ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών & Μηχανικών Υπολογιστών

Τομέας Ηλεκτρομαγνητικών Εφαρμογών, Ηλεκτροοπτικής και Ηλεκτρονικών Υλικών

Διπλωματική εργασία:

Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από αιχμηρές – μη σφαιρικές ακίδες

Φοιτητής: Κυριτσάκης Ανδρέας

Επιβλέπων: Ιωάννης Ξανθάκης, καθηγητής

Αθήνα, 09/2010

Περίληψη

Η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων είναι ένα φαινόμενο πάνω στο οποίο βασίζονται πολλές εφαρμογές ηλεκτρονικής μικροσκοπίας. Στο κλασσικό ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (SEM) χρησιμοποιούνται ηλεκτρονικά εστίασης για να εστιαστεί η εκπεμπόμενη δέσμη. Ωστόσο στο ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης εγγύος πεδίου (NFESEM) που έχει αναπτυχθεί πρόσφατα, δεν χρησιμοποιούνται τέτοιες διατάξεις, και παρόλα αυτά, η διακριτική ικανότητα παραμένει πολύ μικρή. Το γεγονός αυτό έρχεται σε αντίθεση με την κλασσική θεωρία εκπομπής πεδίου Fowler-Nordheim, και με τα κλασσικά μοντέλα σφαιρικής γεωμετρίας για τις ακίδες εκπομπής. Για το λόγο αυτό αναλύουμε το φαινόμενο χρησιμοποιώντας ελλειπτικό μοντέλο για την ακίδα (το οποίο προσομοιώνει την αιχμηρότητά της) σε συνδυασμό με τρισδιάστατη προσέγγιση WKB. Αυτό το οποίο παρατηρείται είναι ότι καθώς η ακίδα γίνεται πιο αιχμηρή, αφ' ενός μειώνεται η ενεργή περιοχή εκπομπής, κι αφ' ετέρου τα ηλεκτρονικά μονοπάτια συγκλίνουν προς τον άξονα. Και οι 2 αυτοί μηχανισμοί παράγουν μία εγγενή εστίαση της δέσμης.

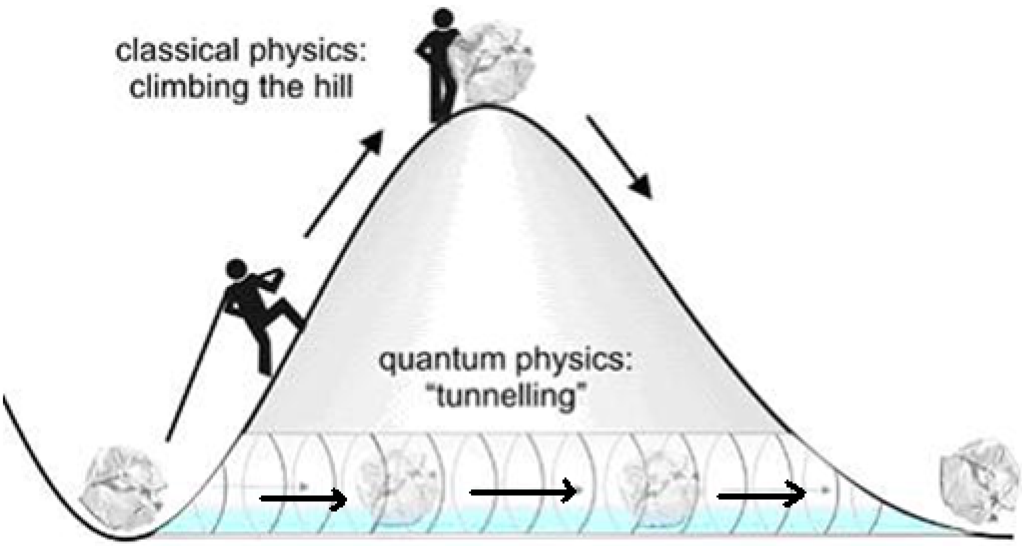
Περιεχόμενα

Λίστα σχημάτων και εικόνων

Κεφάλαιο 1:
Κβαντικό φαινόμενο σήραγγας

1.1. Γενικά

Το κβαντικό φαινόμενο σήραγγας είναι το φαινόμενο κατά το οποίο ένα σωματίδιο περνάει «διαμέσου» ενός φράγματος δυναμικού, το οποίο είναι υψηλότερο από την ενέργεια του σωματιδίου. Με βάση την κλασσική φυσική το φαινόμενο αυτό είναι αδύνατο να συμβεί, ωστόσο η κυματική φύση των σωματιδίων που εισάγει η κβαντομηχανική, προβλέπει τέτοιου είδους φαινόμενα, τα οποία εντάσσονται στη γενικότερη κατηγορία των φαινομένων σκέδασης (scattering) (*εικόνα 1.1*).



