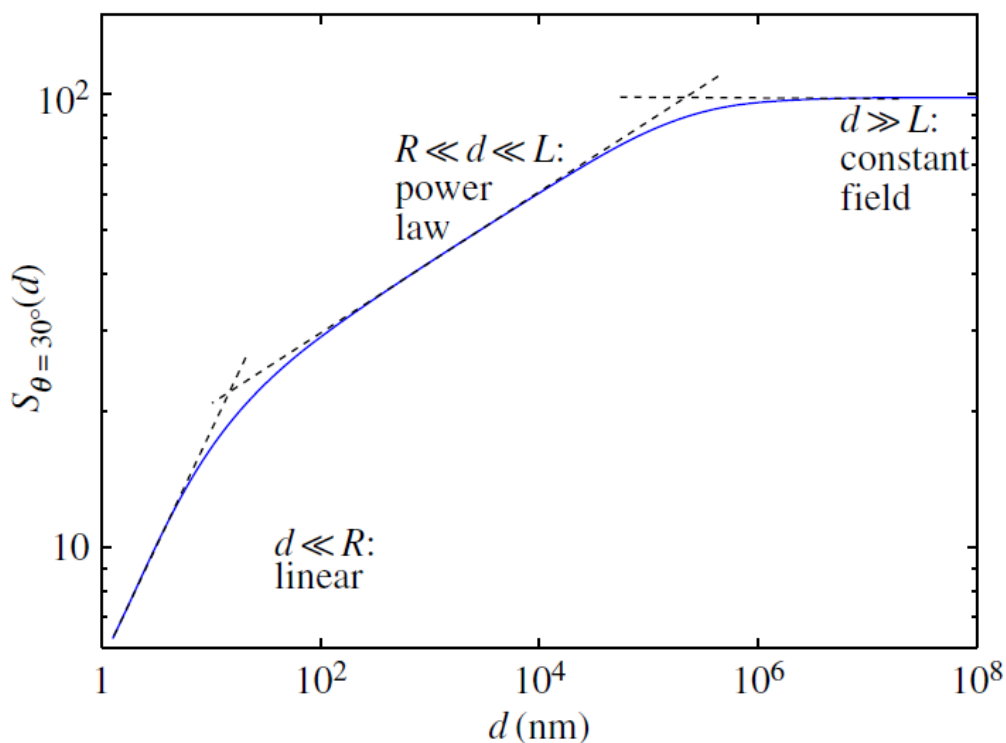
Τώρα θα περάσουμε στη θεωρητική ανάλυση του δεύτερου στοιχείου που παρατηρήθηκε πειραματικά εκτός από την κατάρρευση. Αυτό είναι η μορφή δύναμης που παίρνουν οι παράγοντες κλιμάκωσης $R_s(d)=1/S(d)=ad^\lambda$, όπου a είναι κάποιος συντελεστής, και το λ βρίσκεται πειραματικά να είναι θετικό γύρω από την τιμή 0.2. Η μορφή αυτή αναδείχτηκε κυρίως από τις μετρήσεις $V-d$ των σχημάτων 4.3 και 4.4.

Οι υπολογισμοί που γίνονται εδώ επιβεβαιώνουν την μορφή αυτή για τον παράγοντα κλιμάκωσης υπό προϋποθέσεις (οι οποίες ισχύουν στη λήψη των πειραματικών δεδομένων). Στο σχήμα 4.13 σχεδιάζουμε την τάση που απαιτείται για να κρατήσει σταθερό το ηλεκτρικό πεδίο $F(\theta=30^\circ, d)$ ως συνάρτηση του d . Δηλαδή σχεδιάζουμε ένα διάγραμμα $V-d$ για σταθερό πεδίο (δηλαδή σταθερό ρεύμα) σε λογαριθμικές κλίμακες, ανάλογο με τα διαγράμματα του σχήματος 4.4. Ο υπολογισμός γίνεται για το μοντέλο της στοιβας σφαιρών που περιγράφηκε παραπάνω με κωνικό προφίλ και ακτίνα της πρώτης σφαίρας $R=5\text{nm}$. Η γωνία ανοίγματος είναι $\omega=10^\circ$ και το συνολικό μήκος του εκπομπού είναι $L=326.4\mu\text{m}$. Στο διάγραμμα παρατηρούμε τρεις περιοχές:

- Μικρές αποστάσεις $d \ll R$, όπου το πεδίο ακολουθεί το νόμο του επίπεδου πυκνωτή $F=V/d$. Συνεπώς $V=Fd$ και το διάγραμμα είναι ευθεία γραμμή με μοναδιαία κλίση.

- Ενδιάμεσες αποστάσεις $R \ll d \ll L$, όπου εμφανίζεται μορφή δύναμης καθώς το διάγραμμα log-log είναι ευθεία γραμμή με κλίση $\lambda=0.153$ (η κλίση ταυτίζεται με τον εκθέτη).
- Πολύ μεγάλες αποστάσεις $d \gg L$, όπου η μεταβολή του d δεν επηρεάζει το ηλεκτρικό πεδίο και ο παράγοντας κλιμάκωσης παραμένει σταθερός.

Ο εκθέτης λ μπορεί να υπολογιστεί για διάφορες γεωμετρίες του εκπομπού. Επαναλαμβάνοντας τους υπολογισμούς βρίσκουμε ότι ο λ εξαρτάται μόνο από τη γωνία ω . Οι αριθμητικές του τιμές κυμαίνονται μεταξύ $0.137 < \lambda < 0.165$ για $6^\circ < \omega < 12^\circ$ με τη συνάρτηση $\lambda(\omega)$ να αυξάνει σχεδόν γραμμικά. Οι τιμές αυτές έρχονται σε συμφωνία με τις τιμές που προβλέφθηκαν στην παράγραφο 4.2 για εντελώς κωνικό εκπομπό. Η πειραματική τιμή 0.2 είναι ελαφρώς υψηλότερη από αυτές, κάτι το οποίο μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι οι εκπομποί που χρησιμοποιούνται δεν είναι εντελώς κωνικοί αλλά η γωνία του ανοίγματός τους ελαφρώς αυξάνει προκαλώντας αντίστοιχη αύξηση στο λ .



Σχήμα 4.13: Τάση που απαιτείται για να κρατήσει σταθερό το πεδίο $F(\theta=30^\circ, d)$ ως συνάρτηση του d . Οι άξονες είναι και οι δύο σε λογαριθμική κλίμακα. Οι ευθείες διακεκομμένες γραμμές δείχνουν τις περιοχές που ισχύουν νόμοι δύναμης.

Να σημειώσουμε εδώ ότι ο νόμος δύναμης εμφανίστηκε στους υπολογισμούς μας μόνο όταν κρατήθηκε ένα κωνικό προφίλ στην στοίβα των σφαιρών. Όταν το προφίλ των ακτίνων

τους είχε οποιαδήποτε άλλη μορφή από τη γεωμετρική αύξηση, δεν εμφανιζόταν ευθεία γραμμή στο διάγραμμα log-log. Συνεπώς θα μπορούσαμε να καταλήξουμε σε τρεις συνθήκες για να ισχύει ο νόμος δύναμης για τον παράγοντα κλιμάκωσης $R(d)$:

- Ο εκπομπός να ακολουθεί ένα γραμμικό ή περίπου γραμμικό προφίλ
- Η απόσταση d να είναι πολύ μεγαλύτερη από την ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή
- Η απόσταση d να είναι πολύ μικρότερη από το μήκος του εκπομπού (το μήκος στο οποίο διατηρείται κωνικό προφίλ).

Και οι τρεις παραπάνω συνθήκες ισχύουν για τα πειράματα στα οποία λήφθηκαν οι μετρήσεις των διαγραμμάτων της προηγούμενης ενότητας. Όπου δεν ισχύουν, ο εκθέτης δεν παραμένει σταθερός, όπως φαίνεται από την προς τα κάτω καμπύλωση των καμπυλών του σχήματος 4.4 για $d < 10\text{nm}$ (παραβιάζεται η συνθήκη (ii)). Επίσης, στο σχήμα 4.2a ο εκθέτης είναι πολύ μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο μικρών αποστάσεων λόγω του ότι σε τέτοιας τάξης μεγέθους αποστάσεις (nm) από την κορυφή, το σχήμα του εκπομπού είναι κάθε άλλο παρά κωνικό και συνεπώς παραβιάζεται η συνθήκη (iii).

4.4. Συμπεράσματα

Στο παρόν κεφάλαιο δείξαμε θεωρητικά αλλά και πειραματικά τις ιδιότητες κλιμάκωσης της τάσης μιας επαφής σήραγγας, όταν αλλάζει η απόσταση μεταξύ ανόδου και καθόδου. Δείξαμε ότι τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά παραμένουν σχεδόν αμετάβλητα για όλες τις αποστάσεις αρκεί να κλιμακωθεί κατάλληλα η τάση, δηλαδή να πολλαπλασιαστεί με μία σταθερά (διαφορετική για κάθε απόσταση). Επίσης δώσαμε υπολογισμούς που δείχνουν ότι το ηλεκτροστατικό δυναμικό κοντά στο σημείο που εκπέμπονται τα ηλεκτρόνια παραμένει σχεδόν σταθερό υπό τις παραπάνω συνθήκες κλιμάκωσης.

Τα παραπάνω δεδομένα δείχνουν τις δυνατότητες κλιμάκωσης των διατάξεων επαφής σήραγγας. Επίσης, από θεωρητικής πλευράς, δείχνουν ότι η διαδικασία υπολογισμών και προσομοίωσης τέτοιων διατάξεων μπορεί να απλοποιηθεί πολύ, δεδομένου ότι η μορφή του ηλεκτροστατικού δυναμικού (υπό την αβεβαιότητα μιας πολλαπλασιαστικής σταθεράς) παραμένει αμετάβλητη (τουλάχιστον σε 2^{15} τάξης προσέγγιση) για όλες σχεδόν τις αποστάσεις.

Κεφάλαιο 5: Γενίκευση της θεωρίας και της εξίσωσης Fowler-Nordheim για αιχμηρούς εκπομπούς

5.1. Εισαγωγή

Η εξίσωση και η θεωρία Fowler-Nordheim (F-N) [10, 30] είχε αναπτυχθεί από το 1928 και αφορούσε εκπομπή ηλεκτρονίων από επίπεδες επιφάνειες. Ωστόσο χρησιμοποιήθηκε για σχεδόν έναν αιώνα και για καμπυλωμένους εκπομπούς, κάτι το οποίο υπό προϋποθέσεις δεν είναι λάθος. Μία καμπυλωμένη επιφάνεια μπορεί να θεωρηθεί σχεδόν επίπεδη ως προς τη συμπεριφορά φαινομένων σήραγγας, όταν η ακτίνα καμπυλότητάς της R είναι πολύ μικρότερη από το μήκος L της κλασσικά απαγορευμένης περιοχής, δηλαδή της περιοχής που λαμβάνει χώρα το φαινόμενο σήραγγας. Συνεπώς, ακόμα κι όταν ένας εκπομπός δεν είναι εντελώς επίπεδος μπορεί να λαμβάνεται ως τέτοιος, υπό την προϋπόθεση ότι $L \ll R$.

Στη σύγχρονη εποχή όμως, οι εκπομποί έχουν γίνει εξαιρετικά αιχμηροί και η παραπάνω συνθήκη συχνά δεν ισχύει. Το μήκος L είναι πάντα περίπου το ίδιο στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων. Κυμαίνεται μεταξύ 0.5 και 1.5 nm για όλες σχεδόν τις πρακτικές περιπτώσεις όπου εκπέμπεται μετρήσιμο ρεύμα. Αυτό σημαίνει ότι, όταν η ακτίνα R είναι μεγαλύτερη από περίπου 20-30 nm, η παραπάνω συνθήκη ισχύει. Οι περισσότεροι σύγχρονοι εκπομποί έχουν ακτίνες καμπυλότητας κάτω από 20nm, ενώ σε αρκετές περιπτώσεις υπάρχουν εκπομποί με ακτίνες της τάξης του 1nm. Συνεπώς η κλασσική θεωρία και εξίσωση είναι ακατάλληλη για εφαρμογή σε σύγχρονους αιχμηρούς εκπομπούς.

Το παραπάνω πρόβλημα έχει δειχθεί εκτενώς από τη δεκαετία του 1990 μέχρι σήμερα, όπως αναλύσαμε στο πρώτο κεφάλαιο. Θυμίζουμε ότι οι Cutler κ.α. [41, 42, 40] απέδειξαν χρησιμοποιώντας τη μονοδιάστατη προσέγγιση JWKB ότι για αιχμηρούς εκπομπούς το διάγραμμα F-N δεν είναι ευθεία γραμμή αλλά παρουσιάζει μία καμπύλωση προς τα κάτω, η οποία για χαμηλά ρεύματα μπορεί να δώσει μερικές τάξεις μεγέθους μικρότερο προβλεπόμενο ρεύμα σε σχέση με την κλασσική εξίσωση F-N. Παρόμοια αποτελέσματα βρήκαν και οι Fursey και Glazanov [43] επιλύοντας πλήρως αριθμητικά την εξίσωση Schrodinger, και οι Fischer κ.α. [81] πιο πρόσφατα.

Έχουν γίνει επίσης προσπάθειες από τον Edgcombe [44, 45, 82] να εξαχθεί αναλυτικά μία εξίσωση που να γενικεύει την εξίσωση F-N για σφαιρικούς εκπομπούς. Ωστόσο, όπως είδαμε αναλυτικά και στο πρώτο κεφάλαιο, χρησιμοποιείται το σφαιρικό μοντέλο για το σχήμα της καθόδου και τη μορφή που παίρνει το ηλεκτροστατικό δυναμικό, ενώ οι εξισώσεις που εξάγονται περιέχουν πολύπλοκες συναρτήσεις 2 μεταβλητών, οι οποίες πρέπει να υπολογιστούν μέσα από αριθμητική ολοκλήρωση. Οι εξισώσεις αυτές είναι αρκετά δύσκολο να εφαρμοστούν σε πειραματικά δεδομένα.

Δεδομένων των παραπάνω, είναι απαραίτητο να αναπτυχθεί μία θεωρία που να γενικεύει την κλασική θεωρία F-N και να παράγει με αναλυτικό τρόπο, ξεκινώντας από βασικές αρχές, μία γενίκευση της εξίσωσης F-N κατάλληλη για αιχμηρές ακίδες οποιουδήποτε σχήματος. Στο κεφάλαιο αυτό θαδειχθεί ότι είναι δυνατή η ανάπτυξη μίας γενικής θεωρίας για αιχμηρούς εκπομπούς καθώς αποδεικνύεται αλγεβρικά ότι το δυναμικό στον άξονα συμμετρίας ενός αιχμηρού εκπομπού είναι, σε προσέγγιση 2^{ης} τάξης, ανεξάρτητο του είδους του σχήματος που παίρνει ο εκπομπός και εξαρτάται μόνο από την ακτίνα καμπυλότητας R . Θα αναπτύξουμε την εξίσωση αυτή πλήρως αλγεβρικά κάνοντας μόνο ασυμπτωτικές προσεγγίσεις. Το αποτέλεσμα περιλαμβάνει 2 νέες συναρτήσεις της συνήθους μεταβλητής

$y = \frac{e\sqrt{F}}{2\sqrt{\pi\epsilon_0 W}}$ που είναι ευρέως γνωστή από την κλασική θεωρία F-N. Για τις συναρτήσεις

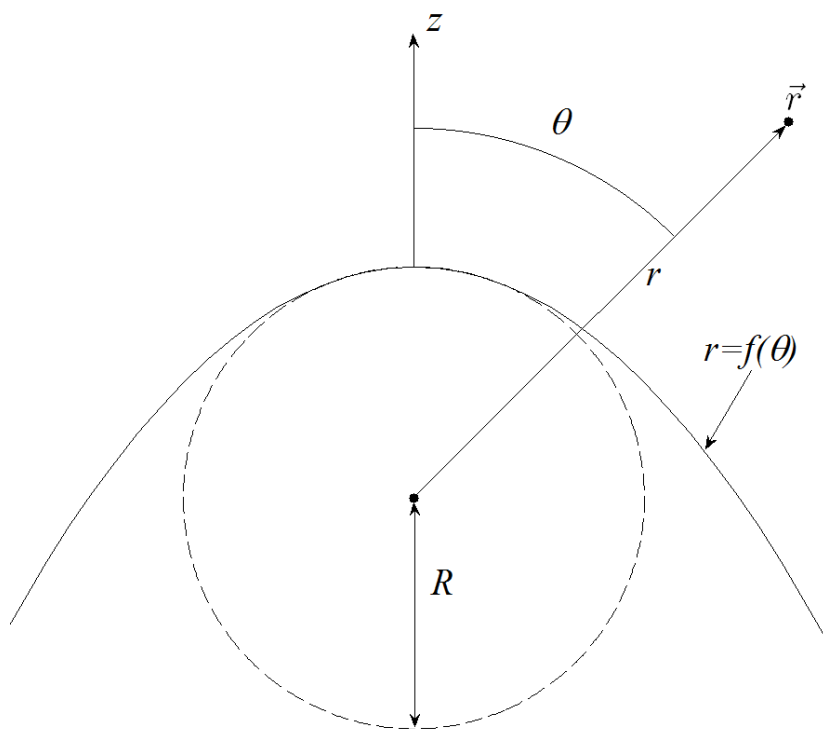
αυτές υπάρχει αναλυτική έκφραση. Επειδή όμως η έκφραση αυτή είναι αρκετά πολύπλοκη και περιλαμβάνει ελλειπτικά ολοκληρώματα, θα δοθούν απλές προσεγγίσεις των συναρτήσεων αυτών οι οποίες έχουν σφάλμα κάτω από 2% και μπορούν να χρησιμοποιηθούν πολύ εύκολα.

