

УДК 519.63+681.3

## Полевая эмиссия острейного эмиттера с учетом кривизны его вершины

Б. Г. Фрейнкман, С. В. Поляков

*Рассмотрены проблемы моделирования процессов автоэмиссии с поверхности углеродных нанотрубок. Основное внимание уделено влиянию неоднородности поля на форму потенциального барьера. В качестве тестовой задачи принят проводящий цилиндр (переходящий в конус со сферической вершиной), помещенный в однородное внешнее поле. Получены поправки к закону Фаулера—Нордгейма, учитывающие неоднородность внешнего поля в области туннелирования, и функция рассеяния виртуального источника, зависящая от эмиссионных параметров острейного эмиттера. Разработаны алгоритмы и программы расчета тока, углового и энергетического спектров эмиссии по заданному распределению внешнего поля вблизи эмиттера.*

PACS: 41.85.-p

*Ключевые слова:* автоэмиссия, нанотрубка, туннелирование, эмиттер.

### Введение

Одно из направлений развития электроники — электровакуумная наноэлектроника на основе автоэмиссионных источников тока [1, 2]. Толчком к развитию этого направления послужили успехи в технологии изготовления углеродных нанотрубок и экспериментальные исследования их эмиссионных характеристик. Большое усиление напряженности поля наблюдается на вершине нанотрубки, радиус кривизны которой достигает размеров, соизмеримых с шириной потенциального барьера. Можно ожидать, что неоднородность поля, связанная с кривизной поверхности эмиттера, изменит вид как потенциала изображения, так и потенциального барьера, что потребует коррекции закона автоэмиссии Фаулера—Нордгейма.

Для электронной оптики зондовых приборов особый интерес представляют угловой и энергетический спектры эмиссии, которые определяют сферическую и хроматическую абберации и, следовательно, разрешение этих систем.

Ранее было установлено [3], что влияние радиуса кривизны поверхности эмиттера на распределение потенциала изображения пренебрежимо

мало при реально достижимых радиусах порядка 0,5 мкм. Однако для меньших размеров, которые предполагается использовать в зондовых приборах нового поколения, это уже не так.

В данной работе основное внимание уделено влиянию неоднородности поля на форму потенциального барьера. Проводящий цилиндр, переходящий в конус со сферической вершиной, помещенный в однородное внешнее поле, является тестовой задачей.

В работе получены также поправки к закону Фаулера—Нордгейма [4], учитывающие неоднородность внешнего поля в области туннелирования. Разработаны алгоритмы и программы расчета тока, углового и энергетического спектра эмиссии по заданному распределению внешнего поля вблизи эмиттера. Получена функция рассеяния виртуального источника, зависящая от эмиссионных параметров острейного эмиттера.

### Задача туннелирования

Как известно, расчет тока при полевой эмиссии основан на решении задачи туннелирования волнового пакета через потенциальный барьер, образованный потенциалом внешнего поля и потенциалом изображения эмитируемого электрона. Вероятность туннелирования определяется из решения одномерного уравнения Шредингера в плоской геометрии и имеет вид

$$D(\varepsilon, E) = \left( 1 + \exp \left[ -2i \int_{x_1}^{x_2} \lambda(x) dx \right] \right)^{-1},$$

$$\lambda(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( \phi + \varepsilon - \frac{e^2}{4x} - U(x) \right)}, \quad (1)$$

$$\lambda^2(x_k) = 0, \quad k = 1, 2,$$

**Фрейнкман Борис Григорьевич**, старший научный сотрудник. Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН.

Россия, 142432, Московская обл., п. Черноголовка,

ул. Институтская, 6.

Тел. (499) 151-70-03.

E-mail: freinkman@mtu-net.ru; freink@ipmt-hpm.ac.ru

**Поляков Сергей Владимирович**, зав. сектором.

Институт математического моделирования РАН.

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., 4, к. А.

Тел. (499) 973-03-85, (499) 972-07-23.

E-mail: polyakov@imamod.ru

Статья поступила в редакцию 18 ноября 2009 г.

© Фрейнкман Б. Г., Поляков С. В., 2010

где  $\phi$  — работа выхода;

$\varepsilon$  — кинетическая энергия туннелирующего электрона, отсчитанная от уровня Ферми;

$U(x)$  — распределение потенциала внешнего поля вблизи эмиттера.

Подкоренное выражение в (1) определяется распределением потенциала в области туннелирования с учетом потенциала изображения туннелирующего электрона. На рис. 1 представлен характерный вид потенциального барьера.