Εικόνα 1.1 *Το κλασσικό ανάλογο του φαινομένου σήραγγας*

Το φαινόμενο σήραγγας έχει πλείστες πειραματικές αποδείξεις και αποτελεί βάση πολλών εφαρμογών, μία εκ των οποίων είναι η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων.

Πριν όμως ασχοληθούμε με το φαινόμενο, ας εξετάσουμε μια ειδική περίπτωση κυματοσυνάρτησης, αυτή του επιπέδου κύματος:

$$\psi(x) = A\exp(jkx) \tag{1.1}$$

Η κυματοσυνάρτηση αυτή αποτελεί λύση της εξίσωσης Schrödinger για την περίπτωση του ελευθέρου σωματιδίου, όπως επίσης και ιδιοσυνάρτηση του τελεστή ορμής. Η συνάρτηση αυτή ωστόσο δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, άρα δεν μπορεί να αναπαραστήσει πεπερασμένο αριθμό σωματιδίων. Αναπαριστά ωστόσο πολύ καλά δέσμη σωματιδίων τα οποία κινούνται προς τα δεξιά. Πραγματικά, σε μία τέτοια κυματοσυνάρτηση, αν υπολογίσουμε την πυκνότητα ρεύματος πυκνότητας πιθανότητας

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}\left\{\Psi^{*}\nabla\Psi\right\} \tag{1.3}$$

βρίσκουμε ότι είναι $\vec{J} = \hat{x}\frac{\hbar k}{m}|A|^{2}$ δηλαδή η πυκνότητα ρεύματος θα είναι σταθερή και ανάλογη του πλάτους και του κυματαριθμού του οδεύοντος κύματος. Το γεγονός αυτό είναι βασικό χαρακτηριστικό της κινούμενης δέσμης, συνεπώς το οδεύον κύμα είναι κατάλληλο για την περιγραφή της. Να παρατηρήσουμε επίσης ότι δεδομένου ότι στον κλασσικό ηλεκτρομαγνητισμό η πυκνότητα ρεύματος είναι $\vec{J} = \rho\vec{\upsilon}$, ότι η ποσότητα $\hbar k$ είναι ιδιοτιμή ορμής, και ότι $e|\Psi|^{2}$ αντιστοιχεί στην πυκνότητα φορτίου, βλέπουμε την ευθεία αναλογία που υπάρχει μεταξύ μιας τέτοιας κυματοσυνάρτησης και μιας δέσμης σωματιδίων που κινούνται προς μια κατεύθυνση.

Τέλος, μια τέτοια αναπαράσταση είναι πολύ σημαντική σε προβλήματα σκέδασης, καθώς μπορεί να δώσει απ' ευθείας τιμή για το συντελεστή ανάκλασης (reflection coefficient) και διέλευσης (transmission coefficient), δηλαδή της πιθανότητας να περάσει ή να ανακλαστεί το σωματίδιο από το σκεδαστή. Πράγματι, αν έχουμε την προσπίπτουσα δέσμη που περιγράφεται με οδεύον κύμα πλάτους A και κυματαριθμού k_A, την ανακλώμενη δέσμη με πλάτος B και κυματαριθμό k_B, και την διερχόμενη με πλάτος C και κυματαριθμό k_C, ο συντελεστής ανάκλασης, δηλαδή ο λόγος των 2 ρευμάτων πιθανότητας θα είναι