5.2. Το ηλεκτροστατικό δυναμικό στον άξονα ενός καμπυλωμένου εκπομπού

5.2.1. Ορισμός γεωμετρικού μοντέλου και μεταβλητών

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε μία διάταξη πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων που περιλαμβάνει μία αιχμηρή κάθοδο η οποία βρίσκεται σε μηδενικό δυναμικό και την επίπεδη άνοδο η οποία βρίσκεται σε δυναμικό V . Υποθέτουμε ότι η κάθοδος έχει κυλινδρική συμμετρία και ότι η επιφάνειά της είναι λεία και 2 φορές παραγωγίσιμη. Αφού υπάρχει αξονική

συμμετρία, η επιφάνεια της καθόδου περιγράφεται από μία καμπύλη του επιπέδου $x-z$ εκ περιστροφής. Η καμπύλη αυτή μπορεί να δοθεί από τη συνάρτηση $z=g(x)$ όπου η g είναι μία άρτια (λόγω της αξονικής συμμετρίας) συνάρτηση. Αφού η καμπύλη είναι 2 φορές παραγωγίσιμη, η ακτίνα καμπυλότητάς της μπορεί να ορισθεί σε κάθε σημείο της. Έστω R η ακτίνα καμπυλότητας της επιφάνειας στην κορυφή του εκπομπού (πάνω στον άξονα συμμετρίας z) όπως φαίνεται στο σχήμα 5.1. Ορίζουμε ένα σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων (r,θ,φ) με αρχή το κέντρο της σφαίρας καμπυλότητας της επιφάνειας στην κορυφή. Στο σύστημα αυτό η επιφάνεια δίνεται από την εξίσωση $r=f(\theta)$ όπου η συνάρτηση $f(\theta)$ είναι και πάλι άρτια.



Σχήμα 5.1: Γεωμετρία και συντεταγμένες

5.2.2. Ανάπτυξη του δυναμικού στον άξονα του εκπομπού

Εξ ορισμού του κύκλου καμπυλότητας, κοντά στην κορυφή ($r=R, \theta=0$) η συνάρτηση $f(\theta)$ μπορεί να περιγραφεί από την ασυμπτωτική σχέση $f(\theta)=R+O(\theta^3)$, $\theta \rightarrow 0$. Επειδή όμως η f

είναι άρτια, η σειρά McLaurin της έχει μόνο άρτιες δυνάμεις και συνεπώς η παραπάνω ασυμπτωτική σχέση γίνεται:

$$r = f(\theta) = R + O(\theta^4). \quad (5.1)$$

Στην επιφάνεια του εκπομπού το δυναμικό Φ είναι σταθερά 0 και συνεπώς:

$$\frac{d^n}{d\theta^n} \Phi(f(\theta), \theta) = 0 \quad \text{για } n=0,1,2 \quad (5.2)$$

Για $n=1$ η (5.2) γίνεται:

$$\frac{d\Phi}{d\theta} = \frac{\partial\Phi}{\partial r} f'(\theta) + \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} = 0 \quad (5.3)$$

και για $n=2$:

$$\frac{d^2\Phi}{d\theta^2} = \frac{\partial\Phi}{\partial r} f''(\theta) + \frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} [f'(\theta)]^2 + \frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta\partial r} f'(\theta) + \frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta^2} = 0. \quad (5.4)$$

Ας πάρουμε τώρα την (5.4) στην κορυφή ($\theta=0$). Από την (1) γίνεται προφανές ότι $f'(0) = f''(0) = 0$ και συνεπώς από την (5.3) και την (5.4) παίρνουμε:

$$\left. \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} \right|_{(r=R, \theta=0)} = \left. \frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta^2} \right|_{(r=R, \theta=0)} = 0. \quad (5.5)$$

Γράφουμε τώρα την εξίσωση Laplace σε σφαιρικές συντεταγμένες (οι φ -παράγωγοι μηδενίζονται λόγω κυλινδρικής συμμετρίας):

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} + \frac{\cot(\theta)}{r^2} \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta^2} = 0. \quad (5.6)$$

Παίρνοντας την (5.6) στην κορυφή και χρησιμοποιώντας την (5.5) καταλήγουμε:

$$\left. \frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} \right|_{(R,0)} = - \left. \frac{2}{R} \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right|_{(R,0)} = - \frac{2F}{R} \quad (5.7)$$

όπου F ορίζεται το αξονικό ηλεκτρικό στην κορυφή. Αν παραγωγίσουμε την (5.6) ως προς r , εύκολα παρατηρούμε ότι

$$\frac{\partial^3\Phi}{\partial r^3} = O\left(\frac{1}{R^2}\right), \frac{\partial^4\Phi}{\partial r^4} = O\left(\frac{1}{R^3}\right), R \rightarrow \infty \text{ κτλ.} \quad (5.8)$$

Ας αναπτύξουμε τώρα το δυναμικό κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα ($\theta=0$) σε πολυώνυμο Taylor γύρω από την κορυφή (θα χρησιμοποιήσουμε τη μεταβλητή $z=r-R$):

$$\Phi(z) = \Phi(0) + Fz + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} \right|_{(R,0)} z^2 + \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3\Phi}{\partial r^3} \right|_{(R,0)} z^3 + \dots = FR \left[\frac{z}{R} - \left(\frac{z}{R} \right)^2 + O\left(\left(\frac{z}{R} \right)^3 \right) \right] \quad (5.9)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε ότι $\Phi=0$ στην κάθοδο. Αξίζει να σημειωθεί ότι $F = O(1/R), R \rightarrow 0$ και συνεπώς ο παράγοντας FR στην (5.9) παραμένει $O(1)$ καθώς το R φθίνει.

5.2.3. Η τελική προσέγγιση για το δυναμικό και οι προϋποθέσεις εγκυρότητάς της

Η εξίσωση (5.9) αποτελεί κλειδί στην κατανόηση των προσεγγίσεων που γίνονται στη θεωρία της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων. Το ρεύμα φαινομένου σήραγγας καθορίζεται από το ηλεκτροστατικό δυναμικό εντός της απαγορευμένης περιοχής η οποία τυπικά έχει μήκος $L \sim 0.5-2\text{nm}$. Συνεπώς όταν $R > 50\text{nm}$, το να ληφθεί υπ' όψιν μόνο ο γραμμικός όρος της (5.9) (όπως έχει κάνει η θεωρία F-N για 90 χρόνια) δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα. Ωστόσο, όταν $R < 20\text{nm}$ το να παραλειφθεί ο τετραγωνικός όρος δημιουργεί σφάλμα περίπου 10% στον υπολογισμό του Φ , κάτι το οποίο είναι πολύ σημαντικό στον υπολογισμό ρευμάτων σήραγγας. Επιπροσθέτως, όταν $R < 5\text{nm}$ ούτε ο κυβικός όρος μπορεί να παραλειφθεί. Στο παρόν κεφάλαιο θα κρατήσουμε ως και τον τετραγωνικό όρο και θα προσπαθήσουμε να βρούμε μία γενική προσέγγιση για το ρεύμα σήραγγας η οποία είναι ακριβής για ακτίνες καμπυλότητας $R > 5\text{nm}$.

Αποδείξαμε λοιπόν ότι ο 2^{ος} όρος της ανάπτυξης του δυναμικού είναι ο ίδιος για όλες τις γεωμετρίες που μπορεί να έχει ο εκπομπός και εξαρτάται μόνο από την ακτίνα καμπυλότητάς του στην κορυφή. Το αποτέλεσμα αυτό είχε παρατηρηθεί για συγκεκριμένες μορφές δυναμικού στο παρελθόν. Συγκεκριμένα οι Cutler κ.α [42] το παρατήρησαν για τον υπερβολοειδή εκπομπό σε συνεστιακή απόσταση από την άνοδο, ενώ το βρήκαν και οι Edgcombe και De Jonge [45] για το μοντέλο της «σφαίρας πάνω σε κώνο». Στο προηγούμενο κεφάλαιο καθώς και στο [75], ο γράφων το απέδειξε για οποιαδήποτε ημισφαιρική επιφάνεια, ενώ εδώ η απόδειξη γενικεύεται για οποιαδήποτε λεία επιφάνεια με σφαιρική συμμετρία.

Ξαναγράφοντας την (5.9) και κρατώντας μέχρι τον τετραγωνικό όρο, το ηλεκτροστατικό δυναμικό κατά μήκος του άξονα γίνεται:

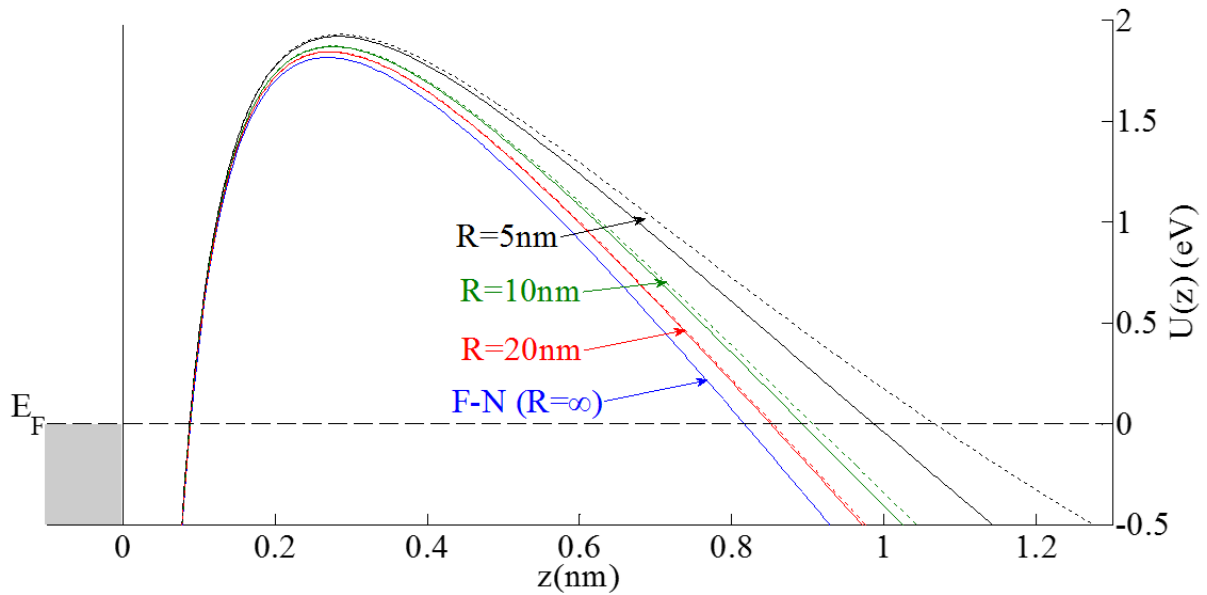
$$\Phi(z) = Fz + \frac{F}{R} z^2. \quad (5.10)$$

Προσθέτοντας την εικονική αλληλεπίδραση (image interaction) για σφαίρα και το έργο εξόδου W , παίρνουμε το φράγμα δυναμικού που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται στη στάθμη Fermi:

$$U(z) = W - eFz - \frac{b}{z(1+z/2R)} + \frac{eF}{R} z^2 \quad (5.11)$$

όπου $b = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0} \approx 0.36eVnm$. Στο σχήμα 5.2 επαληθεύουμε αριθμητικά την ορθότητα της προσέγγισης (5.11) για το δυναμικό. Βλέπουμε ότι για συνήθεις τιμές του ηλεκτρικού πεδίου

και του έργου εξόδου, η εξίσωση (5.11) έχει ικανοποιητική ακρίβεια όταν $R > 5\text{nm}$, ενώ και για μικρότερα R αποτελεί πολύ καλύτερη προσέγγιση από το κλασικό γραμμικό δυναμικό που ισχύει για επίπεδο εκπομπό.



Σχήμα 5.2: Σύγκριση του φράγματος δυναμικού όπως υπολογίζεται από την (5.11) (διακεκομμένες γραμμές) και όπως υπολογίζεται αριθμητικά από το ελλειψοειδές μοντέλο (όπως αναπτύχθηκε στο κεφάλαιο 2) για διάφορες ακτίνες καμπυλότητας. Το ηλεκτροστατικό πεδίο στην κορυφή ($z=0$) είναι σταθερό $F=5\text{V/nm}$ και το έργο εξόδου είναι $W=4.5\text{eV}$.

5.3. Η πυκνότητα ρεύματος σήραγγας στον άξονα

5.3.1. Αναλυτική προσέγγιση του ολοκληρώματος JWKB

Για να βρούμε τον εκθέτη Gamow G του ολοκληρώματος JWKB ολοκληρώνουμε το $U(z)$ μεταξύ των ριζών του z_1, z_2 .

$$G = g \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{W - eFz - \frac{b}{z(1+z/2R)} + \frac{eF}{R} z^2} dz \quad (5.12)$$

όπου $g = \frac{\sqrt{8m}}{\hbar} \approx 10.246 / \sqrt{eVnm}$.

Στο ολοκλήρωμα (5.12) μπορούμε να αλλάξουμε μεταβλητές $\zeta = \frac{eF}{W} z, x = \frac{W}{eFR}$,

$$y = \frac{2\sqrt{bF}}{W} \approx 1.2e\sqrt{Vnm} \frac{\sqrt{F}}{W} \text{ και βρίσκουμε:}$$

$$G = g \frac{W^{3/2}}{eF} \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \sqrt{1 - \zeta - \frac{y^2/4}{\zeta + x\zeta^2/2} + x\zeta^2} d\zeta. \quad (5.13)$$

Ας σημειωθεί ότι η μεταβλητή $x = \frac{W}{eFR}$ αποτελεί μέτρο της τάξης μεγέθους του μήκους της απαγορευμένης περιοχής L σε σχέση με την ακτίνα R . Συνεπώς, όπως έχει υποθεθεί παραπάνω, το x είναι πολύ μικρό (συνήθως κάτω από 0.1). Αν δεν είναι αρκετά μικρό, υψηλότερης τάξης όροι πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν στην (5.9) και βρισκόμαστε εκτός ορίων εγκυρότητας των προσεγγίσεων που γίνονται εδώ.

Στην παραπάνω έκφραση (5.13) μπορούμε να αναγνωρίσουμε τον όρο $\frac{2}{3} g \frac{W^{3/2}}{eF}$ ως τον εκθέτη Gamow της κλασικής θεωρίας για το ακριβώς τριγωνικό φράγμα. Το αδιάστατο ολοκλήρωμα που ακολουθεί

$$\Xi(x, y) = \frac{3}{2} \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \sqrt{1 - \zeta - \frac{y^2/4}{\zeta + x\zeta^2/2} + x\zeta^2} d\zeta \quad (5.14)$$

μπορεί να θεωρηθεί ως διόρθωση σε αυτό. Δεδομένου ότι $x \ll 1$ η συνάρτηση $\Xi(x, y)$ μπορεί να προσεγγιστεί γραμμικά στο x από την ανάπτυξη Taylor:

$$\Xi(x, y) = \Xi(0, y) + x \left. \frac{\partial \Xi}{\partial x} \right|_{x=0} + O(x^2), x \rightarrow 0 \quad (5.15)$$

Για να υπολογιστεί η παράγωγος $\frac{\partial \Xi}{\partial x}$, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο κανόνας του Leibniz [83], και δεδομένου ότι η ολοκληρωτέα ποσότητα μηδενίζεται στα όρια ολοκλήρωσης, το αποτέλεσμα για το G είναι:

$$\Xi(x, y) = \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \sqrt{1 - \zeta - y^2/4\zeta} d\zeta + x \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \frac{\zeta^2 + y^2/8}{2\sqrt{1 - \zeta - y^2/4\zeta}} d\zeta + O(x^2) \quad (5.16)$$

όπου ζ_1, ζ_2 είναι οι ρίζες του $1 - \zeta - y^2/4\zeta$.