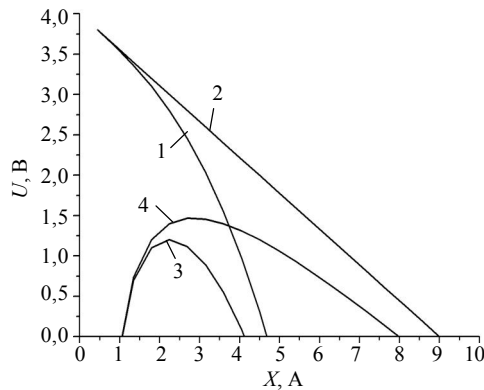


Рис. 1. Форма потенциального барьера:

- 1 — барьер в неоднородном поле без учета потенциала изображения; 2 — то же, с учетом потенциала изображения; 3 — в однородном поле без учета потенциала изображения; 4 — то же, с учетом потенциала изображения

В теории Фаулера—Нордгейма в предположении постоянства напряженности внешнего поля в области туннелирования интеграл (1) выражается через эллиптические интегралы с помощью табулированной функции Нордгейма  $v(\phi, E)$ , и вероятность туннелирования принимает вид [4]

$$D(\varepsilon) = \exp[-b(\phi, E) + c(\phi, E)\varepsilon]. \quad (2)$$

Предположение об однородности напряженности внешнего поля в области туннелирования не выполняется в реальных конструкциях даже для плоских поверхностей эмиттеров. Это связано с тем, что в таких конструкциях большие напряженности поля, необходимые для возникновения полевой эмиссии, достигаются за счет неоднородного распределения поля вблизи эмитирующей поверхности. Влияние неоднородности внешнего поля на вероятность туннелирования в значительной степени определяется кривизной поверхности эмиттера. Из уравнения Лапласа следует [5], что вблизи эквипотенциальной поверхности, имеющей два ортогональных радиуса кривизны  $R_1$  и  $R_2$ , выполняется соотношение

$$\frac{\partial E_n}{\partial x} = -E_n \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \vec{n} \vec{e}_x.$$

Следовательно, распределение потенциала вблизи поверхности эмиттера можно представить в виде

$$U(x) = E_n x \left[ 1 - \frac{x}{2} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] + E_n'' \frac{x^3}{6}. \quad (3)$$

Анализ (3) показывает, что существенное влияние неоднородности поля на вероятность туннелирования будет проявляться при радиусах кривизны, соизмеримых с шириной потенциального барьера, примерно равной отношению работы выхода к напряженности поля на поверхности. При этом для плоских поверхностей это влияние менее существенно, так как изменение напряженности поля пропорционально квадрату расстояния до поверхности эмиттера, в то время как для криволинейных поверхностей оно пропорционально этому расстоянию. Следует также отметить немонотонный характер изменения напряженности поля для выпуклых поверхностей эмиттера.

Таким образом, усиление напряженности поля на эмиттере с малыми радиусами кривизны сопряжено с существенной неоднородностью поля в области туннелирования.

Кроме того, при эмиссии с криволинейной поверхности следует учитывать изменение распределения потенциала изображения. Можно показать, что для потенциала изображения на сфере радиуса  $\rho$  поправки к потенциалу изображения на

плоскости будут пропорциональны  $\frac{x^2}{\rho^2}$ . Поэтому

ими можно пренебречь при радиусах кривизны поверхности большей протяженности области туннелирования  $\frac{\phi}{E}$ . В дальнейших расчетах мы

будем использовать потенциал изображения для плоской поверхности. В качестве модельной задачи использовалась задача эмиссии одиночной цилиндрической нанотрубки, переходящей в конус, гладко сопряженный со сферической вершиной, помещенной в однородное поле плоского конденсатора (рис. 2).