$$R = \frac{J_B}{J_A} = \frac{k_B|B|^{2}}{k_A|A|^{2}}. \tag{1.4}$$

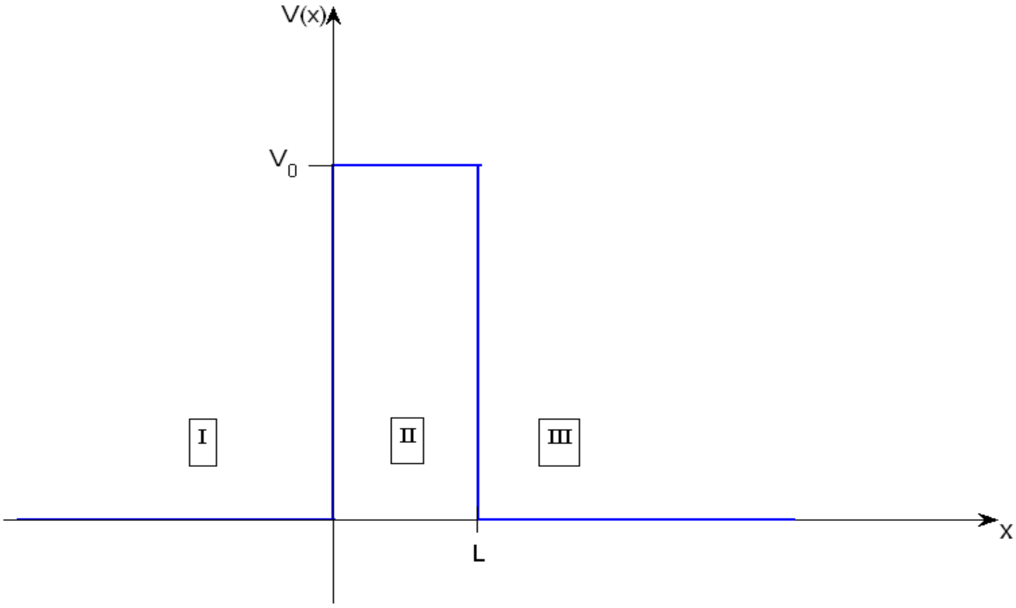
Ακριβώς αντίστοιχα υπολογίζεται και ο συντελεστής διέλευσης

$$T = \frac{J_C}{J_A} = \frac{k_C|C|^{2}}{k_A|A|^{2}}, \tag{1.5}$$

Να σημειωθεί ότι μιας και οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης εκφράζουν πιθανότητες, και τα μοναδικά ενδεχόμενα είναι κάποιο σωματίδιο να ανακλαστεί ή να περάσει, το άθροισμα των συντελεστών πρέπει να δίνει μονάδα: R+T=1. Αυτή η σχέση εκφράζει επίσης την διατήρηση του συνολικού αριθμού σωματιδίων.

1.2. Ορθογώνιο φράγμα δυναμικού.

Ας εξετάσουμε αρχικά την πιο απλή περίπτωση φαινομένου σήραγγας: το μονοδιάστατο ορθογώνιο φράγμα δυναμικού. Στο *σχήμα 1.1* φαίνεται η μορφή του δυναμικού για την απλή αυτή περίπτωση. Είναι προφανές ότι με βάση την κλασσική μηχανική, ένα σώμα με ενέργεια μικρότερη από V_0 είναι αδύνατον να περάσει από το φράγμα από αριστερά προς τα δεξιά η αντίστροφα. Τι συμβαίνει όμως με βάση την κβαντομηχανική; Για να το δούμε θα πρέπει να επιλύσουμε την εξίσωση Schrödinger για το δυναμικό αυτό.



Σχήμα 1.1 *Η μορφή του δυναμικού για την απλή περίπτωση του ορθογωνίου φράγματος, καθώς επίσης και οι 3 περιοχές στις οποίες χωρίζεται ο χώρος*

Χωρίζουμε όπως φαίνεται στον σχήμα το μονοδιάστατο χώρο σε τρεις περιοχές. Η περιοχές I και III έχουν V=0 και η II V=V_0. Δεν μένει τώρα παρά να επιλύσουμε τη μονοδιάστατη χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger στις 3 περιοχές.

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi=E\psi \tag{1.6}$$

Για τις περιοχές I και III όπου V=0 η εξίσωση (1.6) γίνεται

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2}\psi=0 \tag{1.7}$$

Η εξίσωση (1.7) είναι η γνωστή εξίσωση του απλού αρμονικού ταλαντωτή που έχει γενική λύση την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi_{\mathrm{I}}(x)=A\exp(jkx)+B\exp(-jkx) \tag{1.8}$$

όπου $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$,και A,B μιγαδικές σταθερές.

Η κυματοσυνάρτηση (1.8) παριστάνει την υπέρθεση 2 επιπέδων κυμάτων, ενός που οδεύει προς τα αριστερά και ενός προς τα δεξιά, τα οποία αντιστοιχούν στην προσπίπτουσα και στην ανακλώμενη δέσμη σωματιδίων αντίστοιχα.

Να παρατηρήσουμε επίσης ότι το φάσμα ενεργειών του προβλήματος είναι συνεχές, δηλαδή η ενέργεια Ε μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή 0<Ε<∞.

Για την περιοχή III η λύση θα είναι ακριβώς η ίδια, ωστόσο επειδή θεωρούμε ότι το πρόβλημα της σκέδασης σχετίζεται με σωματίδια που εισέρχονται στο σκεδαστή μόνο από τη μία κατεύθυνση, το οδεύον κύμα προς τα αριστερά για την περιοχή III δεν έχει κάποιο νόημα, συνεπώς

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = F\exp(jkx) \tag{1.9}$$

Τέλος, για την περιοχή II η εξίσωση γίνεται

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}}{dx^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{II}} = 0 \tag{1.10}$$

Η παραπάνω εξίσωση (1.10) μοιάζει πολύ με τη (1.7) με τη διαφορά ότι η ποσότητα $\dfrac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ μπορεί να είναι και αρνητική ανάλογα με το *E*. Αν είναι, τότε η λύση της εξίσωσης αλλάζει σημαντικά, κι από οδεύον κύμα γίνεται εκθετικά μειούμενη.