Ορίζουμε:

$$\begin{aligned} v(y) &= \frac{3}{2} \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \sqrt{1 - \zeta - y^2/4\zeta} d\zeta \\ \omega(y) &= \frac{3}{4} \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \frac{\zeta^2 + y^2/8}{\sqrt{1 - \zeta - y^2/4\zeta}} d\zeta \end{aligned} \quad (5.17)$$

Στις παραπάνω σχέσεις η συνάρτηση $v(y)$ είναι η συνήθης συνάρτηση διόρθωσης για το φράγμα Schottky-Nordheim και αναλύεται διεξοδικά στη βιβλιογραφία της κλασσικής θεωρίας Fowler-Nordheim [32, 84, 33]. Η νέα συνάρτηση $\omega(y)$ θα ονομάζεται συνάρτηση διόρθωσης μη-γραμμικού δυναμικού. Και οι 2 αυτές συναρτήσεις έχουν αναλυτικές περιγραφές:

$$\begin{aligned} v(y) &= \sqrt{1+y} \left[E\left(\frac{1-y}{1+y}\right) - yK\left(\frac{1-y}{1+y}\right) \right] (a) \\ \omega(y) &= \frac{1}{20\sqrt{2}\sqrt{(y^2-1)(\sqrt{1-y^2}-1)}} \left[\frac{y^2 \left(16(\sqrt{1-y^2}+3) - 3y^2 \right) \sqrt[4]{1-y^2} \Re \left(K \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{1-y^2}} \right) \right)}{4\sqrt{2-2\sqrt{1-y^2}}} + \right. \\ &\quad \left. \left(16 - \frac{3y^2}{4} \right) \left(\begin{aligned} &\left(y^2 - \sqrt{1-y^2} - 1 \right) K \left(2 + \frac{2}{\sqrt{1-y^2} - 1} \right) + \\ &\left(y^2 + \sqrt{1-y^2} - 1 \right) E \left(2 + \frac{2}{\sqrt{1-y^2} - 1} \right) \end{aligned} \right) \right] (b) \end{aligned} \quad (5.18)$$

όπου $K(m)$ και $E(m)$ είναι οι πλήρεις ελλειπτικές συναρτήσεις του πρώτου και του δεύτερου είδους αντίστοιχα [31].

Ο τύπος που δίνει την $\omega(y)$ είναι όπως φαίνεται εξαιρετικά πολύπλοκος, ενώ παρόλο που ο τύπος για το $v(y)$ είναι απλούστερος, δεν έχει επικρατήσει η χρήση του, λόγω της σχετικής δυσκολίας του να υπολογιστούν οι ελλειπτικές συναρτήσεις. Οι τιμές του $v(y)$ είναι

καταγεγραμμένες σε πίνακες στη βιβλιογραφία [32] ενώ υπάρχουν διαθέσιμες απλές και ακριβείς προσεγγίσεις για την $v(y)$ οι οποίες βασίζονται στην ανάπτυξη της (5.17a) σε σειρά [84, 33].

Με παρόμοιο τρόπο θα προσεγγίσουμε τις τιμές της $\omega(y)$. Γνωρίζουμε ότι η $\omega(y)$ ακριβώς όπως και η $v(y)$ [33] μπορεί να αναπτυχθεί σε σειρά της μορφής [85] :

$$\omega(y) = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n y^{2n} + b_n y^{2n} \log y) \quad (5.19)$$

Η συντελεστές της παραπάνω σειράς είναι εύκολο να υπολογιστούν με χρήση κάποιου μαθηματικού εργαλείου όπως το Mathematica, αλλά για λόγους απλότητας και ακρίβειας είναι καλύτερο να κρατήσουμε όρους μέχρι 2^{15} τάξης και να προσαρμόσουμε τους συντελεστές με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Καταλήγουμε στο εξής αποτέλεσμα (το αποτέλεσμα για τη v είναι κατ' ευθείαν από το [33]):

$$\begin{aligned} v(y) &\approx 1 - y^2 - (y^2 \ln y) / 3 \\ \omega(y) &\approx 4/5 - 7y^2 / 40 - (y^2 \ln y) / 100 \end{aligned} \quad (5.20)$$

Επίσης υπολογίζουμε τις αριθμητικές τιμές των συναρτήσεων αυτών με τη βοήθεια του mathematica και αποθηκεύουμε τις τιμές τους σε ηλεκτρονικούς πίνακες. Οποτεδήποτε χρειάζεται ο υπολογισμός των συναρτήσεων αυτών η γρηγορότερη και ακριβέστερη μέθοδος είναι να ανασύρουμε τους πίνακες αυτούς και να χρησιμοποιήσουμε γραμμική παρεμβολή.

5.3.2. Πυκνότητα ρεύματος: Η τελική εξίσωση

Το εκπεμπόμενο ρεύμα από μέταλλα μη περιορισμένων διαστάσεων (bulk) μπορεί να βρεθεί τώρα χρησιμοποιώντας την κλασική σχέση (1.51) που χρησιμοποιείται στη θεωρία F-N και στηρίζεται στη γραμμική προσέγγιση της εξάρτησης του εκθέτη G από το έργο εξόδου [21, 86]:

$$J = Z_s \left[\frac{\partial G}{\partial W} \right]^{-2} \exp(-G) \quad (5.21)$$

όπου $Z_s = \frac{4\pi em}{h^3} = 1.62 \times 10^5 \frac{nA}{(eV)^2 nm^2}$ γνωστή και ως «σταθερά παροχής ηλεκτρονίων

Sommerfeld» (“Sommerfeld’s electron supply constant”) [87, 86]. Αντικαθιστώντας από την (5.13) παίρνουμε την τελική μορφή της εξίσωσης που είναι:

$$J = \frac{Z_s}{g^2} \frac{F^2}{W} \left(t(y) + \frac{W}{eFR} \psi(y) \right)^{-2} \exp \left[-\frac{2}{3} g \left(\frac{W^{3/2}}{eF} v(y) + \frac{1}{R} \frac{W^{5/2}}{(eF)^2} \omega(y) \right) \right] \quad (5.22)$$

με

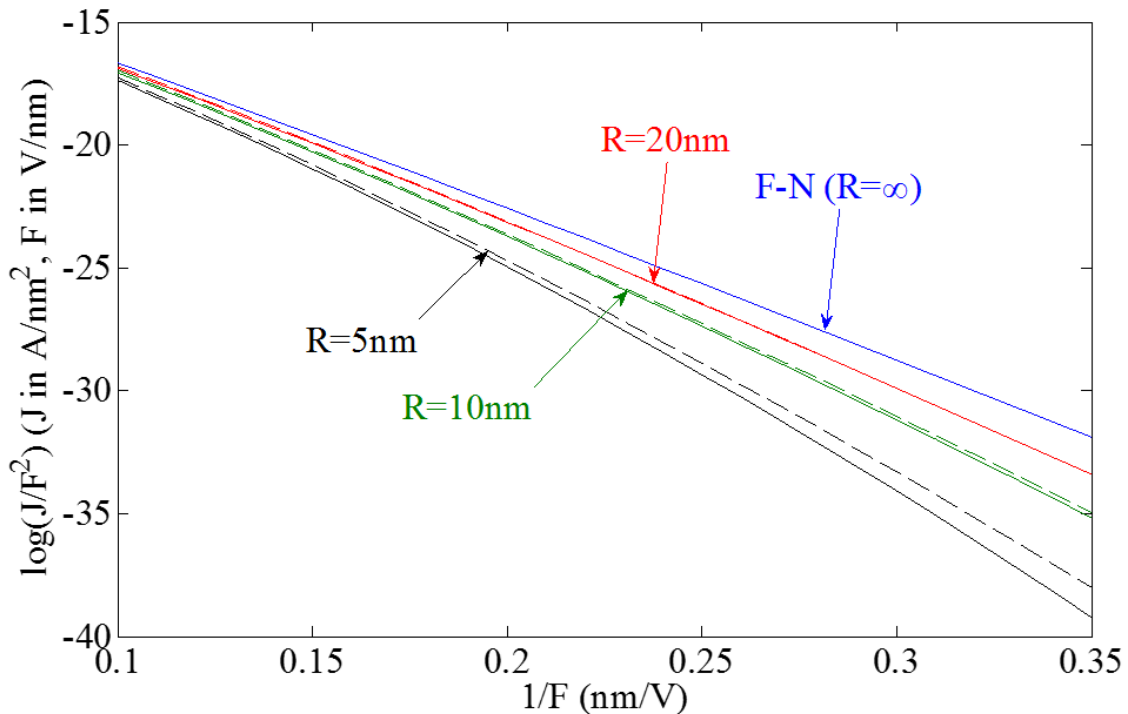
$$t(y) = v(y) - \frac{2}{3} y \frac{\partial v}{\partial y} \approx 1 + y^2/9 - (y^2 \ln y)/11, \quad (5.23)$$

$$\psi(y) = \frac{5}{3} \omega(y) - \frac{2}{3} y \frac{\partial \omega}{\partial y} \approx 4/3 - y^2/500 - (y^2 \ln y)/15$$

Οι προσεγγίσεις για τις τιμές των $t(y)$ και $\psi(y)$ έγιναν με τον ίδιο τρόπο όπως στην (5.19), προσαρμόζοντας τους συντελεστές μέχρι 2^{ης} τάξης της σειράς (5.19). Οι τιμές των t , ψ είναι και αυτές υπολογισμένες και αποθηκευμένες σε πίνακες για εύκολη και γρήγορη χρήση.

Πρέπει να σημειώσουμε ότι η εξίσωση (5.22) είναι τύπου F-N και ότι αποτελεί επέκταση της κλασσικής εξίσωσης F-N. Παρατηρούμε ότι στο όριο $(W/eFR) \rightarrow 0$, δηλαδή στο όριο όπου το μήκος της απαγορευμένης περιοχής $L \approx W/eF$ γίνεται αμελητέο σε σχέση με την ακτίνα καμπυλότητας, η (5.22) ελαττώνεται στην κλασσική εξίσωση F-N, όπως άλλωστε ήταν εξ αρχής αναμενόμενο.

Στο σχήμα 5.3 επαληθεύουμε την ορθότητα της εξίσωσης (5.22). Βλέπουμε ότι όπως και στο σχήμα 5.2, οι προσεγγίσεις που έγιναν και η εξίσωση (5.22) είναι ορθές για συνήθεις τιμές του ηλεκτρικού πεδίου για ακτίνες καμπυλότητας $R > 5\text{-}6\text{nm}$ ενώ και κάτω από αυτό το όριο δίνει αποτελέσματα τάξεις μεγέθους καλύτερα από την κλασσική εξίσωση F-N.



Σχήμα 5.3: Σύγκριση της υπολογιζόμενης πυκνότητας ρεύματος από την (5.21) (διακεκομμένες γραμμές) με την υπολογιζόμενη αριθμητικά με βάση το ελλειψοειδές μοντέλο του 3^{ου} κεφαλαίου (κανονικές γραμμές) για διάφορα R . Το γράφημα είναι διάγραμμα F-N πυκνότητας ρεύματος-ηλεκτρικού πεδίου. Το έργο εξόδου είναι σταθερό $W=4.5\text{eV}$.

5.4. Από την πυκνότητα ρεύματος στο ρεύμα: υπολογισμός της ενεργού επιφάνειας εκπομπής

5.4.1. Γενικά περί ενεργού επιφάνειας εκπομπής (effective emission area)

Στις προηγούμενες παραγράφους αναπτύξαμε τη θεωρία που υπολογίζει την πυκνότητα ρεύματος στην κατεύθυνση του άξονα συμμετρίας του εκπομπού. Ωστόσο η μετρήσιμη ποσότητα είναι το ολικό ρεύμα που εκπέμπεται από την επιφάνεια και όχι η πυκνότητα ρεύματος στον άξονα. Για να υπολογιστεί το ολικό ρεύμα πρέπει να υπολογιστεί η πυκνότητα ρεύματος σε κάθε σημείο της επιφάνειας και στη συνέχεια να γίνει το επιφανειακό ολοκλήρωμα:

$$I = \iint_{\text{emitting surface}} \vec{J} \cdot d\vec{S} = \quad (5.24)$$

Στην κλασσική θεωρία F-N, το παραπάνω πρόβλημα λύνεται εισάγοντας την έννοια της ενεργού επιφάνειας (effective area) [86] η οποία ορίζεται ως η επιφάνεια που πρέπει να πολλαπλασιαστεί η πυκνότητα ρεύματος στον άξονα για να προκύψει το ίδιο ολικό ρεύμα:

$$A_{\text{eff}} = I / J_0 \quad . \quad (5.25)$$

Η ενεργός επιφάνεια στην κλασσική θεωρία θεωρείται σταθερή για την ίδια γεωμετρία οπότε δεν αλλάζει τη μορφή της εξίσωσης F-N πέρα από μία πολλαπλασιαστική σταθερά. Ωστόσο η τιμή της παραμένει μία άγνωστη και προσαρμόσιμη παράμετρος.

Στην πραγματικότητα για καμπυλωμένους εκπομπούς η ενεργός επιφάνεια δεν είναι σταθερή αλλά μεταβάλλεται και με το ηλεκτρικό πεδίο και με το έργο εξόδου. Ωστόσο, η τιμή της αλλάζει εξαιρετικά αργά σε σχέση με την πυκνότητα ρεύματος J_0 . Πράγματι, όπως γίνεται προφανές από την εξίσωση F-N αλλά και από την επέκτασή της (5.22), η πυκνότητα ρεύματος αλλάζει εκθετικά με το επιβαλλόμενο πεδίο F . Αντίθετα, όπως προκύπτει από αριθμητικούς υπολογισμούς και αναλυτικές προσεγγίσεις που γίνονται παρακάτω, αλλά και από υπολογισμούς που υπάρχουν στη βιβλιογραφία [44, 39], η A_{eff} αλλάζει περίπου γραμμικά με το F . Συνεπώς δεν συνεισφέρει ουσιαστικά στην μεταβολή του διαγράμματος F-N και ορθώς λαμβάνεται περίπου σταθερή στη βιβλιογραφία.

Όπως είπαμε παραπάνω, για να υπολογιστεί η ενεργός επιφάνεια πρέπει να υπολογιστεί η πυκνότητα ρεύματος σε όλη την επιφάνεια και να γίνει το ολοκλήρωμα (5.24). Καταλαβαίνουμε ότι ένας τέτοιος υπολογισμός είναι εξαιρετικά δύσκολο να γίνει αναλυτικά,

εκτός αν η επιφάνεια και το δυναμικό παίρνουν συγκεκριμένες απλές μορφές όπως στο σφαιρικό ή το υπερβολοειδές μοντέλο [44, 39]. Επίσης, είναι αναμενόμενο αλλά θα δειχθεί και παρακάτω από αριθμητικούς υπολογισμούς, ότι η ενεργός επιφάνεια εξαρτάται από τη γεωμετρία της εκπέμπουσας επιφάνειας, και συνεπώς είναι αδύνατον να βρεθεί μία ακριβής γενική προσέγγιση για όλες τις γεωμετρίες όπως βρέθηκε για το J .

Στο κεφάλαιο αυτό θα προσπαθήσουμε να βρούμε μία χοντρική προσέγγιση της ενεργού περιοχής και του πώς μεταβάλλεται αυτή με τις διάφορες παραμέτρους. Η προσέγγιση αυτή μπορεί να έχει σφάλμα ως και ενός παράγοντα διπλασιασμού σε σχέση με τα αριθμητικά αποτελέσματα, αλλά μπορεί να χρησιμεύσει για μια εκτίμηση της τάξης μεγέθους της ενεργού περιοχής και του πώς αυτή μεταβάλλεται. Στην επόμενη ενότητα 5.5 που θα χρησιμοποιήσουμε την θεωρία μας για να εξάγουμε πληροφορίες από μετρήσεις τάσης-ρεύματος, κρίνεται καλύτερη προσέγγιση να χρησιμοποιηθεί μία σταθερή ενεργός επιφάνεια. Ας δούμε στη συνέχεια την αλγεβρική προσέγγιση.