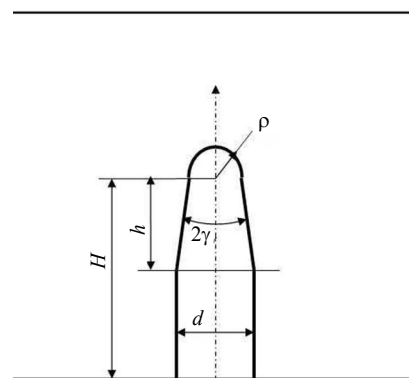


Рис. 2. Расчетная геометрия эмиттера

### Расчет поля вблизи вершины острейшего эмиттера

В общем случае расчет поля вблизи вершины острейшего эмиттера представляет значительную трудность, связанную с сильной разномаштабностью задачи и погрешностями дискретизации. Обычно эти проблемы решаются либо с помощью аналитического описания поля вблизи модельных поверхностей типа сфера на конусе, либо путем использования локальных масштабов дискретизации [6, 7]. В том и другом случае нет уверенности в точности расчета, необходимого для определения структуры поля в масштабах, соизмеримых с протяженностью области туннелирования. Поэтому в данной работе для расчета поля вблизи эмиттера принят комбинированный численно-аналитический метод. На первом этапе для численного решения полевой задачи используется метод граничных интегральных уравнений [8], который позволяет достаточно точно определить интегральное влияние граничных условий на удаленных от эмиттера поверхностях, на втором этапе — локальная степенная аппроксимация (3), точно удовлетворяющая уравнению Лапласа вблизи эмиттера и в среднеквадратичном приближении совпадающая с численным расчетом поля в масштабе дискретизации интегрального уравнения.

Таким образом, коэффициенты разложения (3) определяли индивидуально для каждой точки эмиссии путем минимизации функционала

$$J(E_n, E_n'') = \sum_{n=1}^N \left[ U(x_n) - E_n x_n \left( 1 - \frac{x_n}{\rho} \right) - E_n'' \frac{x_n^3}{6} \right]^2,$$

где взяли численный расчет поля  $U(x_n)$  по нормали к поверхности в интервале  $[0, \rho]$ .

На рис. 3 представлен пример распределения поля вблизи сферической вершины нанотрубки, полученного численно и с помощью аппроксимации (3). Видно, что использование аппроксимации (3) позволяет сгладить погрешности численного счета и обеспечить точное удовлетворение граничных условий.

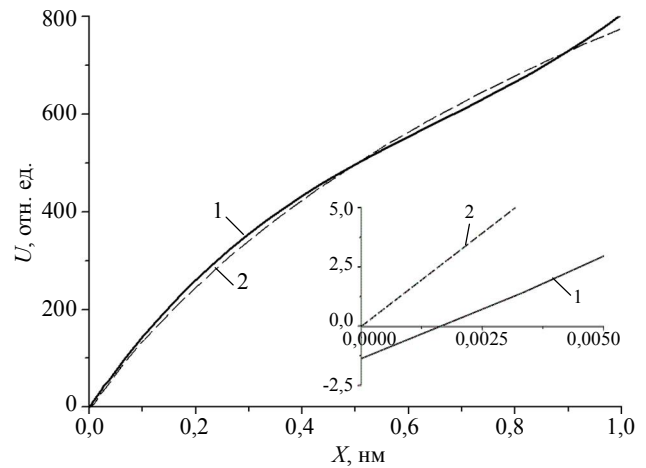


Рис. 3. Сравнение численного расчета поля (1) вблизи вершины нанотрубки с аналитической аппроксимацией (2) в виде ряда (3)

### Алгоритм вычисления локальной вероятности туннелирования в неоднородном внешнем поле

Представление поля в виде (3) дает возможность получать аналитические соотношения, определяющие локальную вероятность туннелирования. Для этого определяют внешнюю границу области туннелирования  $x_2$  в неоднородном поле из решения уравнения

$$\phi + \varepsilon - \frac{e^2}{4x_2} - eE_n x_2 \left[ 1 - \frac{x_2}{2} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] - eE_n'' \frac{x_2^3}{6} = 0,$$

и вводят эффективное однородное поле напряженностью

$$\tilde{E} = E_n \left[ 1 - x_2 \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] - E_n'' \frac{x_2^2}{2}.$$

С учетом этого подынтегральную функцию в (1) можно представить в виде

$$\lambda(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left[ \sqrt{\left( \phi + \varepsilon - \frac{e^2}{4x} - e\tilde{E}x \right) - F(x)} \right],$$

$$F(x) = \frac{eE_n x \left[ 1 - \frac{x}{2} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] + eE_n'' \frac{x^3}{6} - e\tilde{E}x}{\sqrt{\phi + \varepsilon - \frac{e^2}{4x} - e\tilde{E}x} + \sqrt{\phi + \varepsilon - \frac{e^2}{4x} - eE_n x \left[ 1 - \frac{x}{2} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] - eE_n'' \frac{x^3}{6}}}. \tag{4}$$

Тогда первое слагаемое в (4) будет определять вероятность туннелирования в эффективном однородном поле и выражаться через функцию Нордгейма с напряженностью этого поля, а второе слагаемое — поправку, связанную с неоднородностью поля. В общем случае вероятность туннелирования в неоднородном поле можно представить соотношением подобным (2)

$$D(\varepsilon) \approx \exp \times \left[ -b_0(\phi, \tilde{E}) + c_0(\phi, \tilde{E})\varepsilon - b_1(\phi, x_2) + c_1(\phi, x_2)\varepsilon \right], \quad (5)$$