Περίπτωση 1: $E<V_0$

Αρχικά παίρνουμε την περίπτωση κατά την οποία $E<V_0$, η οποία είναι και η ενδιαφέρουσα, καθώς εμφανίζεται στην ουσία το φαινόμενο σήραγγας. Δηλαδή το σωματίδιο κλασσικά δεν θα μπορούσε να βρεθεί στις περιοχές II ή III. Στην περίπτωση αυτή η λύση της εξίσωσης (1.10) είναι:

$$\psi_{\mathrm{II}} = C\exp(-ax) + D\exp(ax) \tag{1.11}$$

όπου $a = \dfrac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ είναι θετική σταθερά, και C,D σταθερές ολοκλήρωσης.

Τώρα που έχει βρεθεί η μορφή της κυματοσυνάρτησης για όλες τις περιοχές, δεν μένει παρά να εφαρμοστούν οι συνοριακές συνθήκες, και να υπολογιστούν οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης. Οι συνοριακές συνθήκες πρέπει να ικανοποιούν την απαίτηση για συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και της πρώτης παραγώγου της. Πρέπει λοιπόν:

$$
\begin{aligned}
&\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C + D \\
&\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \Rightarrow C\exp(-aL) + D\exp(aL) = F\exp(jkL) \\
&\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) \Rightarrow jk(A - B) = a(D - C) \\
&\psi_{II}'(L) = \psi_{III}'(L) \Rightarrow a(D\exp(aL) - C\exp(-aL)) = jkF\exp(jkL)
\end{aligned}
\tag{1.12}
$$

Από τις εξισώσεις (1.12) δεν μπορούμε να εξάγουμε τιμή για τις σταθερές A,B,C,D,F, καθώς έχουμε 4 εξισώσεις και 5 αγνώστους, ωστόσο μπορούμε να υπολογίσουμε συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης. Ο συντελεστής ανάκλασης θα είναι $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ και ο συντελεστής διέλευσης θα είναι $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$, μιας και οι κυματαριθμοί είναι ίδιοι σε όλες τις περιοχές, βάσει των (1.4) και (1.5).

Επιλύοντας το σύστημα των εξισώσεων (1.12) καταλήγουμε στις εκφράσεις

$$
R = \frac{V_0^{\,2} \sinh^2 aL}{V_0^{\,2} \sinh^2 aL + 4E(V_0 - E)} \tag{1.13}
$$

$$
T = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^{\,2} \sinh^2 aL + 4E(V_0 - E)} \tag{1.14}
$$

Οι παραπάνω εκφράσεις δείχνουν την ύπαρξη φαινομένου σήραγγας, καθώς ο συντελεστής διέλευσης δεν μηδενίζεται στην περίπτωση κατά την οποία $E<V_0$. Για την περίπτωση κατά την οποία το φράγμα είναι αρκετά μακρύ, και ισχύει $aL >> 1$ ισχύει $\sinh aL \approx \exp(aL) >> 1$ άρα

$$
T \approx \frac{V_0^{\,2}}{4E(V_0 - E)} \exp(-2aL)
$$

Περίπτωση II: $E>V_0$

Στην περίπτωση αυτή, η κυματοσυνάρτηση δεν φθίνει μέσα στο φράγμα, και ο συντελεστής διέλευσης γίνεται πολύ μεγαλύτερος, ενώ δεν έχουμε επί της ουσίας φαινόμενο σήραγγας μιας και η ύπαρξη σωματιδίου δεξιά από το φράγμα προβλέπεται και με βάση την κλασσική μηχανική.

Στην περιοχή II, η λύση της εξίσωσης Schrödinger θα είναι και πάλι επίπεδο κύμα, μιας και ο συντελεστής της εξίσωσης ταλαντωτή (1.10) είναι και πάλι θετικός. Συνεπώς η λύση θα είναι