5.4.2. Αναλυτική προσέγγιση για την ενεργό περιοχή

Δεδομένου ότι η επιφάνεια του εκπομπού περιγράφεται από την εξίσωση (5.1), το επιφανειακό ολοκλήρωμα μπορεί να γραφεί μετά από απλές πράξεις ως ολοκλήρωμα πάνω στη γωνία θ ως εξής:

$$I = 2\pi \int_0^{\pi} J(\theta) f(\theta) \sin(\theta) (f'(\theta)^2 + f(\theta)^2)^{1/2} d\theta. \quad (5.26)$$

Στην παραπάνω εξίσωση το $J(\theta)$ είναι η πυκνότητα ρεύματος που εκπέμπεται από ένα σημείο της επιφάνειας $(f(\theta), \theta)$. Γνωρίζουμε ότι το $J(\theta)$ φθίνει περίπου εκθετικά με το θ και συνεπώς ο λογάριθμός του φθίνει περίπου γραμμικά. Αν αναπτύξουμε σε σειρά McLaurin το $\log[J(\theta)]$ λαμβάνουμε:

$$J(\theta) = J(0) \exp[-\gamma\theta^2 + O(\theta^4)], \theta \rightarrow 0 \quad (5.27)$$

όπου $\gamma = -J''(0)/2J(0) > 0$. Χρησιμοποιώντας το παραπάνω, σε συνδυασμό με την (5.1), η εξίσωση (5.26) παίρνει τη μορφή:

$$I = 2\pi J(0) \int_0^{\pi} \exp[-\gamma\theta^2 + O(\theta^4)] [R + O(\theta^4)] \left[\theta - \frac{\theta^3}{6} + O(\theta^5) \right] \left[(O(\theta^3))^2 + [R + O(\theta^4)]^2 \right]^{1/2} d\theta. \quad (5.28)$$

Κάνουμε αλλαγή μεταβλητής $\lambda = \theta^2$ και έχουμε:

$$I = \pi J(0) \int_0^{\pi^2} \exp[-\gamma\lambda + O(\lambda^2)] [R + O(\lambda^2)] \left[1 - \frac{\lambda}{6} + O(\lambda^2)\right] \left[O(\lambda^3) + [R + O(\lambda^2)]^2\right]^{1/2} d\lambda. \quad (5.29)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις, το γ είναι αρκετά μεγάλο και συνεπώς μπορούμε να προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα της (5.29) με μία ασυμπτωτική ανάπτυξη για $\gamma \rightarrow \infty$, χρησιμοποιώντας το λήμμα Watson [88]

$$I = J(0)\pi R^2 \left[\frac{1}{\gamma} - \frac{1}{6\gamma^2} + O\left(\frac{1}{\gamma^3}\right) \right], \gamma \rightarrow \infty. \quad (5.30)$$

Στη συνέχεια πρέπει να δούμε πώς υπολογίζεται το γ . Χρησιμοποιούμε τη συνήθη έκφραση για τη δεύτερη παράγωγο και έχουμε:

$$\gamma = -\frac{J''(0)}{2J(0)} = -\frac{1}{2J(0)} \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{J(\theta) - 2J(0) + J(-\theta)}{\theta^2} = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{1 - J(\theta)/J(0)}{\theta^2}. \quad (5.31)$$

Όταν $\theta \rightarrow 0$ η καμπύλη ολοκλήρωσης της τρισδιάστατης προσέγγισης JWKB, αλλά και η μορφή του δυναμικού (5.11) παραμένουν ίδιες με το σημείο 0, ενώ το μόνο που αλλάζει είναι η τιμή του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια F , ή διαφορετικά είναι το μόνο που αλλάζει σαν $O(\theta^2)$. Συνεπώς θα χρησιμοποιήσουμε το αποτέλεσμα της εξίσωσης (5.22). Το ηλεκτρικό πεδίο σε μία γωνία $\theta \ll 1$ μπορεί να εκφραστεί σαν $F(\theta) = F(0)[1 - \kappa\theta^2 + O(\theta^4)]$. Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα το αντίστροφο του F καθώς γνωρίζουμε ότι το $\log(J)$ μεταβάλλεται περίπου γραμμικά με αυτό. Έχουμε:

$$X(\theta) = \frac{1}{F(\theta)} = X(0) [1 + \kappa\theta^2 + O(\theta^4)] \quad (5.32)$$

όπου $\kappa = -\frac{1}{2F(0)} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial \theta^2 \partial r}$ είναι μία θετική σταθερά η οποία εξαρτάται μόνο από τη γεωμετρία

της διάταξης και έχει τιμές γύρω από το 0.1. Στη θεωρία της πεδριακής εκπομπής ηλεκτρονίων από σφαιρικές επιφάνειες, το κ παίρνει την τιμή 0.077 [45]. Αν αναπτύξουμε το $\log(J)$ ως συνάρτηση του X γύρω από το $X(0)$ λαμβάνουμε $J(\theta) = J(0) \exp[-\alpha\kappa X(0)\theta^2 + O(\theta^4)]$, όπου

$\alpha = -\frac{\partial \log(J)}{\partial X}$ είναι η κλίση του διαγράμματος $\log(J)-F^{-1}$ και είναι συνάρτηση των F, W και R .

Η κλίση α είναι περίπου σταθερή με το F και μπορεί να υπολογιστεί εύκολα από την εξίσωση (5.22). Επιστρέφοντας στην εξίσωση (5.31), βρίσκουμε τελικώς ότι $\gamma = \alpha\kappa / F$ και η ενεργός περιοχή εκπομπής παίρνει την τελική μορφή :

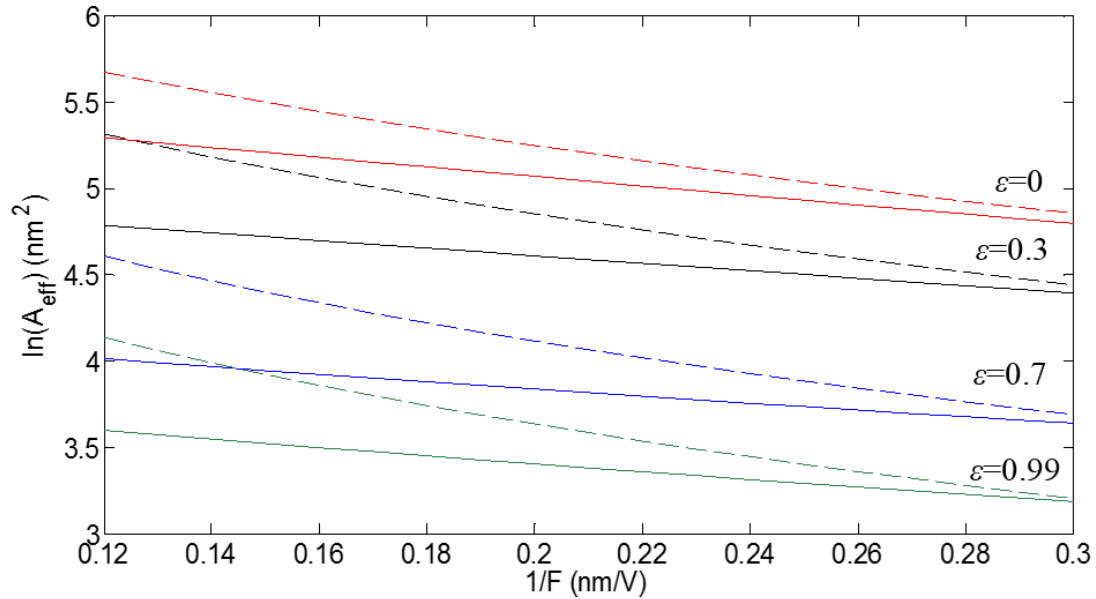
$$A_{eff} = \pi R^2 \left(\frac{F}{\alpha \kappa} - \frac{F^2}{6(\alpha \kappa)^2} \right) \quad (5.33)$$

Σημειώνουμε ότι η (5.30) άρα και η (5.33) είναι ασυμπτωτική και πιθανώς μη συγκλίνουσα προσέγγιση για $\gamma \rightarrow \infty$. Συνεπώς το να προσθέσουμε και άλλους όρους δεν ελαττώνει απαραίτητα το σφάλμα. Για πεπερασμένες και σχετικά μικρές τιμές του γ πιθανώς προβλέπει έως και δύο φορές μεγαλύτερη ενεργό περιοχή από αντίστοιχους αριθμητικούς υπολογισμούς. Ο παράγοντας κ ο οποίος είναι ανάλογος του γ εξαρτάται έντονα από τη γεωμετρία και μπορεί να υπολογιστεί μόνο αριθμητικά. Υπολογίζοντας το κ για το ελλειψοειδές μοντέλο, και βρήκαμε ότι αλλάζει από 0.07 για σφαιρική επιφάνεια (εκκεντρότητα 0) έως και 0.5 όταν η εκκεντρότητα πλησιάζει στο 1. Από την άλλη, η κλίση α εξαρτάται από το R και το W . Κυμαίνεται από 70 ως 150 για όλες τις πρακτικές περιπτώσεις. Συνεπώς το γ αλλάζει από 1 μέχρι 20, κάτι το οποίο δείχνει ότι η προσέγγισή μας δεν είναι πάντοτε ακριβής.

5.4.3. Αριθμητικοί υπολογισμοί για την ενεργό περιοχή και σύγκριση με την αναλυτική προσέγγιση

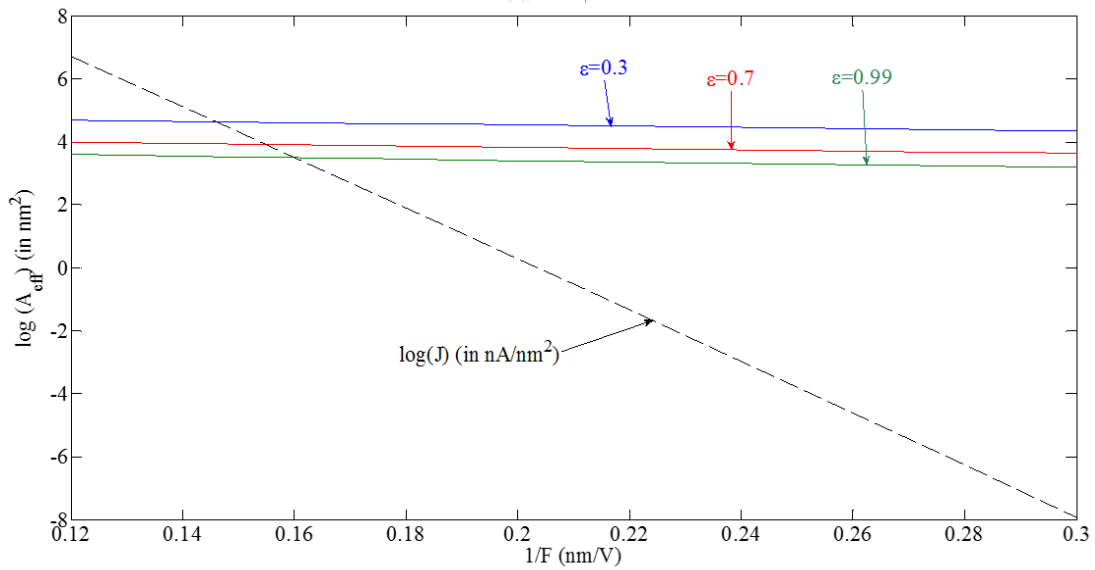
Για να κατανοήσουμε καλύτερα τη συμπεριφορά της ενεργού περιοχής με το μεταβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο, θα την υπολογίσουμε αριθμητικά. Βάσει του μοντέλου των ελλειψοειδών που αναπτύχθηκε στο κεφάλαιο 2, υπολογίζουμε την ενεργό περιοχή από τις σχέσεις (5.24) και (5.25), για την ίδια ακτίνα καμπυλότητας και διάφορες εκκεντρότητες. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο σχήμα 5.4 (συμπαγείς γραμμές) μαζί με τα αντίστοιχα που προκύπτουν από την εξίσωση (5.33) (διακεκομμένες γραμμές). Είναι προφανές ότι ακόμα και για την ίδια ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή, όταν η γεωμετρία του εκπομπού αλλάζει, επηρεάζεται πολύ η ενεργός επιφάνεια, κάτι που αποδεικνύει ότι είναι δύσκολο να βρεθεί ακριβής γενική θεωρία για αυτήν.

Φαίνεται επίσης ότι η εξίσωση (5.33) δίνει λογικά αποτελέσματα που είναι κοντά στους αριθμητικούς υπολογισμούς, αλλά ωστόσο δεν είναι αρκετά ακριβής ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί αξιόπιστα για εξαγωγή παραμέτρων από πειραματικά δεδομένα. Αυτό για το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί είναι για να έχουμε μία χοντρική εκτίμηση της ενεργού περιοχής.



Σχήμα 5.4: Η ενεργός περιοχή ως συνάρτηση του εφαρμοζόμενου πεδίου σε λογαριθμική κλίμακα. Οι συμπαγείς γραμμές προέρχονται από τον αριθμητικό υπολογισμό με το ελλειψοειδές μοντέλο ενώ οι διακεκομμένες από την εξίσωση 5.33, στην οποία ο παράγοντας κ έχει υπολογιστεί αριθμητικά μέσω του ελλειψοειδούς μοντέλου. Τα διάφορα χρώματα αντιστοιχούν σε διαφορετικές εκκεντρότητες ε της έλλειψης, ενώ η ακτίνα καμπυλότητας παραμένει σταθερή $R=10\text{nm}$. Κόκκινο: $\varepsilon=0$ (σφαίρα), μαύρο: $\varepsilon=0.3$, μπλε: $\varepsilon=0.7$, πράσινο: $\varepsilon=0.99$.

Στο σχήμα 5.5 φαίνεται η ενεργός περιοχή του διαγράμματος 5.4 στο ίδιο διάγραμμα με την πυκνότητα ρεύματος (λογαριθμική κλίμακα). Βλέπουμε ότι σε σχέση με την τεράστια μεταβολή της πυκνότητας ρεύματος (πάνω από 6 τάξεις μεγέθους) η ενεργός επιφάνεια παραμένει πρακτικά σταθερή. Συνεπώς, όταν εξάγουμε στοιχεία από πειραματικές μετρήσεις δεν προκαλούνται σημαντικά σφάλματα αν τη λάβουμε σταθερή. Αντίθετα, αν χρησιμοποιήσουμε την (5.33) εισάγουμε μεγαλύτερη κλίση στο διάγραμμα F-N καθώς και προς τα πάνω καμπυλότητα, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.4. Οι διακεκομμένες γραμμές έχουν και μεγαλύτερη κλίση και μεγαλύτερη προς τα πάνω καμπυλότητα σε σχέση με τις συμπαγείς. Αντίθετα αν λάβουμε σταθερή A_{eff} , αφαιρούμε ελάχιστη κλίση σε σχέση με τους αριθμητικούς υπολογισμούς.



Σχήμα 5.5: Πυκνότητα ρεύματος όπως υπολογίζεται από την (5.22) μαζί με την υπολογιζόμενη αριθμητικά από το ελλειψοειδές μοντέλο ενεργό περιοχή συναρτήσει του ηλεκτρικού πεδίου σε λογαριθμική κλίμακα για διάφορες εκκεντρότητες. Για την πυκνότητα ρεύματος είναι $R=10\text{nm}$, $W=4.5\text{eV}$ ενώ για την ενεργό περιοχή έχουν χρησιμοποιηθεί οι ίδιες παράμετροι με τις εκκεντρότητες της έλλειψης να είναι 0.3 (Μπλε), 0.7 (Κόκκινο), 0.99 (Πράσινο).

5.5. Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα και εξαγωγή της ακτίνας καμπυλότητας της καθόδου από μετρήσεις τάσης-ρεύματος

5.5.1. Γενικά περί ανάλυσης πειραματικών δεδομένων I-V

Στην παράγραφο αυτή θα συγκρίνουμε τη θεωρία που αναπτύχθηκε στις προηγούμενες με πειραματικά δεδομένα. Τα μετρήσιμα πειραματικά μεγέθη είναι διαφορετικά από τα θεωρητικά μεγέθη τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στις προηγούμενες παραγράφους. Συνεπώς πρέπει να βρεθούν τρόποι με τους οποίους μεταβαίνουμε από τα πειραματικά μεγέθη στα θεωρητικά.