где коэффициенты  $b_0, c_0$  выражены через функцию Нордгейма при эффективной напряженности однородного поля, коэффициенты  $b_1, c_1$  определяют интегралом

$$\int_{z_1}^{z_2} F(x) dx.$$

Для приближенного вычисления этого интеграла разложим подкоренные выражения в знаменателе вблизи их максимальных значений, и в первом приближении получим:

$$b_1 \approx \frac{e(E_n - \tilde{E}) \frac{z_2^2}{2} - eE_n \frac{z_2^3}{3} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + eE_n'' \frac{z_2^4}{4} \frac{z_2^3}{6}}{g_0 + g_1};$$

$$c_1 \approx b_1 \frac{\frac{e^2 z_2}{3} \left( \frac{\tilde{E}}{g_0^2} + \frac{E_n}{g_1^2} \right)}{e(E_n - \tilde{E}) - eE_n \frac{2e^2 z_2}{3} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + eE_n'' \frac{z_2^2}{2}};$$

$$g_0 = \sqrt{\phi - \frac{e^2}{4x_{m0}} - e\tilde{E}x_{m0}};$$

$$g_1 = \sqrt{\phi - \frac{e^2}{4x_{m1}} - eE_n x_{m1} \left[ 1 - x_{m1} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] - eE_n'' \frac{x_{m1}^3}{6}};$$

$$\frac{e^2}{4x_{m0}^2} - e\tilde{E} = 0;$$

$$\frac{e^2}{4x_{m1}^2} - eE_n \left[ 1 - x_{m1} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] - eE_n'' \frac{x_{m1}^3}{2} = 0.$$

### Исследование зависимости эмиссионных характеристик одиночной нанотрубки от геометрических параметров ее вершины

Изложенный выше алгоритм расчета вероятности туннелирования в неоднородном поле был использован при исследовании зависимости вольт-амперной (ВАХ) и спектральных характеристик эмиссии от геометрических параметров вершины нанотрубки. В качестве модельной задачи рассматривали эмиссию нанотрубки, помещенной в однородное поле плоского конденсатора. Поверхность нанотрубки, изображенная на рис. 2, состояла из цилиндра радиусом 10 и высотой 2500 нм, переходящего в конус, закрытый сферической вершиной. Высота конуса и радиус сферы, как и напряженность поля конденсатора, были варьируемыми параметрами.

Зависимости ВАХ от радиуса сферической вершины и высоты конической части представлены на рис. 4, из которого видно, что ВАХ в большей степени зависит от радиуса сферы вершины, чем от высоты конической части и значительно отличается от линейной зависимости, характерной для закона Фаулера—Нордгейма. Наклон ВАХ увеличивается с ростом напряженности приложенного поля и радиусом кривизны, что связано с изменением формы потенциального барьера.

На рис. 5, а даны примеры изменения распределения потенциала и формы потенциального барьера на сферической вершине нанотрубки и при переходе на коническую часть боковой поверхности в однородном и неоднородном приближениях. Видно, что в неоднородном приближении эффективная работа выхода (высота потенциального барьера) меняется сравнительно мало в отличие от ширины потенциального барьера.

На рис. 5, б, в показаны изменения распределения потенциала и формы потенциального барьера при изменении радиуса сферической вершины нанотрубки и напряженности конденсатора. Из этих рисунков видно, что с уменьшением радиуса кривизны вершины нанотрубки и увеличением напряженности однородного поля, в котором находится нанотрубка, существенно уменьшаются эффективная работа выхода и ширина потенциального барьера.