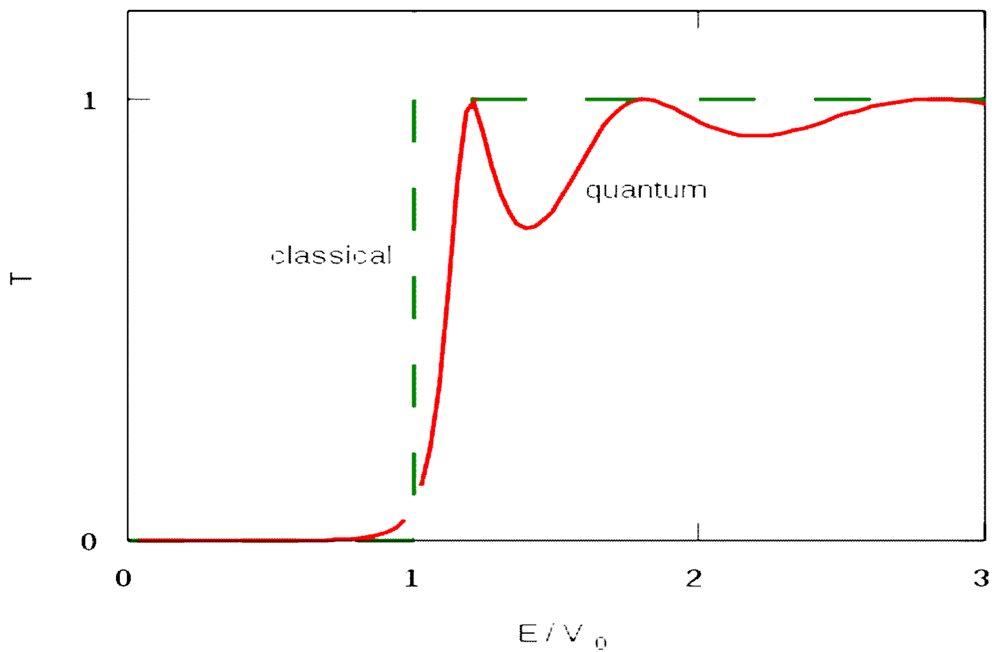
$$\psi_{\mathrm{II}} = C\exp(-jk'x) + D\exp(jk'x) \tag{1.15}$$

όπου $k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ και C,D σταθερές ολοκλήρωσης. Εφαρμόζοντας ακριβώς την ίδια διαδικασία με την περίπτωση I, λαμβάνοντας τις συνοριακές συνθήκες και επιλύοντας το σύστημα, μπορούμε και σε αυτήν την περίπτωση να υπολογίσουμε τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης. Καταλήγουμε στις εξής εκφράσεις:

$$R = \frac{V_0^{\ 2}\sin^2 k'L}{V_0^{\ 2}\sin^2 k'L + 4E(E-V_0)} \tag{1.16}$$

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{V_0^{\ 2}\sin^2 k'L + 4E(E-V_0)} \tag{1.17}$$

Συγκεντρώνοντας και τις 2 περιπτώσεις σε ένα διάγραμμα βλέπουμε στο σχήμα 2 την εξάρτηση του συντελεστή διέλευσης από την ενέργεια για δεδομένο φράγμα δυναμικού. Βλέπουμε επίσης τη διακεκομμένη καμπύλη που δίνει το συντελεστή διέλευσης που προβλέπει η κλασσική μηχανική.



Σχήμα 1.2 *Ο συντελεστής διέλευσης συναρτήσει της ενέργειας για φράγμα δυναμικού με* $\sqrt{2mV_0}L/\hbar = 7$.

1.3. Η προσέγγιση “Wentzel-Kramers-Brillouin” (WKB) για μονοδιάστατα προβλήματα.

Η μέθοδος WKB 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 μέθοδος οφείλει το όνομά της στους επιστήμονες που την ανακάλυψαν το 1926, ενώ αναφέρεται συχνά και JWKB, (το J για τον Jeffreys) αναγνωρίζοντας την προσφορά του μαθηματικού Harold Jeffreys που είχε αναπτύξει τη μέθοδο για προβλήματα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων $2^{ης}$ τάξης από το 1923.

Η μέθοδος μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιαδήποτε γραμμική διαφορική εξίσωση στην οποία ο μεγιστοβάθμιος όρος πολλαπλασιάζεται με μια μικρή ποσότητα $\varepsilon \ll 1$. Εδώ θα ασχοληθούμε με εξισώσεις $2^{ου}$ βαθμού στην κατηγορία των οποίων είναι και η εξίσωση Schrödinger που μας ενδιαφέρει. Έστω η γενικού τύπου εξίσωση

$$\varepsilon^2 \psi'' + q(x)\psi = 0. \tag{1.18}$$

Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger (1.6) εντάσσεται στην παραπάνω μορφή (1.18) με $\frac{\hbar^2}{2mE} = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2 = \varepsilon^2$ (όπου E η ενέργεια του σωματιδίου, και λ το αντίστοιχο μήκος κύματος De Broglie) και $q(x) = 1 - \frac{V(x)}{\mathrm{E}} = n^2(x)$. 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 WKB 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 $\frac{1}{l} \approx \left|\frac{1}{n}\frac{dn}{dx}\right|$, θα πρέπει $\lambda \ll l$.