Το πείραμα με το οποίο ασχολούμαστε είναι η μέτρηση τάσης-ρεύματος σε μία διάταξη πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων. Δηλαδή μέτρηση του ολικού εκπεμπόμενου ρεύματος I από την κάθοδο για διάφορες επιβαλλόμενες τάσεις ανόδου-καθόδου V . Τα θεωρητικά μεγέθη τα οποία υπολογίζονται από την εξίσωση F-N αλλά και από τη γενίκευσή της, την (5.21), είναι το ηλεκτρικό πεδίο F στην κορυφή της καθόδου και η πυκνότητα ρεύματος στον άξονα της

καθόδου. Ο τρόπος με τον οποίο μεταβαίνουμε από τα θεωρητικά μεγέθη J, F στα πειραματικά V, I είναι συνήθως από τότε που αναπτύχθηκε η θεωρία F-N.

Το ηλεκτρικό πεδίο συνδέεται γραμμικά με την επιβαλλόμενη τάση μέσω της σχέσης $F = \beta V$ όπου β είναι μία σταθερά που εξαρτάται από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά και έχει διαστάσεις αντίστροφου μήκους και συνήθως αποκαλείται παράγοντας ενίσχυσης (enhancement factor). Η γραμμική σχέση μεταξύ πεδίου και τάσης προκύπτει από τη γραμμικότητα της εξίσωσης Laplace και τη μοναδικότητα της λύσης της. Η απόδειξή της είναι πολύ απλή.

Το ηλεκτρικό ρεύμα συνδέεται με την πυκνότητα ρεύματος πάλι γραμμικά μέσω της σχέσης $I = \sigma A_{eff} J$ όπου A_{eff} είναι η ενεργός επιφάνεια της προηγούμενης παραγράφου και σ είναι παράγοντας διόρθωσης μεταξύ θεωρητικού και πειραματικού ρεύματος [35]. Ο σ περιλαμβάνει όλες τις απαραίτητες διορθώσεις που πρέπει να γίνουν στο θεωρητικό μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων που χρησιμοποιείται για την προσφορά ηλεκτρονίων (electron supply) από την κάθοδο, καθώς αυτή δεν προέρχεται από ελεύθερα ηλεκτρόνια αλλά από ηλεκτρόνια που βρίσκονται σε ζώνες στερεού αλλά και καταστάσεις επιφανείας (surface states). Ο παράγοντας αυτός, όπως αναφέραμε και στο 1^ο κεφάλαιο, είναι πάντοτε άγνωστος, εξαρτάται από το είδος και το σχήμα της καθόδου και οι τιμές του έχουν ένα εύρος από 0.005 μέχρι 10. Συνεπώς η σχέση μεταξύ θεωρητικού και πειραματικού διαγράμματος F-N έχει πάντα ελευθερία μιας πολλαπλασιαστικής σταθεράς, ή σε λογαριθμική κλίμακα, μίας κατακόρυφης μετατόπισης.

Η ενεργός επιφάνεια λαμβάνεται συνήθως σταθερή ως προς την επιβαλλόμενη τάση στην κλασική θεωρία εκτός από κάποιες περιπτώσεις [44, 45, 82], ενώ στην προηγούμενη παράγραφο δείξαμε ότι κάτι τέτοιο δεν ισχύει επί της αρχής. Ωστόσο, όπως φαίνεται και από το σχήμα 5.5, το να τη λάβουμε σταθερή αποτελεί μία αρκετά καλή προσέγγιση.

5.5.2. Εξαγωγή παραμέτρων από πειραματικά δεδομένα

Από το σχήμα 5.3 φαίνεται ότι η προς τα κάτω καμπυλότητα του διαγράμματος F-N αυξάνεται όταν μειώνεται το R . Χρησιμοποιώντας το γεγονός αυτό, μπορούμε να εξάγουμε το R ενός εκπομπού από μετρήσεις $I-V$ ταιριάζοντας το πειραματικό διάγραμμα με το θεωρητικό, στο οποίο έχουμε βάλει τις σωστές παραμέτρους. Οι παράμετροι που μπορούμε να μεταβάλλουμε (και συνεπώς να εξάγουμε) για να ταιριάξουμε το θεωρητικό στο πειραματικό διάγραμμα είναι οι εξής: 1) ο παράγοντας ενίσχυσης β ο οποίος μετατρέπει την τάση σε ηλεκτρικό πεδίο και αλλάζει έντονα το εύρος του άξονα $1/F$ του θεωρητικού διαγράμματος

αλλά και την κλίση του, 2) η ακτίνα καμπυλότητας R στην κορυφή τη καθόδου, η οποία μεταβάλλει με τη σειρά της την καμπύλωση του θεωρητικού διαγράμματος FN και 3) ο παράγοντας σA_{eff} που συνδέει πολλαπλασιαστικά την θεωρητική πυκνότητα ρεύματος με το πειραματικό ρεύμα και παίρνει ελεύθερες τιμές. Το έργο εξόδου W θεωρείται γνωστό.

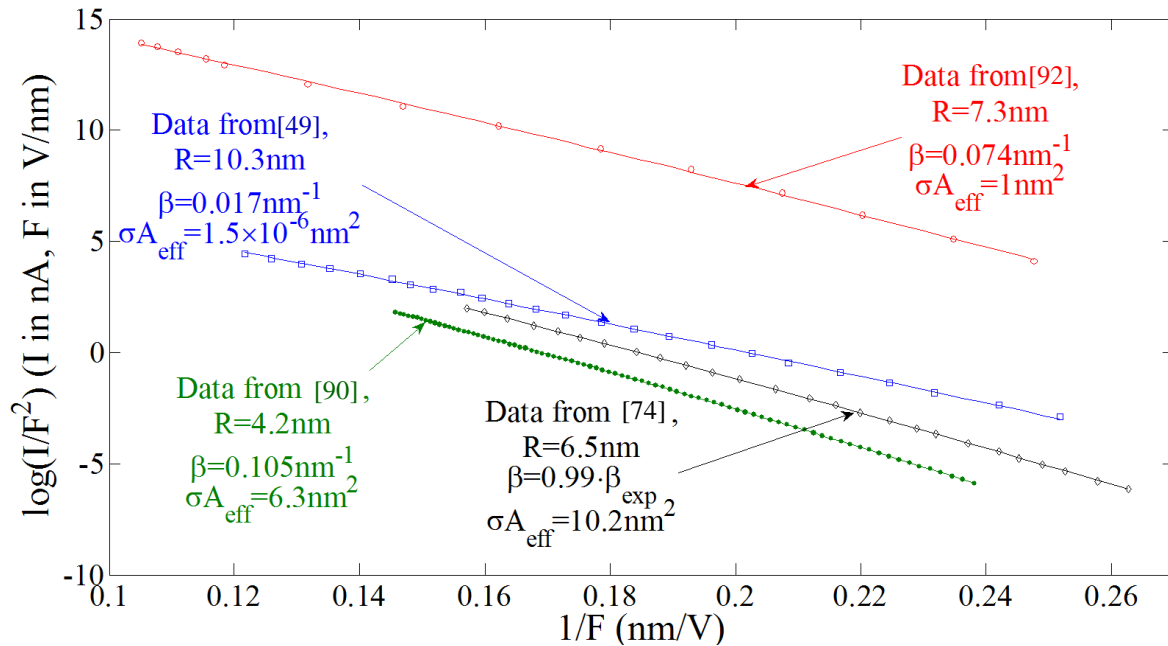
Δεδομένων λοιπόν των παραπάνω παραμέτρων, μπορεί να υπολογιστεί μία θεωρητική καμπύλη $I-V$ ως εξής: Υποθέτοντας τον παράγοντα ενίσχυσης β , βρίσκουμε το F που αντιστοιχεί σε κάθε σημείο V . Υποθέτουμε την ακτίνα R ενώ γνωρίζουμε και το έργο εξόδου W . Εισάγοντας αυτές τις 3 παραμέτρους W, F, R στην εξίσωση (5.22) βρίσκουμε την πυκνότητα ρεύματος για όλα τα σημεία V . Στη συνέχεια συγκρίνουμε το θεωρητικό αποτέλεσμα J με το πειραματικό I και επιβάλλοντας να έχουν την ίδια μέγιστη τιμή βρίσκουμε την αναλογία τους σA_{eff} και έτσι έχουμε το θεωρητικό ρεύμα I_{th} . Επαναλαμβάνοντας την παραπάνω διαδικασία, μεταβάλλοντας και δοκιμάζοντας διάφορες τιμές για τα β και R με συγκεκριμένο και στοχευμένο τρόπο που θα περιγράψουμε παρακάτω, καταλήγουμε να συγκλίνουμε σε ένα ζεύγος τιμών για το οποίο η θεωρητική και η πειραματική καμπύλη του διαγράμματος F-N $I-V$ σχεδόν ταυτίζονται. Οι τιμές β , R για τις οποίες γίνεται αυτό είναι οι τιμές για τον πειραματικό εκπομπό οι οποίες εξήχθησαν από τις μετρήσεις.

Η διαδικασία δοκιμής και διόρθωσης (trial and error) που χρησιμοποιούμε για να καταλήξουμε στα βέλτιστα β , R βασίζεται στην επαναληπτική μέθοδο της διχοτόμησης (bisection). Αρχικά υποθέτουμε μία τιμή για το R και προσπαθούμε να βρούμε με τη μέθοδο της διχοτόμησης το β εκείνο για το οποίο η θεωρητική και η πειραματική καμπύλη τέμνονται στα άκρα τους (ή με άλλα λόγια έχουν την ίδια μέση κλίση). Στη συνέχεια, αλλάζουμε το R εφαρμόζοντας ξανά διχοτόμηση ανάλογα με το αν η καμπυλότητα της θεωρητικής καμπύλης είναι μεγαλύτερη από αυτή της πειραματικής (αυτό βρίσκεται εύκολα συγκρίνοντας τις μέσες τιμές των 2 καμπυλών). Στη συνέχεια πρέπει να επαναλάβουμε την επαναληπτική μέθοδο για να συγκλίνουμε σε νέο β . Μετά από αρκετές επαναλήψεις έχουμε συγκλίνει σε ένα R και σε ένα β και είναι αυτά τα οποία εξάγουμε από τα πειραματικά δεδομένα.

5.5.3. Αποτελέσματα

Στο σχήμα 5.6 δίνουμε αποτελέσματα της παραπάνω διαδικασίας χρησιμοποιώντας πειραματικά δεδομένα που λήφθησαν από 3 διαφορετικές ομάδες. Τα σημεία που σημειώνονται με τελείες αποτελούν τα πειραματικά δεδομένα, ενώ η συμπαγής γραμμή το θεωρητικό αποτέλεσμα που προκύπτει από την (5.22) για βέλτιστες παραμέτρους οι οποίες

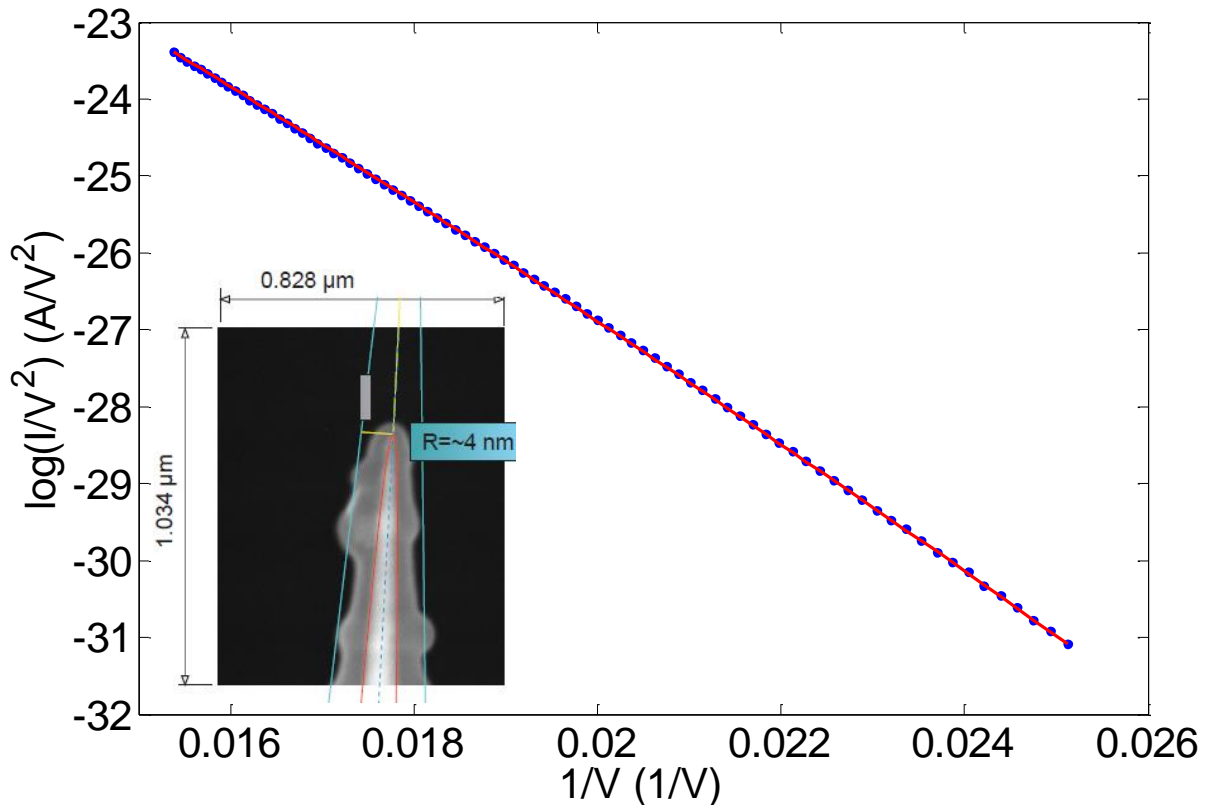
φαίνονται στο σχήμα. Βλέπουμε ότι τα θεωρητικά αποτελέσματα μπορούν να αναπαράγουν τα πειραματικά δεδομένα σε πολύ ικανοποιητικό βαθμό.



Σχήμα 5.6: Τέσσερα διαφορετικά σύνολα πειραματικών μετρήσεων I-V (markers) σε μορφή διαγράμματος F-N από 3 διαφορετικές πειραματικές ομάδες. Οι συμπαγείς γραμμές είναι τα θεωρητικά αποτελέσματα από την εξίσωση (5.22) με παραμέτρους αυτές που φαίνονται στο σχήμα όπως προέκυψαν από τη διαδικασία προσαρμογής στα πειραματικά δεδομένα.

Συγκεκριμένα, από τα δεδομένα του διαγράμματος 12 της αναφοράς [49] εξάγουμε $R=10.3\text{nm}$, 4.7nm περισσότερο από το μέσο R της συστοιχίας εκπομπών όπως μετρήθηκαν από εικόνες SEM. Επίσης, ο πολύ χαμηλός παράγοντας σA_{eff} είναι λογικός μιας και το υλικό των εκπομπών είναι N-νοθευμένο πυρίτιο και πολύ λιγότερα ηλεκτρόνια συνεισφέρουν στο εκπεμπόμενο ρεύμα σε σχέση με τους συνήθεις μεταλλικούς αγωγούς. Τα δεδομένα του σχήματος 6b της αναφοράς [74] δεν συνοδεύονται από εικόνα της ακίδας, αλλά η εξαχθείσα τιμή $R=6.5\text{nm}$ βρίσκεται στην περιοχή τιμών των ακίδων που χρησιμοποιεί η συγκεκριμένη ομάδα (4-10nm). Να σημειωθεί ότι ο συντελεστής ενίσχυσης (enhancement factor) β_{exp} που μετρήθηκε στην [74] με πειραματικές μεθόδους (βλέπε παράγραφο 4.2.3) και χωρίς χρήση της εξίσωσης F-N, είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τον β που υπολογίσαμε εφαρμόζοντας την παραπάνω μέθοδο ($\beta=0.99\beta_{\text{exp}}$). Αν είχε χρησιμοποιηθεί η κλασική εξίσωση F-N η απάντηση θα ήταν $\beta=0.79\beta_{\text{exp}}$. Τέλος, τα δεδομένα από το διάγραμμα 3 της αναφοράς [89] δεν συνοδεύονται από εικόνες για τους εκπομπούς. Για τους υπολογισμούς χρησιμοποιήσαμε τις τιμές για το έργο εξόδου που δίνονται στις αντίστοιχες πειραματικές δημοσιεύσεις: $W=4.05\text{eV}$ για το Si στην [49], $W=4.35\text{eV}$ για το Mo στην [89] και $W=4.5\text{eV}$ για το W στις [74, 90].