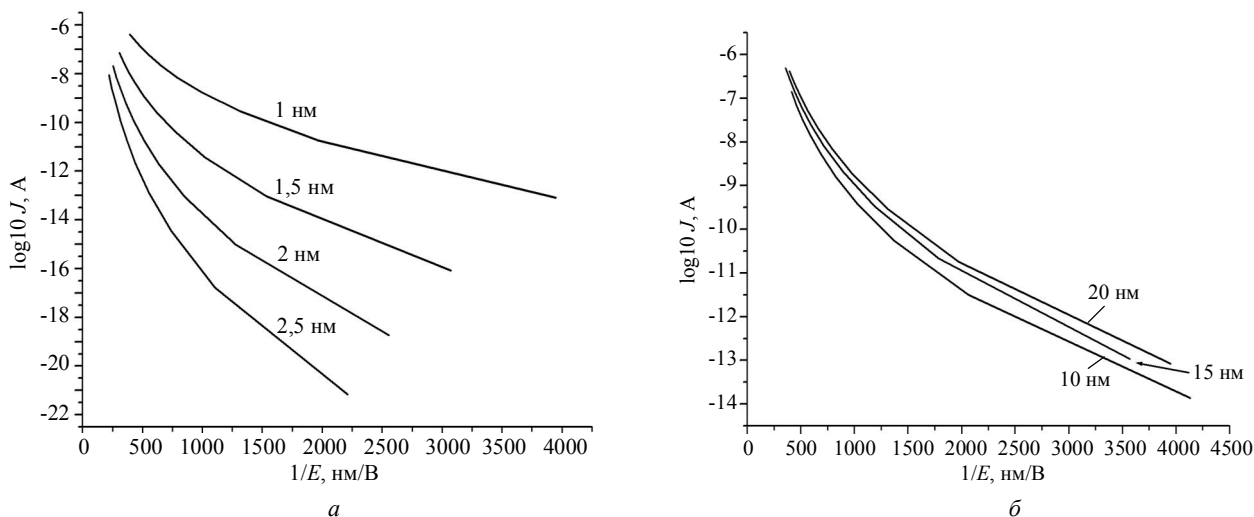


Рис. 4. Зависимость ВАХ:

*a* — от радиуса сферической вершины нанотрубки; *б* — от высоты конической части