Η λύση του προβλήματος περιλαμβάνει 2 περιπτώσεις, ή αντίστοιχα 2 περιοχές: την περιοχή για την οποία $q(x) > 0 \Leftrightarrow E > V(x)$ που ονομάζεται και κλασσική περιοχή καθώς είναι περιοχή για την οποία το σωματίδιο θα μπορούσε να βρίσκεται και με βάση την κλασσική μηχανική, και την απαγορευμένη (κλασσικά) 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:

$$\varepsilon^2\psi'' + n^2(x)\psi = 0 \tag{1.19}$$

Στην παραπάνω εξίσωση, αν η συνάρτηση $n^2(x)$ ήταν σταθερά $n^2(x) = n_0$ τότε η λύση της (1.19) θα ήταν ο αρμονικός ταλαντωτής της μορφής $\exp(\pm jn_0 x/\varepsilon)$, γεγονός που μας κάνει να προτείνουμε την εξής αλλαγή μεταβλητής:

$$\psi = \exp\left(\frac{ju(x)}{\varepsilon}\right) \tag{1.20}$$

Αντικαθιστούμε την (1.20) στην (1.19) παίρνουμε την εξής εξίσωση:

$$j\varepsilon u'' - (u')^2 + n^2(x) = 0 \tag{1.21}$$

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

$$j\varepsilon v' - v^2 + n^2(x) = 0 \tag{1.22}$$

Για να συνεχίσουμε τους υπολογισμούς τώρα, θα αναπτύξουμε τη συνάρτηση $v(x)$ σε σειρά με βάση την αδιάστατη παράμετρο $\frac{\varepsilon}{l} << 1$

$$v = v_0 + \frac{\varepsilon}{l}v_1 + \left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2 v_2 + \ldots. \tag{1.23}$$

Αντικαθιστούμε το ανάπτυγμα (1.23) στην εξίσωση (1.22) και λαμβάνουμε

$$\varepsilon j\left(v_0 + \frac{\varepsilon}{l}v_1 + \left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2 v_2 + \ldots\right)' - \left(v_0 + \frac{\varepsilon}{l}v_1 + \left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2 v_2 + \ldots\right)^2 + n^2(x) = 0$$

.(1.24)

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

$$O(1): {v_0}^2 - n^2(x) = 0 \Rightarrow v_0 = \pm n(x)$$

$$O\left(\frac{\varepsilon}{l}\right): 2v_0 v_1 = -l v_0' \Rightarrow v_1 = -l\frac{n'(x)}{2n(x)} \tag{1.25}$$

Συνεπώς το v έχει το ανάπτυγμα:

$$v = \pm n(x) - \varepsilon\frac{n'(x)}{2n(x)} + O\left(\left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2\right). \tag{1.26}$$

Για να βρούμε την ολική κυματοσυνάρτηση ολοκληρώνουμε την εξίσωση (1.26) και καταλήγουμε:

$$u(x) = C \pm \int n(x)dx - \frac{\varepsilon}{2}\ln\left(n(x)\right) + O\left(\left(\frac{\varepsilon}{l}\right)^2\right) \qquad (1.27)$$

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

$$\psi = \exp\left(\frac{ju(x)}{\varepsilon}\right) = \frac{C}{\sqrt{n(x)}}\exp\left(\pm j\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right). \qquad (1.28)$$

Στην παραπάνω εξίσωση έχουμε 2 γραμμικώς ανεξάρτητες προσεγγιστικές (WKB) λύσεις της (1.19), συνεπώς η γενική λύση θα είναι ο οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός τους:

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{n(x)}}\left[c_1\exp\left(\frac{j}{\varepsilon}\int n(x)dx\right) + c_2\exp\left(-\frac{j}{\varepsilon}\int n(x)dx\right)\right] \qquad (1.29)$$

Οι παραπάνω κυματοσυναρτήσεις δεν είναι τίποτα άλλο από 2 επίπεδα κύματα, διαμορφωμένα κατά πλάτος και κυματαριθμό από με βάση τη μεταβολή της ποσότητας $n(x) = \sqrt{1 - \frac{V(x)}{E}}$.