Στο σχήμα 5.7 δείχνουμε σε μεγέθυνση την καμπύλη με τα δεδομένα από το [90] (χαμηλότερη καμπύλη στο σχήμα 5.6). Στην ένθετη εικόνα βλέπουμε μία φωτογραφία από SEM της καθόδου από την οποία λήφθηκαν οι μετρήσεις, στο σχήμα της οποίας ταιριάζει υπερβολοειδές με ακτίνα καμπυλότητας περίπου 4nm, πολύ κοντά στην ακτίνα που προβλέφθηκε από τη μέθοδό μας μέσω των μετρήσεων $I-V$. Τα παραπάνω αποτελέσματα δείχνουν την πολύ καλή συμφωνία θεωρίας και πειράματος, και την δυνατότητα της μεθόδου μας να εξάγει με αρκετά μεγάλη ακρίβεια τα β και R .



Σχήμα 5.7: Πειραματικές μετρήσεις $I-V$ (κουκίδες) σε μορφή διαγράμματος F-N σε σύγκριση με το θεωρητικό αποτέλεσμα της εξίσωσης 5.22 (συμπαγής γραμμή). Στην ένθετη εικόνα είναι SEM φωτογραφία της καθόδου από την οποία λήφθηκαν οι μετρήσεις, μαζί με το υπερβολικό μοντέλο που ταιριάζει στη γεωμετρία της και έχει ακτίνα καμπυλότητας περίπου 4nm.

5.6. Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό αναπτύξαμε τη θεωρία της γενίκευσης της εξίσωσης F-N για καμπυλωμένους εκπομπούς. Η θεωρία στηρίζεται σε στέρεες μαθηματικές βάσεις ενώ ξεκινάει από πολύ βασικές και γενικές υποθέσεις όπως η εξίσωση Laplace και το ότι η επιφάνεια του εκπομπού είναι λεία. Η θεωρία καταλήγει σε μία εξίσωση πυκνότητας ρεύματος-ηλεκτρικού πεδίου η οποία αποτελεί γενίκευση της κλασσικής εξίσωσης F-N και είναι απλή στη χρήση της. Η θεωρία καλύπτει για συνήθεις καταστάσεις πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων εκπομπούς με μικρή ακτίνα καμπυλότητας έως και 4-5nm, ενώ η κλασσική θεωρία F-N αρχίζει να έχει προβλήματα για ακτίνες καμπυλότητας 30nm και κάτω. Η θεωρία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εξαχθεί η ακτίνα καμπυλότητας από πειραματικές μετρήσεις τάσης-ρεύματος, καθώς επίσης και για να εξαχθεί ο παράγοντας ενίσχυσης πεδίου β πολύ πιο σωστά από ό,τι με την κλασσική θεωρία F-N. Τα αποτελέσματα της εφαρμογής της παραπάνω θεωρίας σε πειραματικά δεδομένα ήταν πολύ καλά και έδωσαν πολύ λογικές τιμές για τα R και β .

Παράρτημα Α: Κώδικας MATLAB

Στο παράρτημα αυτό παρατίθεται ο κώδικας MATLAB που αναπτύχθηκε για να γίνουν οι υπολογισμοί της διατριβής αυτής. Ο κώδικας τοποθετείται σε διαφορετικά αρχεία *.m. Πριν από την παράθεση του περιεχομένου κάθε αρχείου προσδιορίζεται το όνομα που έχει το αρχείο. Το τέλος του κάθε αρχείου θα υποδεικνύεται με το σύμβολο ##.

A.1. Κώδικας 3^ο κεφαλαίου

Κύριος κώδικας. Όνομα αρχείου “beamW.m”.

```
%This is the main script that calculates the beam width for various values  
%of the anode-cathode distance d.
```

```
clear all;  
close all;  
% Parameters input  
global R1 R2 d noleg h0 alpha W RR  
nospher=6;%number of spheroids  
noleg=12;%number of expansion terms per spheroid  
R1=170;%large radius  
R2=17;%small radius  
W=4.5;%work function  
Floc=5;%apex local field  
  
R1=R1*ones(nospher,1);  
R2=R1/S;  
R1=[R1; 11000];  
R2=[R2; 10000];  
h0 = acoth(R1./R2);  
alpha = R1./cosh(h0);  
  
di=5:2:25;%variation of d  
for j=1:length(di)  
  
d=di(j);  
  
A=coeffs();%calculate expansion coefficients  
s=poten([0 0],[-d 0.01-d],A);  
beta=100*abs(s(2)-s(1));%calculate beta-local field at apex  
Vappl=Floc/beta;%apply voltage to get desired local field Floc  
V=@(x,z) -impot(x,z)-Vappl*poten(x,z-d-R1(1),A);%total barrier  
T0=tran_path(Vappl-W,0,V);%Transmission coefficient at axis  
  
ua=5e-4;%bisection limits  
ub=0.1;  
for i=1:20  
    u=(ua+ub)/2;%bisection  
    [T,xx,zz]=tran_path(Vappl-W,u,V);%calculate T, path  
    if T<0.49*T0  
        ub=u;%check if found FWHM  
    elseif T>0.51*T0  
        ua=u;
```

```

else
    break;
end
end
plot(xx, zz(:,1)-R1(1));%plot FWHM path
hold on
x0=xx(end);
z0=zz(end,1);
[x2,z2]=path_free(Vappl-W,x0,z0,V);%find path at allowed region
plot(x2,z2(:,1)-R1(1),'r');
axis equal;
BW(j)=2*interp1(z2(:,1),x2,R1(1)+d);%find Beam Width at anode
end

##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “coeffs.m”.

```

function A=coeffs()
%This function calculates the expansion coefficients needed to obtain the
%electrostatic potential

global R1 d noleg h0 alpha

nospher=length(R1);
zn=-d-R1(1);
x=zeros(1,noleg*nospher+1);
z=x;
z(1) = -d;
th = 1/noleg*pi/noleg*pi-1/noleg;
for n=1:nospher
    [x((n-1)*noleg+2:n*noleg+1),zz]=cart(h0(n),th,alpha(n));
    z((n-1)*noleg+2:n*noleg+1)=zz+zn;
    if n~=nospher
        zn=zn-R1(n)-R1(n+1);
    end
end

C=constmatr(x,z);
B=-ones(noleg*nospher+1,1);
A=C\B;

function C=constmatr(x,z)
nospher=length(R1);
C=zeros(numel(x),noleg*nospher);
j=1;
for m=1:nospher
    for p=0:noleg-1
        C(:,j) = kernel(p,m,x,z);
        j=j+1;
    end
end

function K = kernel(p,n,x,z)

    zn=-d-2*sum(R1(1:n-1))-R1(n);

    [coshh,cosu]=sph(x,z-zn,alpha(n));
    [coshhi,cosui]=sph(x,z+zn,alpha(n));

```

```

        K=Q_leg(coshh,p).*P_leg(cosu,p)-Q_leg(coshhi,p).*P_leg(-cosui,p);
    end
end
end
    ##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “poten.m”

```

function [Phi]=poten(x,z,A)
%This function calculates the electrostatic potential by implementing the
%series expansion.
global R1 d h0 alpha
xx=reshape(x,numel(x),1);
zz=reshape(z,numel(z),1);
C=constmatr(xx,zz);
S=C*A;
[hh,~]=sph(x,z+d+R1(1),alpha(1));
S((acosh(hh))<=h0(1))=-1;
Phi=reshape(S,size(x));

function C=constmatr(x,z)
    global R1 noleg

    nospher=length(R1);

    C=zeros(numel(x),noleg*nospher);

    for m=1:nospher
        C(:,(m-1)*noleg+1:m*noleg)=kernel(m,x,z);
    end

end

function K = kernel(n,x,z)
    global R1 d alpha noleg
    zn=-d-2*sum(R1(1:n-1))-R1(n);

    [coshh,cosu]=sph(x,z-zn,alpha(n));
    [coshhi,cosui]=sph(x,z+zn,alpha(n));
    Q=zeros(numel(x),noleg);
    Qi=Q;P=Q;Pi=Q;

    Q(:,noleg)=Q_leg(coshh,noleg-1);
    Qi(:,noleg)=Q_leg(coshhi,noleg-1);
    P(:,noleg)=P_leg(cosu,noleg-1);
    Pi(:,noleg)=P_leg(-cosui,noleg-1);
    Q(:,noleg-1)=Q_leg(coshh,noleg-2);
    Qi(:,noleg-1)=Q_leg(coshhi,noleg-2);
    P(:,noleg-1)=P_leg(cosu,noleg-2);
    Pi(:,noleg-1)=P_leg(-cosui,noleg-2);

    for i=noleg-3:-1:0
        Q(:,i+1)=((2*i+3)/(i+1))*coshh.*Q(:,i+2)-((i+2)/(i+1))*Q(:,i+3);
        Qi(:,i+1)=((2*i+3)/(i+1))*coshhi.*Qi(:,i+2)-
        ((i+2)/(i+1))*Qi(:,i+3);
        P(:,i+1)=((2*i+3)/(i+1))*cosu.*P(:,i+2)-((i+2)/(i+1))*P(:,i+3);
        Pi(:,i+1)=((2*i+3)/(i+1))*(-cosui).*Pi(:,i+2)-
        ((i+2)/(i+1))*Pi(:,i+3);
    end

```

```

end
K=Q.*P-Qi.*Pi;
end

end
##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “impot.m”

```

function V=impot(x,z)
%This function calculates the spherical image poenteial outside the
%ellipsoid
global R1 R2;
RR=(R2(1))^2/R1(1);
r2=x.^2+(z-R1(1)+RR).^2;
V=0.719982*RR./(r2-RR*RR);
V(r2<=RR*RR)=15;
V(V>15)=15;
end
##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “tran_path.m”

```

function [T,x,z]=tran_path(E,u,V)
%This function finds the classical path inside the forbidden region my
%integrating the classical motion equation. It also integrates the
%JWKB integral to find the transmission coefficient
global R1 h0 alpha;
dx=1e-4;
a=alpha(1);
if u<=0.02
options = ddeset('OutputFcn',@(x,y,flag)
check2(x,y,flag,V,E), 'RelTol',1e-5, 'maxstep',5e-3);
else
options = ddeset('OutputFcn',@(x,y,flag)
check2(x,y,flag,V,E), 'RelTol',1e-5);
end

if u<=1e-4
dz=1e-3;
z = (R1(1):dz:R1(1)+2)';
v=ones(size(z));
for i=1:length(z)
v(i)=V(0,z(i));
if (i>(.5*length(z)))&&(v(i)<E)
break;
end
end
z(v<E)=[];
v(v<E)=[];
integ=sqrt(v-E);
trans = 10.246*sum(integ).*dz;
T = exp(-trans);
x=zeros(numel(z),1);
else

```

```

hb=h0(1);
v=-100;
while v<E
    hb=hb+0.0001;
    [xb,zb]=cart(hb,u,a);
    v=V(xb,zb);
end
n=0;
ha=hb-0.0001;
while 1
    n=n+1;
    ht=(ha+hb)*0.5;
    [xt,zt]=cart(ht,u,a);
    v=V(xt,zt);
    if (v>1.001*E)
        hb=ht;
    elseif (v<E)
        ha=ht;
    else
        break;
    end
end
fx=(V(xt+dx,zt)-v)/dx;
fz=(V(xt,zt+dx)-v)/dx;
dzt=fz/fx;
[x,z]=ode45(@systems(x,z,E,V),[xt 15],[zt dzt],options);
v=V(x,z(:,1));
integ=sqrt(v-E).*sqrt(1+z(:,2).^2).*gradient(x);
trans=10.246*real(sum(integ));
T=exp(-trans);
end

function dz=systems(x,z,E,V)
dz=zeros(2,1);
dz(1)=z(2);
vv=V(x,z(1));
Fx=(V(x+dx,z(1))-vv)/dx;
Fz=(V(x,z(1)+dx)-vv)/dx;
dz(2)=(1+z(2)^2)*(z(2)*Fx-Fz)./(2*(vv-E));
end

function status=check2(x,y,flag,V,E)
switch flag
case 'init'
    status=0;
case 'done'
    status=0;
otherwise
    if (V(x(end),y(1,end))<=(E+1e-3))
        status=1;%stop integration
    else
        status=0;
    end
end
end
end
##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “path_free.m”

```

function [x2,z2]=path_free(E,x0,z0,V)
%this function finds the classical path at the classically accessible
%region. It starts from the point given from the tran_path function and
%ends at the anode
global R1 d;
    dx=1e-4;
    options = ddeset('OutputFcn',@(x,y,flag) check(x,y,flag),'RelTol',1e-
5,'maxstep',3e-2);
    x0=x0+0.001;
    z0=z0+0.001;
    VV=V(x0,z0);
    fx=(V(x0+dx,z0)-VV)/dx;
    fz=(V(x0,z0+dx)-VV)/dx;
    dz0=fz/fx;
    [x2,z2] = ode45(@(x,z) systems(x,z,E,V), [x0 15], [z0 dz0],options);

function dz=systems(x,z,E,V)
    dz = zeros(2,1);
    dz(1) = z(2);
    vv=V(x,z(1));
    Fx=(V(x+dx,z(1))-vv)/dx;
    Fz=(V(x,z(1)+dx)-vv)/dx;
    dz(2) = -(1+z(2)^2)*(z(2)*Fx-Fz)/(2*(vv-E));
end

function status = check(x,y,flag)
    switch flag
        case 'init'
            status = 0;
        case 'done'
            status = 0;
        otherwise
            if y(1,end)>R1(1)+d
                status = 1;%stop integration
            else
                status = 0;
            end
        end
    end
end
end
end
end
end

###

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “cart.m”

```

function [x,z] = cart(h,u,a)
%This function gives the cartesian coordinates x,z given the spheroidal
%coordinates h,u and the focal distance a
x = a.*sinh(h).*sin(u);
z = a.*cosh(h).*cos(u);
end
end
end
end
end
end

###

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “sph.m”

```
function [h,u] = sph(x,z,a)
%This function gives the spheroidal coordinates h,u given the spherical
%coordinates x,z and the focal distance a
    r1 = sqrt(1+(x./a).^2+2*z./a+(z./a).^2);
    r2 = sqrt(1+(x./a).^2-2*z./a+(z./a).^2);
    h = 0.5*(r1+r2);
    u = 0.5*(r1-r2);
end
```

##

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “P_leg.m”

```
function P=P_leg(x,n)
%This function gives the legendre polynomial of the first kind of argument
%x and order n
P0=ones(size(x));
P1=x;
if n==0
    P=P0;
    return;
end
if n==1
    P=P1;
    return;
end
for k=2:n
    P2=( (2*k-1)*x.*P1-(k-1)*P0)/k;
    P0=P1;
    P1=P2;
end
P=P2;
end
```

##

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “Q_leg.m”

```
function Q=Q_leg(z,n)
%This function calculates the Legendre function of the second kind for
%argument z and order n
out=z<=1;
z(out)=1e10;
Q=sqrt(pi)*(2^(-n-1))*(gamma(n+1)/gamma(n+1.5))...
    *(z.^(-n-1)).*hypgeo(1+0.5*n,(n+1)*0.5,n+1.5,z.^(-2));
Q(out)=inf;
```

```
function G=hypgeo(a,b,c,z)
```

```
    eps=1e-8;
    fact=1;
    aa=a;
    bb=b;
    cc=c;
    S=1;
    for l=1:10000
```

```

        fact=fact.*z*aa*bb/(1*cc);
        S=S+fact;
        if norm(abs(fact./S))<eps
            G=S;
            return;
        end
        aa=aa+1;
        bb=bb+1;
        cc=cc+1;
        G=S;
    end

end
end

##

```

A.2. Κώδικας 4^ο κεφαλαίου

Κύριος κώδικας. Όνομα αρχείου “potall.m”

```

clear all;
close all;
%This script calculates the potential along the z axis for various z. Then
%it rescales it so that all curves collapse and keep the same local field
%at the apex

global R d noleg
noleg=12;
nospher=25;
RR=5;
halfangle=3.5;
logos=(1+sind(halfangle))/(1-sind(halfangle));
R=RR*logos.^(0:(nospher-1));

di=5*4.^(0:3);
col=['r' 'k' 'm' 'b'];

th=0;
for i=1:length(di)
    d=di(i);
    A=coeffs();
    dr=di(1)/1000;
    r=(RR:dr:di(1)+RR)';
    s=poten(zeros(size(r)),r-d-RR,A);
    beta(i)=abs((poten(0,-d,A)-poten(0,-d+0.0001,A))*10000);
    Vapp(i)=4/beta(i);
    V(i,:)=(s+1)*Vapp(i);
    plot(r-RR,Vapp(1)*(s+1),col(i));
    hold on;
end

xlabel('x (nm)');
ylabel('V(V)');

figure;

```



```

for i=1:length(di)
    plot(r-RR,V(i,:),col(i));
    hold on;
end
plot([0 4],[0 16],':');
xlabel('z (nm)');
ylabel('S(d)\cdotV (V)');
    ##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “coeffs.m”.

```

function A=coeffs()
%This function calculates the expansion coefficients for the electrostatic
%potential when the spheres model is applied.