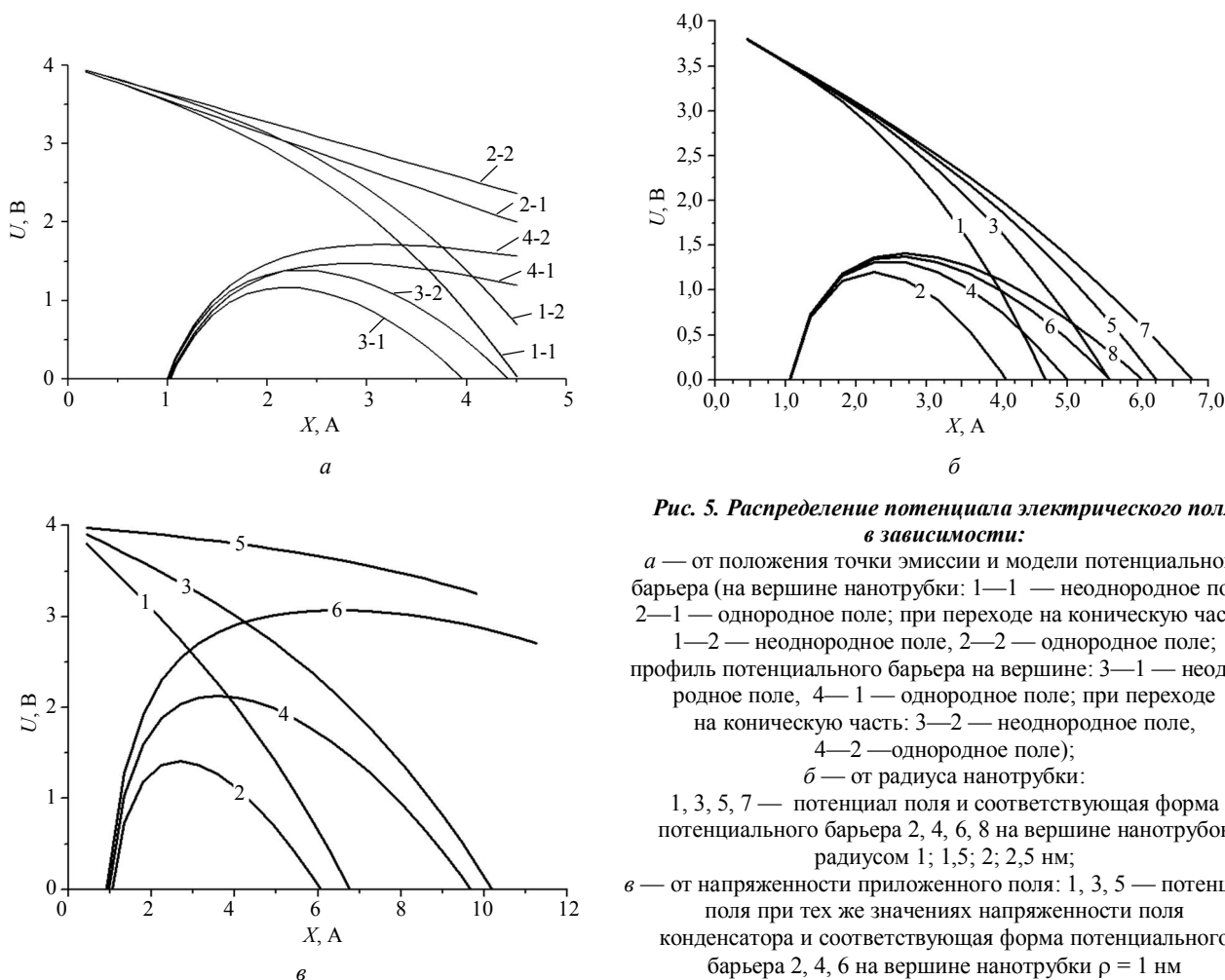
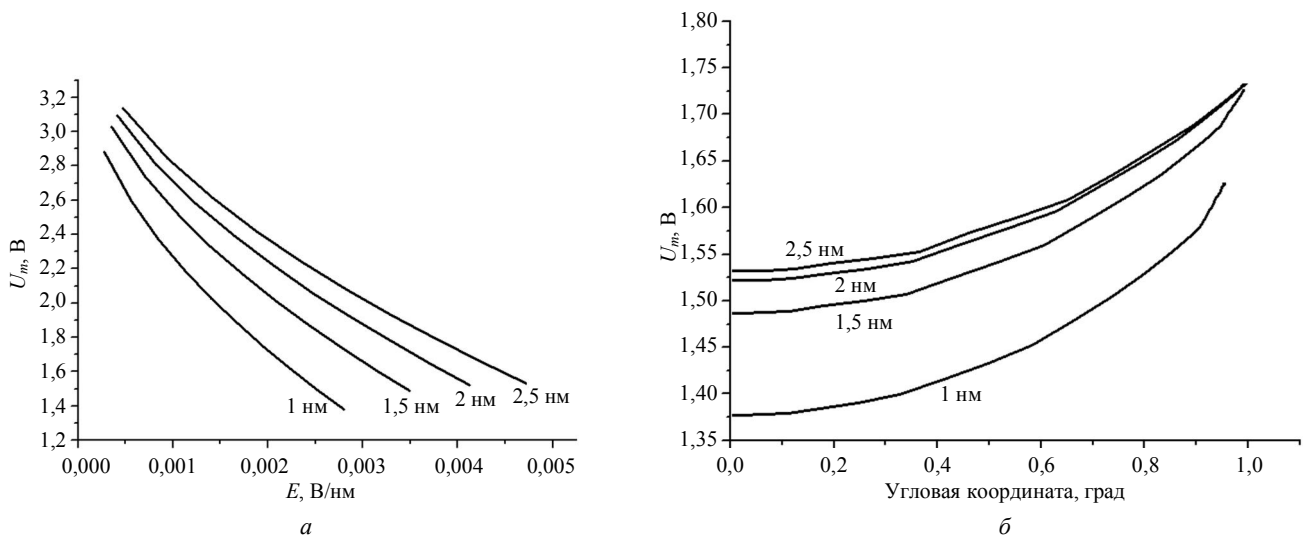


Рис. 5. Распределение потенциала электрического поля в зависимости:

*a* — от положения точки эмиссии и модели потенциального барьера (на вершине нанотрубки: 1—1 — неоднородное поле, 2—1 — однородное поле; при переходе на коническую часть: 1—2 — неоднородное поле, 2—2 — однородное поле; профиль потенциального барьера на вершине: 3—1 — неоднородное поле, 4—1 — однородное поле; при переходе на коническую часть: 3—2 — неоднородное поле, 4—2 — однородное поле);  
*б* — от радиуса нанотрубки:  
 1, 3, 5, 7 — потенциал поля и соответствующая форма потенциального барьера 2, 4, 6, 8 на вершине нанотрубок радиусом 1; 1,5; 2; 2,5 нм;  
*в* — от напряженности приложенного поля: 1, 3, 5 — потенциал поля при тех же значениях напряженности поля конденсатора и соответствующая форма потенциального барьера 2, 4, 6 на вершине нанотрубки  $\rho = 1$  нм