2η περίπτωση: $q(x) < 0 \Leftrightarrow E < V(x)$

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

$$\varepsilon^2\psi'' - n^2(x)\psi = 0 \qquad (1.30)$$

Στην παραπάνω εξίσωση (1.30), αν η συνάρτηση $n^2(x)$ ήταν σταθερά $n^2(x) = n_0^2$ τότε η λύση της θα ήταν εκθετική της μορφής $\exp(\pm n_0 x/\varepsilon)$, γεγονός που μας οδηγεί να προτείνουμε την εξής αλλαγή μεταβλητής:

$$\psi = \exp\left(\frac{u(x)}{\varepsilon}\right) \qquad (1.31)$$

Αναλύοντας με παρόμοιο τρόπο με την περίπτωση 1, καταλήγουμε στην εξής προσέγγιση:

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{n(x)}}\left[c_1\exp\left(\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right) + c_2\exp\left(-\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right)\right] \qquad (1.32)$$

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 πως εφαρμόζεται η προσεγγιστική μέθοδος WKB σε προβλήματα σκέδασης. Θεωρούμε ένα τυχαίο δυναμικό *V(x)* και σωματίδιο ενέργειας *E* το οποίο κινείται στο δυναμικό αυτό, όπως στο *σχήμα 1.3*. Έστω ότι $V(x)<E$ για όλη την περιοχή, εκτός από ένα πεπερασμένο μέρος μεταξύ των 2 που καλούνται σημεία καμπής (turning points), έστω των $x=x_0$ και $x=x_1$, στο οποίο 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 WKB, η κυματοσυνάρτηση στην περιοχή I θα είναι:

$$\psi_I(x)=\frac{1}{\sqrt{n(x)}}\left[A\exp\left(j\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right)+B\exp\left(-j\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right)\right] \tag{1.33}$$

όπου θυμίζουμε ότι $\varepsilon=\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\mathrm{E}}}$ και $n(x)=\sqrt{\left|1-\frac{V(x)}{\mathrm{E}}\right|}$.

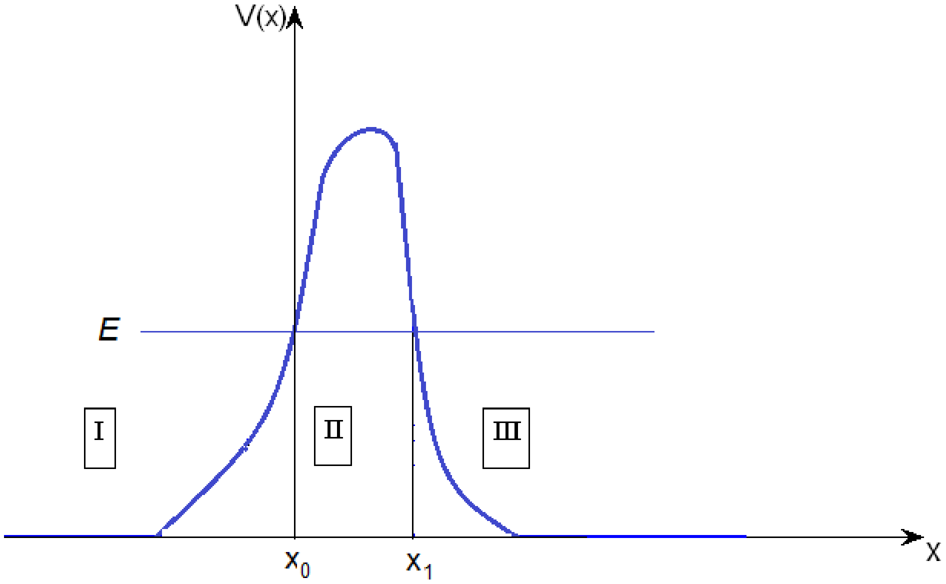
Στην περιοχή II θα είναι:

$$\psi_{II}(x)=\frac{1}{\sqrt{n(x)}}\left[C\exp\left(\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right)+D\exp\left(-\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right)\right] \tag{1.34}$$

και στην περιοχή III:

$$\psi_{III}(x)=\frac{F}{\sqrt{n(x)}}\exp\left(j\frac{1}{\varepsilon}\int n(x)dx\right) \tag{1.35}$$

μιας και ο όρος με το '-' στο εκθετικό παριστάνει κύμα οδεύον προς τα αριστερά το οποίο δεν έχει φυσική σημασία για την περιοχή III.



Σχήμα 1.3: *Τυχαίο φράγμα δυναμικού, η κλασσική περιοχή 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 WKB δεν αποτελεί καλή προσέγγιση στην περιοχή των σημείων καμπής, καθώς ο όρος $Q(x)$ στην εξίσωση (1.18) πλησιάζει στο 0 και το ανάπτυγμα (1.23) δεν συγκλίνει γρήγορα. Στα σημεία αυτά πρέπει να ληφθούν ειδικές προσεγγίσεις που ονομάζονται «συνδετικές σχέσεις» (connecting formulas) οι οποίες είναι αρκετά περίπλοκες, δεν θα αναπτυχθούν εδώ. Μπορούν να βρεθούν στη βιβλιογραφία[5].