```

```

    global R d noleg

    nospher=length(R);

    zn=-d-R(1);
    x=zeros(noleg*nospher+1,1);
    z=x;
    z(1) = -d;
    th = 1/noleg:pi/noleg:pi-1/noleg;
    for n=1:nospher
        x((n-1)*noleg+2:n*noleg+1)=R(n)*sin(th);
        z((n-1)*noleg+2:n*noleg+1)=R(n)*cos(th)+zn;
        if n~=nospher
            zn=zn-R(n)-R(n+1);
        end
    end

    C=constmatr(x,z);
    B=-ones(noleg*nospher+1,1);
    A=C\B;
end

```

```

function C=constmatr(x,z)
    global R noleg;

    nospher=length(R);

    C=zeros(numel(x),noleg*nospher);

    for m=1:nospher
        C(:,(m-1)*noleg+1:m*noleg)=kernel(m,x,z);
    end
end

```

```

end
function K = kernel(n,x,z)
    global R noleg d;

    zn=-d-2*sum(R(1:n-1))-R(n);

    r=sqrt(x.^2+(z-zn).^2)/R(n);
    ri=sqrt(x.^2+(z+zn).^2)/R(n);

```

```

costh=((z-zn)/R(n))./r;
costhi=((z+zn)/R(n))./ri;

pows=ones(numel(x),noleg);
powsi=pows;
pows(:,1)=1./r;
powsi(:,1)=1./ri;
for i=2:noleg
    pows(:,i)=pows(:,i-1)./r;
    powsi(:,i)=powsi(:,i-1)./ri;
end

K=P_leg(costh,noleg-1).*pows-P_leg(-costhi,noleg-1).*powsi;

end
    ##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “poten.m”.

```

function [Phi]=poten(x,z,A)
%This function calculates the electrostatic potential by implementing the
%spherical model. The expansion is evaluates given the coefficient vector A

global R d;

xx=reshape(x,numel(x),1);
zz=reshape(z,numel(z),1);

C=constmatr(xx,zz);
S=C*A;
S(x.^2+(z+d+R(1)).^2<R(1)^2)=-1;
Phi=reshape(S,size(x));

end

function C=constmatr(x,z)
    global R noleg;

    nospher=length(R);

    C=zeros(numel(x),noleg*nospher);

    for m=1:nospher
        C(:,(m-1)*noleg+1:m*noleg)=kernel(m,x,z);
    end

end

function K = kernel(n,x,z)
    global R noleg d;

    zn=-d-2*sum(R(1:n-1))-R(n);

    r=sqrt(x.^2+(z-zn).^2)/R(n);
    ri=sqrt(x.^2+(z+zn).^2)/R(n);
    costh=((z-zn)/R(n))./r;
    costhi=((z+zn)/R(n))./ri;

```

```

pows=ones(numel(x),noleg);
powsi=pows;
pows(:,1)=1./r;
powsi(:,1)=1./ri;
for i=2:noleg
    pows(:,i)=pows(:,i-1)./r;
    powsi(:,i)=powsi(:,i-1)./ri;
end

K=P_leg(costh,noleg-1).*pows-P_leg(-costhi,noleg-1).*powsi;

end
##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “P_leg.m”.

```

function P=P_leg(xx,n)
%this function calculates the Legendre polynomials of the first kind of
%argument xx of order 0 to n. xx has to be a column vector. Output is given
%in column vectors

x=reshape(xx,numel(xx),1);

P=ones(length(x),n+1);
if n==0
    return;
end

P(:,2)=x;

for k=2:n
    P(:,k+1)=( (2*k-1)*x.*P(:,k)-(k-1)*P(:,k-1) )/k;
end
end
##

```

Κύριος κώδικας. Όνομα αρχείου “Jall.m”.

```

clear all;
close all;
%This script calculates the current density as a function of the applied
%voltage for various distances d. Then it rescales all voltages so that the
%local field is kept the same and all plots collapse into a single one.

global R d noleg kT
noleg=12;
kT=0.026;
nospher=25;
RR=5;
halfangle=8;
logos=(1+sind(halfangle))/(1-sind(halfangle));
R=RR*logos.^(0:(nospher-1));

di=5*4.^(0:3);
col=['r' 'k' 'm' 'b'];

```

```

F=(3:0.1:7.5);
for i=1:length(di)
    d=di(i);
    A=coeffs();
    dr=2.5/1000;
    r=(0:dr:2.5)';
    s=poten(zeros(size(r)),r-d,A);
    beta(i)=abs(poten(0,-d,A)-poten(0,-d+0.0001,A))*10000;
    Vapp(:,i)=F/beta(i);
    for j=1:length(Vapp)
        V=-(s+1)*Vapp(j,i)-impot(0,r+R(1));
        J(j,i)=curdens0(V,r,-4.5);
    end
    semilogy(1./Vapp(:,i),J(:,i)./(Vapp(:,i).^2),col(i));
    hold on;
end

xlabel('1/V (1/V)');
ylabel('J/V^2 (A/(Vnm)^2)');
figure;
SV=F/beta(1);
for i=1:length(di)
    h=semilogy(1./SV,(J(:,i)')./(SV.^2),col(i));
    hold on;
end

xlabel('S(d)/V (1/V)');
ylabel('J\cdot(V/S(d))^-^2 (A/((Vnm)^2)');
##

```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “curdens0.m”.

```

function J0 = curdens0(V,z,Ef)
%This function finds the current density along a straight line using the
%1-D JWKB approximation, given the barrier V(z) and the fermi level Ef
global kT;
dE = 0.015;
Emax = 5*kT;
lFD=@(E) log(1+exp((Ef-E)/kT));
E=Ef+Emax:-dE:-15;
T = zeros(1,length(E));
for n=1:length(E)
    bar=V-E(n);
    integ=sqrt(bar(bar>0));
    zz=z(bar>0);
    T(n)=exp(-10.246*trapez(zz,integ));
    if T(n)/T(1)<1e-4
        break;
    end
end
T(n+1:end)=[];
E(n+1:end)=[];
intf=T.*lFD(E);
J0=-trapez(E,intf)*1.6183e-4*kT;
end

```

```
##
```

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “currentfull.m”.

```
function [I,ar]=currentfull(Vappl,s,Im,u,r)
%This function calculates the current by calculating the JWKB current
%density at every direction around the spherical tip and integrating on
%the surface.
global R W
vv=-Im-Vappl*s;
J=u;
for i=1:length(u)
    J(i) = curdens0(vv(:,i),r,Vappl-W);
end
int=J.*sin(u);
I=2*pi*(R(1)^2)*trapz(u,int);
ar=I/J(1);
end
##
```

Κύριος κώδικας. Όνομα αρχείου “scalecurrent.m”.

```
clear all;
close all;
%This script calculates the total current using the spherical model for
%various distances d. It uses the 1-D JWKB approximation at every direction.
%Then it rescales the current so that the plots collapse to each other and
%the local apex field remains the same
global R d noleg kT W
noleg=12;
nospher=25;
RR=5;
halfangle=3.5;
logos=(1+sind(halfangle))/(1-sind(halfangle));
R=RR*logos.^(0:(nospher-1));
kT=0.025;
W=4.5;

di=[5 10 80 320];
col='rkmb';
for i=1:length(di)
    string=['d=' num2str(di(i)) 'nm'];
    string(length(string)+1:7)=' ';
    leg(i,:)=string;
end

r=(R(1)+1e-5:0.003:R(1)+2.5)';
u=0:0.02:2;
x=r*sin(u);
z=r*cos(u);
Im=impot(x,z);
xfn=(0.14:0.01:0.35)';
F=1./xfn;

for i=1:length(di)
    d=di(i);
```

```

A=coeffs();
s=poten(x,z-d-R(1),A);
beta(i)=abs((s(1,28)-s(5,28))/(r(1)-r(5)));
Vappl=F./beta(i);
for j=1:length(Vappl)
    [I(j,i),ar(j,i)]=currentfull(Vappl(j),s,Im,u,r);
end
yfn(:,i)=I(:,i)./(Vappl.^2);
semilogy(1./Vappl,yfn(:,i),col(i));
hold on;
end
xlabel('1/V (1/V)');
ylabel('I/V^2 (A/V^2)');
legend(leg);

figure;

for i=1:length(di)
    xfni=beta(1).*xfn;
    yfni=I(:,i).*(xfni.^2);
    semilogy(xfni,yfni,col(i));
    hold on;
end
xlabel('1/S(d)V (1/V)');
ylabel('I/(S(d)V)^2 (A/V^2)');
legend(leg);
figure;
for i=1:length(di)
    plot(F,ar(:,i),col(i));
    hold on;
end
xlabel('1/F(\theta=0.56rad) (nm/V)');
ylabel('effective area A(nm^2)');
legend(leg);
hold off;
###

```

Κύριος κώδικας. Όνομα αρχείου “Fofth.m”.

```

clear all;
close all;
%This script calculates the angular variation of the local field on the
%surface of the spherical emitter for various distances.
figure;
global R d noleg
noleg=12;
nospher=15;
RR=10;
halfangle=8;
logos=(1+sind(halfangle))/(1-sind(halfangle));
R=RR*logos.^(0:(nospher-1));

di=5*4.^(0:3);
col=['r' 'k' 'm' 'b'];
for i=1:length(di)
    string=['d=' num2str(di(i)) 'nm'];
    string(length(string)+1:7)=' ';

```

```

        leg(i,:)=string;
end

for i=1:length(di)
    d=di(i);
    A=coeffs();
    r1=RR+1e-3;
    r2=RR+2e-3;
    th=(0:0.01:0.2)';
    x1=sin(th)*r1;
    z1=cos(th)*r1-d-RR;
    x2=sin(th)*r2;
    z2=cos(th)*r2-d-RR;
    s1=poten(x1,z1,A);
    s2=poten(x2,z2,A);
    beta(:,i)=abs((s2-s1)*1e3);
    F(:,i)=beta(:,i)/beta(1,i);
    plot(180*th/pi,F(:,i),col(i))
    hold on;
end
legend(leg);
    ##

```

A.3. Κώδικας 5^ο κεφαλαίου

Συνάρτηση. Όνομα αρχείου “GenFNEqFun.m”.

```

function [J]=GenFNEqFun(F,W,R)
%This function implements the general model for field emission. The inputs
%are arrays with the same dimensions.
%The file SpecialFunctions.mat must be in the current folder in order to
%load the special functions as computed algebraically.
%The input arguments are F: local electric field in V/nm, W: work function
%in eV, R: radius of curvature at the apex of the emitter in nm.
%If one of the input variables is an array, the other input variables must
%be either arrays of the same dimensions or scalars.

yy=1.2*sqrt(F)./W;%the standard variable y

M=csvread('SpecialFunctions.csv');%load the special functions data file
y=M(:,1);
v=M(:,2);
t=M(:,3);
w=M(:,4);
ps=M(:,5);

vv=interp1(y,v,yy);%interpolating special function
ww=interp1(y,w,yy);
tt=interp1(y,t,yy);
ppsi=interp1(y,ps,yy);

G=6.831*(vv.*(W.^1.5)./F+ww.*(W.^2.5)./(R.*F.^2));%Gamow exponent

d=(sqrt(W)./F).*(tt+(W./(F.*R)).*ppsi);%prefactor

```

```
J=1.54e-6*(d.^(-2)).*exp(-G);%calculation of current density (in A/nm^2)
```

```
end
```

```
##
```

Κύριος κώδικας. Όνομα αρχείου “FitExpData.m”

```
%This script fits the generalized FN equation to experimental data in order  
%to extract the following parameters: enhancement factor beta, radius of  
%curvature R and prefactor sigma*Aefficient.
```

```
clear all;  
close all;
```

```
W=4.5;%define the work function
```

```
%% give the experimental data straight from mat file  
%There must be two vectors in the mat file: xexp and yexp. They contain the  
%I-V data in the corresponding FN coordinates. xexp=1/V, yexp=log(I/V^2).  
%Experimental data must be very smooth and accurate. Otherwise the method  
faces  
%instabilities and it would be much better to fit a polynomial to the  
%experimental data and give the data in polynomial form. In this case  
%activate lines 26-30 in the next section.
```

```
load ExpData.mat;
```

```
xe=xexp;
```

```
ye=yexp;
```

```
%% give experimental data in polynomial form
```

```
% fit a polynomial to the data of the form yexp=p1*xexp^2+p2*xexp+p3
```

```
% activate this section if the data is noisy and you choose to fit a
```

```
% polynomial first
```

```
% [f1,g1]=fit(xexp,yexp,'poly2');%fit polynomial
```

```
% xstart=min(xexp); %give starting xexp
```

```
% xend=max(xexp); %give last xexp
```

```
% xe=xstart:(xend-xstart)/50:xend;
```

```
% ye=f1(xe);%calculate values
```

```
%% main section
```

```
Ra=0.5;%extreme values for R
```

```
Rb=100;
```

```
for i=1:100
```

```
    R=0.5*(Ra+Rb);%bisection for R
```

```
    Fa=0.2;%extreme maximum fields
```

```
    Fb=20;
```

```
    for j=1:100
```

```
        Fmax=0.5*(Fa+Fb);%bisection for maximum field
```

```
        beta=Fmax*min(xe);%beta=Fmax/Vmax
```

```
        F=beta./xe;%local field vector corresponding to xexp vector
```

```
        I=GenFNEqFun(F,W,R);%current density
```

```
        yanal=log(I.*(xe.^2));%FNplot vertical variable
```

```
        sigma=max(yanal)-max(ye);%FN plot vertical offset to match
```

```
        yanal=yanal-sigma;%match plots at the left by appropriate prefactor
```

```
        if min(yanal)-min(ye)>0.001%
```



```

        Fb=Fmax;%bisection to the correct side, match plots at the
right
elseif min(ye)-min(yanal)>0.001%this way beta or Fmax is defined
    Fa=Fmax;
else
    break;%if they match with 1% accuracy break the loop
end
end
if mean(yanal)-mean(ye)>0.001
    Ra=R;%bisection at the correct side
elseif mean(ye)-mean(yanal)>0.001
    Rb=R;%once left-right endpoints are matched, R is tuned to match
the middle
else
    break;%if the error at the mean is smaller than 0.001% break
end
end
sigmaAeff=exp(-sigma);%correcting prefactor
%% plotting the results
%get variables y for 1/F in x instead of 1/V
Fexp=beta./xexp;
Iexp=exp(yexp)./xexp.^2;
yexpF=log(Iexp./Fexp.^2);
Ianal=exp(yanal)./xe.^2;
yanF=log(Ianal./F.^2);

plot(1./Fexp,yexpF,'*');%plot experimental data with F in the free variable
hold on
plot(1./F,yanF,'r');%plot theoretical
xlabel('1/F (nm/V)');%label
ylabel('log(I/F^2) (I in A F in V/nm)');
figure;
plot(xexp,yexp,'*');%plot data with V in the free variable
hold on
plot(xe,yanal,'r');
xlabel('1/V (1/V)');
ylabel('log(I/V^2) (A/V^2)');
xlabel('1/V (1/V)');%label
ylabel('log(I/V^2) (A/V^2)');
disp(['The radius of curvature is R=' num2str(R) ' nm']);%show results of
R, beta and sigmaAeff
disp(['The enhancement factor is beta=' num2str(beta) ' 1/nm']);
disp(['The pre-factor is sigmaAeff=' num2str(sigmaAeff) ' nm^2']);
##

```

Βιβλιογραφία

- [1] J. H. Winckler, Gedanken von den Eigenschaften, Wirkungen und Ursachen der Electricität nebst Beschreibung zweiner electrischer Maschinen, Leipzig: Breitkopf, 1744.
- [2] J. J. Thomson, "Cathode Rays," *Philos. Mag.*, vol. 44, p. 293, 1897.
- [3] O. W. Richardson, The Emission of Electricity from Hot Bodies, London: Longmans, 1916.
- [4] A. Einstein, "On a heuristic point of view about the creation and conversion of light," *Ann. Phys. Chem*, vol. 17, p. 132, 1905.
- [5] J. E. Lilienfeld, *Am. J. Roentgenology*, vol. 9, p. 22, 1922.
- [6] R. A. Millikan and C. F. Eyring, "Laws governing the pulling of electrons out of metals under intense electrical fields," *Phys. Rev.*, vol. 27, p. 51, 1926.
- [7] W. Schottky, "Über kalte und warme Elektronenentladungen," *Zeitschrift für Physik A*, vol. 14, no. 1, pp. 63-106, 1923.
- [8] R. A. Millikan and C. C. Lauritsen, "Relations of field-currents to thermionic-currents," *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, vol. 14, no. 1, pp. 45-49, 1928.
- [9] J. R. Oppenheimer, "Three notes on the quantum theory of aperiodic effects," *Phys. Rev.*, vol. 31, no. 1, pp. 66-81, 1928.
- [10] R. H. Fowler and L. Nordheim, "Electron Emission in Intense Electric Fields," *Proc. R. Soc. London, Ser. A 119*, p. 173, 1928.
- [11] A. Sommerfeld, "Zur Elektronentheorie der Metalle," *Naturwiss*, vol. 41, p. 825, 1927.
- [12] E. Fermi, "Sulla quantizzazione del gas perfetto monoatomico," *Rendiconti Lincei*, vol. 3, p. 145, 1926.
- [13] P. A. M. Dirac, "On the Theory of Quantum Mechanics," *Proc. R. Soc. A*, pp. 661-677, 1926.