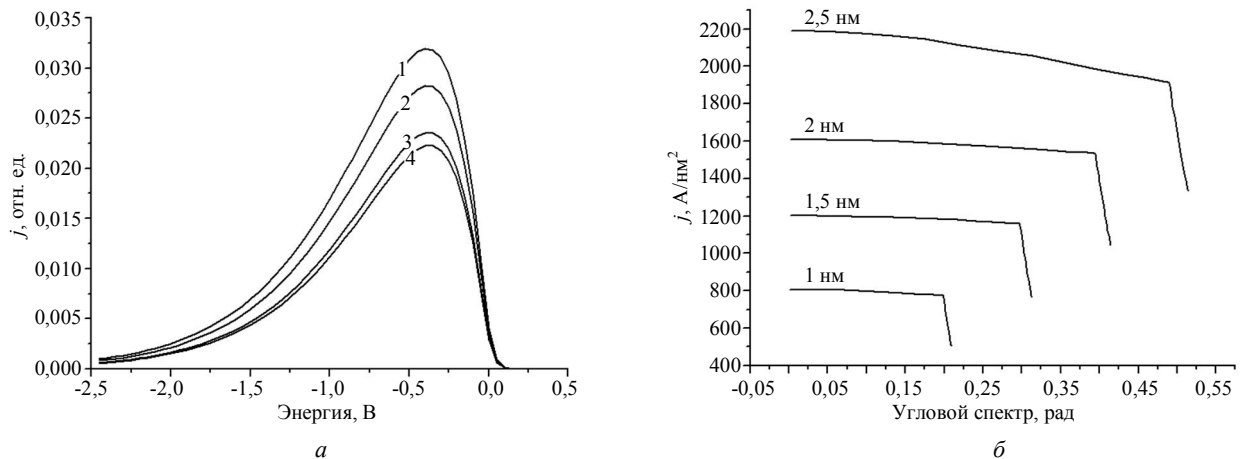
На рис. 6, *a* представлены зависимости эффективной работы выхода от напряженности однородного поля конденсатора, а на рис. 6, *б* — от угловой координаты точки эмиссии при различных радиусах кривизны. Энергетические спектры эмиссии при различных ее углах представлены на

рис. 7, *a*, из которого видно, что энергетический спектр эмиссии, мало меняющийся вдоль сферической поверхности, быстро убывает при переходе на конус. Еще в большей степени это характерно и для углового спектра, представленного на рис. 7, *б*.



**Рис. 6. Зависимость эффективной работы выхода:**

*a* — от напряженности приложенного поля; *b* — от угловой координаты точки эмиссии



**Рис. 7. Зависимости:**

*a* — энергетического спектра от угла эмиссии для нанотрубки с радиусом вершины 1 нм (1—4 соответствуют значениям угла 0,001; 0,202; 0,207 и 0,209 рад); *b* — углового спектра от радиуса вершины нанотрубки

Резкое изменение спектров эмиссии при переходе от сферической к конической части вершины связано с изменением параметра связи первой и второй производных потенциала на поверхности.

Используя зависимость вероятности туннелирования от угла и энергии эмиссии (5) и предполагая, что распределение электронов по касательным скоростям не изменяется при туннелировании, определим функцию распределения тока в виртуальном источнике.

#### Функция распределения тока в виртуальном источнике

Геометрия эмиттера и параметры эмиссии острейшего эмиттера определяют начальные условия для расчета электронно-оптических систем, использующих его. Эти условия обычно задаются в виде распределения плотности тока в плоскости

предмета, находящегося в эквипотенциальном пространстве. Так как эмиссия в основном идет со сферической поверхности, то в качестве плоскости предмета удобно брать плоскость, ортогональную оси трубки, проходящую через центр кривизны ее поверхности, а потенциал пространства взять равным работе выхода эмиттера. Тогда угол вылета из виртуального источника будет совпадать с углом эмиссии, разброс по начальной энергии определяться энергетическим спектром эмиссии, а распределение по плоскости предмета — распределением по касательным скоростям эмиссии. Связь между касательной скоростью эмиссии и положением точки вылета из плоскости приближенно определяем соотношением

$$r^2 = \rho^2 \frac{\varepsilon_{\tau}}{\varepsilon_n} \cos^2 \theta.$$

Предполагая, что до эмиссии электроны имеют распределение по энергии Ферми—Дирака и вероятность эмиссии определяется соотношением (5), получим функцию рассеяния виртуального источника в виде

$$\begin{aligned}
 F(r, \theta, \varepsilon) = & \\
 = C \frac{\exp[-b_0 - b_1 \theta^2 + (c_0 + c_1 \theta^2)(\varepsilon_n - \varepsilon_f)]}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon_n(1 + r^2/\rho^2 \cos^2 \theta) - \varepsilon_f}{kT}\right]} \times & \\
 \times \sin \theta \approx C \exp\left[-\frac{\varepsilon_f}{kT} \left(\frac{r}{\rho}\right)^2\right] \times & \quad (6) \\
 \times \frac{\exp[-b_0 - b_1 \theta^2 + (c_0 + c_1 \theta^2)(\varepsilon - \varepsilon_f)]}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_f}{kT}\right)} \sin \theta. &
 \end{aligned}$$