- [14] L. W. Nordheim, "The Effect of the Image Force on the Emission and Reflexion of Electrons by Metals," *Proc. R. Soc. Lond. A*, vol. 121, pp. 626-639, 1928.
- [15] R. G. Forbes, "Use of Millikan–Lauritsen plots, rather than Fowler–Nordheim plots, to analyze field emission current-voltage data," *J. Appl. Phys.*, vol. 105, p. 114313, 2009.
- [16] H. Jeffreys, "On certain approximate solutions of linear differential equations of the second order," *Proceedings of the London Mathematical Society*, vol. 23, no. 1, pp. 428-436, 1924.
- [17] G. Wentzel, "Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik," *Zeitschrift für Physik*, vol. 38, no. 6-7, pp. 518-529, 1926.
- [18] H. A. Kramers, "Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung," *Zeitschrift für Physik*, vol. 39, pp. 10-11, 1926.
- [19] L. Brillouin, "La mécanique ondulatoire de Schrödinger: une méthode générale de résolution par approximations successives," *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, Vols. 24-26, p. 183, 1926.
- [20] P. L. Kapur and R. Peierls, "Penetration into potential barriers in several dimensions," *Proc. R. Soc. Lond. A*, vol. 163, pp. 606-610, 1937.
- [21] E. L. Murphy and R. H. Good, "Thermionic emission, field emission, and the transition region.," *Phys. Rev.*, vol. 102, pp. 1464-1473, 1956.
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, 2nd ed., Oxford: Pergamon, 1958, pp. 158-175.
- [23] D. Cocolocchio and M. Viggiano, "WKB approximation without divergencies," *Int. J. Theor. Phys.*, vol. 36, no. 12, p. 3051, 1997.
- [24] "dlmf.nist.gov, 9.2(i)".
- [25] "dlmf.nist.gov 9.7(ii)".
- [26] G. Gamow, "Zur Quantentheorie des Atomkernes," *Z. Physik*, vol. 51, p. 204, 1928.

- [27] B. Das and J. Mahanty, "Spatial distribution of tunnel current and application to scanning-tunneling microscopy: a semiclassical treatment," *Phys. Rev. B*, vol. 36, pp. 898-903, 1987.
- [28] Z. H. Huang, T. E. Feuchtwang, P. H. Cutler and E. Kazes, "Wentzel–Kramers–Brillouin method in multidimensional tunneling," *Phys. Rev. A*, vol. 41, pp. 32-41, 1990.
- [29] W. Kohn and N. D. Lang, "Theory of Metal Surfaces: Induced Surface Charge and Image Potential," *Phys. Rev. B*, vol. 7, p. 3541, 1973.
- [30] L. W. Nordheim, "The effect of the image force on the emission and reflexion of electrons by metals," *Proc. R. Soc. London Ser. A*, vol. 121, p. 626, 1928.
- [31] dlmf.nist.gov, "19.1.1".
- [32] H. C. Miller, "Values of Fowler-Nordheim Field Emission Functions: $v(y)$, $t(y)$ and $s(y)$," *J. Frankl. Inst.*, vol. 282, no. 6, p. 328, 1966.
- [33] R. G. Forbes, "Simple good approximations for the special elliptic functions in standard Fowler-Nordheim tunneling theory for a Schottky-Nordheim barrier," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 89, p. 113122, 2006.
- [34] R. Fowler and E. A. Guggenheim, *Statistical thermodynamics*, New York: Cambridge University press, 1952, p. 460.
- [35] A. Modinos, "Theoretical analysis of field emission data," *Solid-State Electron.*, vol. 45, no. 6, p. 809, 2001.
- [36] R. G. Forbes, "Extraction of emission parameters for large-area field emitters, using a technically complete Fowler–Nordheim-type equation," *Nanotechnology*, vol. 23, p. 095706, 2012.
- [37] R. G. Forbes, C. J. Edgcombe and U. Valdre, "Some comments on models for field enhancement," *Ultramicroscopy*, vol. 95, p. 57, 2003.
- [38] W. P. Dyke, J. K. Trolan, W. W. Dolan and G. Barnes, "The Field Emitter: Fabrication, Electron Microscopy, and Electric Field Calculations," *J. Appl. Phys.*, vol. 24, p. 570, 1953.

- [39] J. D. Zuber, K. L. Jensen and T. E. Sullivan, "An analytical solution for microtip field emission current and effective emission area," *J. Appl. Phys.*, vol. 91, p. 9379, 2002.
- [40] P. H. Cutler, J. He, J. Miller, N. M. Miskovsky, B. Weiss and T. E. Sullivan, "Theory of electron emission in high fields from atomically sharp emitters: Validity of the Fowler-Nordheim equation," *Progress In surface Science*, vol. 42, p. 169, 1993.
- [41] J. He, P. H. Cutler and N. M. Miskovsky, "Generalization of Fowler–Nordheim field emission theory for nonplanar metal emitters," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 59, p. 1644, 1991.
- [42] P. H. Cutler, J. He, J. Miller, N. M. Miskovsky, B. Weiss and T. E. Sullivan, "Theory of electron emission in high fields from atomically sharp emitters: Validity of the Fowler–Nordheim equation," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 11, no. 2, p. 387, 1993.
- [43] G. N. Fursey and D. V. Glazanov, "Deviations from the Fowler–Nordheim theory and peculiarities," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 16, no. 2, p. 910, 1998.
- [44] C. J. Edgcombe, "Development of Fowler-Nordheim theory for a spherical field emitter," *Phys. Rev. B*, vol. 72, p. 045420, 2005.
- [45] C. J. Edgcombe and N. de Jonge, "Properties of a field emitter deduced from curvature of its Fowler-Nordheim plot," *J. Vac. Sci. Technol B*, vol. 24, p. 869, 2006.
- [46] C. J. Edgcombe and N. de Jonge, "Deduction of work function of carbon nanotube field emitter by use of curved-surface theory," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 40, pp. 4123-4128, 2007.
- [47] C. A. Spindt, "Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones," *J. Appl. Phys.*, vol. 47, no. 12, p. 5248, 1976.
- [48] N. De Jonge and J. M. Bonard, "Carbon nanotube electron sources and applications," *Phil. Trans. R. Soc. A*, vol. 362, p. 2239, 2004.

- [49] S. A. Guerera, L. F. Velasquez-Garcia and A. I. Akinwande, "Scaling of High-Aspect-Ratio Current Limiters for the Individual Ballasting of Large Arrays of Field Emitters," *IEEE Trans. Elect. Dev.*, vol. 59, p. 9, 2012.
- [50] W. I. e. a. Milne, "Carbon nanotubes," *E nano newsletter*, no. 13, 2008.
- [51] P. Kruit, "Multi-Electron Beam Nanoelectronics," in *IVNC 2014*, Engelberg CH, 2014.
- [52] E. W. Mueller, "Elektronenmikroskopische Beobachtungen von Feldkathoden," *Z. Phys*, vol. 106, p. 541, 1937.
- [53] F. R. Abbott and J. E. Henderson, "The Range and Validity of the Field Current Equation," *Phys. Rev.*, vol. 56, p. 113, 1939.
- [54] A. Modinos, *Field, Thermionic and Secondary Electron Emission Spectroscopy*, New York: Plenum, 1984.
- [55] M. Knoll and E. Ruska, "Das Elektronenmikroskop," *Z. Phys.*, vol. 78, p. 318, 1932.
- [56] M. von Ardenne, "Das Elektronen-Rastermikroskop. Praktische Ausführung," *Zeitschrift für technische Physik*, vol. 19, p. 407, 1938.
- [57] M. von Ardenne, "Das Elektronen-Rastermikroskop. Theoretische Grundlagen," *Z. Phys.*, vol. 109, p. 553, 1938.
- [58] A. V. Crewe, J. Wall and J. Langmore, "Visibility of Single Atoms," *Science*, vol. 168, p. 1338, 1970.
- [59] G. Binnig and H. Rohrer, "Scanning tunneling microscopy," *IBM J. Res. Dev.*, vol. 30, p. 4, 1986.
- [60] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber and E. Weibel, "Surface studies by scanning tunneling microscopy," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, p. 57, 1982.
- [61] J. G. Simmons, "Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film," *J. Appl. Phys.*, vol. 34, p. 1793, 1963.
- [62] R. Young, J. Ward and F. Scire, "The Topographiner, an instrument for measuring surface micrography," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 43, p. 999, 1972.

- [63] T. L. Kirk, U. Ramsperger and D. Pescia, "Near field emission scanning electron microscopy," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 27, no. 1, p. 152, 2009.
- [64] T. L. Kirk, L. G. De Pietro, D. Pescia and U. Ramsperger, "Electron beam confinement and image contrast enhancement in near field emission scanning electron microscopy," *Ultramicroscopy*, vol. 109, no. 5, p. 463, 2009.
- [65] T. L. Kirk, "Near field emission scanning electron microscopy, Applied Electron microscopy," in *Angewandte Elektronmikroskopie, vol 9*, Berlin, Logos Verlag, 2010.
- [66] D. A. Zanin, H. Cabrera, L. G. De Pietro, M. Pikulski, M. Goldmann., U. Ramsperger, D. Pesica and J. P. Xanthakis, "Fundamental Aspects of Near-Field Emission Scanning Electron Microscopy," *Advances in Imaging and Electron Physics*, vol. 170, p. 227, 2012.
- [67] D. A. Zanin, M. Erbudak, L. G. De Pietro, H. Cabrera, A. Vindigni, D. Pescia and U. Ramsperger, "Detecting the topographic, chemical, and magnetic contrast at surfaces with nm spatial resolution," in *Proceedings of the 27th IVNC*, Engelberg CH, 2014.
- [68] D. A. Zanin, L. G. De Pietro, H. Cabrera, A. Kostanyan, A. Vindigni, D. Pescia and U. Ramsperger, "Improving the topographiner technology down to nanometer spatial resolution," in *Proceedings of the 27th IVNC*, Engelberg CH, 2014.
- [69] A. Kyritsakis and J. P. Xanthakis, "Beam spot diameter of the near-field scanning electron microscopy," *Ultramicroscopy*, vol. 125, pp. 24-28, 2013.
- [70] A. Kyritsakis, G. C. Kokkorakis, J. P. Xanthakis, T. L. Kirk and D. Pescia, "Self focusing of field emitted electrons at an ellipsoidal tip," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 97, p. 023104, 2010.
- [71] "dlmf.nist.gov," 30.13(i).
- [72] "dlmf.nist.gov," 14.7(i).
- [73] J. P. Xanthakis and G. C. Kokkorakis, "Local electric field and enhancement factor around nanographitic structures embedded in amorphous carbon," *Surf. Interface Anal.*, vol. 39, pp. 135-138, 2007.

- [74] H. Cabrera, D. A. Zanin, L. G. De Pietro, T. Michaels, P. Thalmann, U. Ramsperger, A. Vindigni, D. Pescia, A. Kyritsakis, J. P. Xanthakis, F. Li and A. Abanov, "Scale invariance of a diodelike tunnel junction," *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 115436, 2013.
- [75] A. Kyritsakis, J. P. Xanthakis and D. Pescia, "Scaling properties of a non-Fowler-Nordheim tunneling junction," *Proc. R. Soc. A*, vol. 470, p. 20130795, 2014.
- [76] H. Liu, S. Kato and Y. Saito, "Effect of Cathode–Anode Distance on Field Emission Properties for Carbon Nanotube Film Emitters," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 48, p. 015007, 2009.
- [77] K. F. Hii, R. R. Vallance, S. B. Chikkamarahalli, M. P. Menguc and A. M. Rao, "Characterizing field emission from individual carbon nanotubes at small distances," *J. Vac. Sci. Technol B*, vol. 24, p. 1081, 2006.
- [78] C. J. Edgcombe and U. Valdre, "Microscopy and computational modelling to elucidate the enhancement factor for field electron emitters," *J. Microsc.*, vol. 203, p. 188, 2001.
- [79] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, New York: J. Wiley & Sons, Inc., 1999.
- [80] K. L. Jensen, "Space charge effects in field emission: Three dimensional theory," *J. Appl. Phys.*, vol. 107, p. 014905, 2010.
- [81] A. Fischer, M. S. Mousa and R. G. Forbes, "Influence of barrier form on Fowler–Nordheim plot analysis," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 31, p. 032201, 2013.
- [82] C. J. Edgcombe and A. M. Johansen, "Current–voltage characteristics of nonplanar cold field emitters," *J. Vac. Sci. Technol B*, vol. 21, p. 1519, 2003.
- [83] dlmf.nist.gov, "Leibniz's Theorem for Differentiation of Integrals," 1.1.22.
- [84] G. H. Deane and R. G. Forbes, "The formal derivation of an exact series expansion for the principal Schottky–Nordheim barrier function v , using the

- Gauss hypergeometric differential equation," *J. Phys. A: Math. Theor.*, vol. 41, p. 395301, 2008.
- [85] dlmf.nist.gov, "19.12.1".
- [86] R. G. Forbes, "Use of energy-space diagrams in free-electron models of field electron emission," *Surf. Interface Anal.*, vol. 36, pp. 395-401, 2004.
- [87] A. Sommerfeld and H. Bethe, *Handbuch der Physik*, vol. 24, no. 2, p. 333, 1933.
- [88] dlmf.nist.gov, "2.3(ii)".
- [89] C. Spindt, C. E. Holland and P. R. Schwoebel, "A Reliable Improved Spindt Cathode Design for High Currents".
- [90] H. Cabrera, D. A. Zanin, L. G. De Pietro, U. Ramsperger, A. Vindigni and D. Pescia, "Private Communication".
- [91] P. H. Cutler and D. Nagy, "The use of a new potential barrier model in the Fowler-Nordheim theory of field emission," *Surf. Sci.*, vol. 3, pp. 71-94, 1964.
- [92] C. Spindt, C. E. Holland and P. R. Schwoebel, "A Reliable Improved Spindt Cathode Design for High Currents," in *IVEC 2010*, Monterey CA, 2010.
- [93] S. Siontas, A. Kyritsakis, J. P. Xanthakis, S. Iacobucci and G. Stefanni, "Lateral distribution of field-emitted electrons from a carbon nanofiber array: A theoretical calculation," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 32, p. 02B107, 2014.