Из (6) можно приближенно получить размер виртуального источника

$$r_m \approx \rho \sqrt{\frac{kT}{\varepsilon_f}}.$$

При расчете зондовых систем на основе острейного эмиттера приведенная выше функция позволяет определить зависимость распределения плотности тока на мишени от эмиссионных параметров эмиттера.

### Заключение

Изложена методика расчета поправок к закону Фаулера—Нордгейма, учитывающих неоднородность внешнего поля в области потенциального барьера, связанную с кривизной поверхности эмиттера. Получены приближенные аналитические выражения, разработаны алгоритмы и программы для расчета плотности тока, углового и энергетического спектров эмиссии. Проведены расчеты тока, угловых и энергетических спектров

эмиссии одиночных цилиндрических нанотрубок с вершиной в виде конуса, переходящего в сферу. Показано, что ВАХ острейного эмиттера существенно отличается от линейной зависимости, характерной для закона Фаулера—Нордгейма. Наклон ВАХ увеличивается с ростом напряженности приложенного поля и радиуса кривизны эмиттера. Это связано с характером изменения потенциального барьера в неоднородном поле эмиттера с выпуклой поверхностью.

Следует отметить, что уменьшение или увеличение потенциального барьера зависит не только от кривизны поверхности эмиттера, но и от геометрии поверхностей электродов, окружающих его, что создает предпосылки статического и динамического управления процессом эмиссии.

Использование разработанных алгоритмов совместно с ранее полученными алгоритмами расчета распределения плотности тока в фокальной области по абберациям фокусирующих систем [9] позволяет создать математическую модель электронно-оптической системы на основе острейного эмиттера.

### Литература

1. Титаренко Н. И., Кравченко В. Ф. Автоэмиссионные наноструктуры и приборы на их основе. — М.: Физматлит, 2006.
2. Шешин Е. П. Структура поверхности и автоэмиссионные свойства углеродных материалов. — М.: МФТИ, 2001.
3. Семан О. И. // ЖТФ. 1946. Т. 16. С. 291—308.
4. Модинос А. Авто-, термо- и вторично-электронная эмиссионная спектроскопия. — М.: Наука, 1990.
5. Джексон Дж. Классическая электродинамика. — М.: Мир, 1965.
6. Хокс П., Каснер Э. Основы электронной оптики. — М.: Мир, 1993. Т. 2.
7. Herrmannsfeldt W. B., Becker R., Drodie I., Rosengreen A., Spindt C. A. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1990. A298. P. 39—44.
8. Фрейнкман Б. Г. // ЖТФ. 1979. Т. 49. С. 2469—2472., 1980. Т. 50. С. 425—427.
9. Freinkman B. G. Current distribution across the target of field-emission probing systems. CPO-7. — Cambridge, England, 2006, abstract. P. 25.

## Field emission from edge emitter with taking into account of edge curvature

B. G. Freinkman

Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials of RAS, 6 Institute str., Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia  
E-mail: freinkman@mtu-net.ru; freink@ipmt-hpm.ac.ru

S. V. Polyakov

Institute for Mathematical Modeling of RAS, 4/A Miusskaya sq., Moscow, 125047, Russia  
E-mail: polyakov@imamod.ru

*A simulation of auto-emission processes from a carbon nanotubes surface is considered. This problem is initiated by use of nanotubes as emitters of modern and future probing nano-devices. For*

*nanometer sizes of nanotubes the correction of the law of auto-emission of Fauler—Nordheim is needed. In this work the basic attention is given influence of heterogeneity of a field on the form of a potential barrier. As a test problem the spending cylinder passing in a cone with spherical top, placed in a homogeneous external field is considered. The amendments to Fauler—Nordheim law, considering heterogeneity of an external field in tunneling area are received. Algorithms and programs of calculation of a current, an angular and power spectrum of emission on the set distribution of an external field near to the emitter are developed. Function of dispersion of the virtual source, depending on issue parameters of edge emitter is found.*

PACS: 41.85.-p

*Keywords:* fieldemission, nanotube, tunneling, emitter.

Bibliography — 9 references.

*Received 18 November 2009*