Ωστόσο το αποτέλεσμα το οποίο δίνουν είναι το διαισθητικά αναμενόμενο δεδομένων των σχέσεων (1.33-1.35). Βλέπουμε ότι η κυματοσυνάρτηση είναι εκθετικά φθίνουσα μέσα στο φράγμα, όπου λαμβάνει χώρα το επί της ουσίας φαινόμενο σήραγγας. Ο συντελεστής διέλευσης έχει να κάνει άμεσα με τη σχέση που έχει η κυματοσυνάρτηση στην είσοδο και στην έξοδο του φράγματος, και αν το φράγμα είναι αρκετά μακρύ, ο εκθετικά αύξων όρος δεν μπορεί να είναι σημαντικός. Συνεπώς είναι αναμενόμενο ο συντελεστής διέλευσης να είναι εκθετικά φθίνων, έχοντας στον εκθέτη ολοκλήρωμα όπως στην (1.34). Πράγματι, κάτι τέτοιο επιβεβαιώνεται από τη σχέση για το συντελεστή διέλευσης που προκύπτει από την ανάλυση των «συνδετικών σχέσεων», και είναι:

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\varepsilon} \int_{x_0}^{x_1} n(x) dx \right). \tag{1.36}$$

1.4. Η προσέγγιση "Wentzel-Kramers-Brillouin" (WKB) για τρισδιάστατα προβλήματα.

Η προσεγγιστική μέθοδος WKB που αναπτύχθηκε στην προηγούμενη ενότητα μπορεί να επεκταθεί έτσι ώστε να προσεγγίσει και τρισδιάστατα προβλήματα. Η βασική αρχή είναι ακριβώς η ίδια, δηλαδή η αργή μεταβολή του δείκτη διάθλασης σε σχέση με το μήκος κύματος.

Στις 3 διαστάσεις η εξίσωση του Schrodinger παίρνει την μορφή:

$$\varepsilon^2\nabla^2\psi + n^2(\vec{r})\psi = 0 \tag{1.37}$$

ακριβώς αντίστοιχα με την (1.19). Η προσέγγιση που θα ακολουθήσουμε είναι εντελώς παρόμοια με αυτή της προηγούμενης ενότητας. Και πάλι θεωρούμε ότι ο δείκτης διάθλασης $n(\vec{r})$ μεταβάλλεται αργά σε σχέση με το μήκος κύματος De Broglie, δηλαδή την ποσότητα ε στην (1.37). Αντικαθιστούμε και πάλι όπως στην (1.20):

$$\psi(\vec{r}) = \exp\left(\frac{ju(\vec{r})}{\varepsilon}\right) \tag{1.38}$$

και καταλήγουμε στην αντίστοιχη με την (1.21) εξίσωση:

$$j\varepsilon\nabla^2 u - (\nabla u)^2 + n^2(\vec{r}) = 0 \tag{1.39}$$

Θα αναπτύξουμε τώρα ακριβώς παρόμοια με τη μονοδιάστατη περίπτωση σε σειρά, αλλά λόγω δυσκολίας των υπολογισμών σε 3 διαστάσεις θα κρατήσουμε μόνο τον όρο μηδενικής τάξης, κάτι που αντιστοιχεί σε παράλειψη του όρου δεύτερης παραγώγου στην (1.39), και καταλήγουμε στην εξίσωση

$$(\nabla u)^2 = n^2(\vec{r}). \tag{1.40}$$

Το πρόβλημα που προκύπτει τώρα, είναι ότι η (1.40) είναι τρισδιάστατη και δεν μπορεί να επιλυθεί με μία απλή ολοκλήρωση. Ωστόσο η (1.40) είναι εντελώς παρόμοια με τη σχέση για τη χαρακτηριστική συνάρτηση *W*, στη θεωρία Hamilton-Jacobi της κλασσικής μηχανικής. Βέβαια η εξίσωση Hamilton-Jacobi δεν έχει νόημα στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή όπου $n^2<0$, αλλά στην κβαντομηχανική μπορεί να βρεθεί μιγαδική λύση για το πρόβλημα και στην απαγορευμένη περιοχή.

Η λύση της (1.40) είναι:

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r}_0) + \int_{\vec{r}_0(C)}^{\vec{r}} n(\vec{r}\,')d\vec{r}\,' \tag{1.41}$$

όπου το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα υπολογίζεται πάνω στην καμπύλη μέγιστης κλίσης (steepest gradient) του *u*, η οποία έστω ότι έχει παραμετρική αναπαράσταση $\vec{r}(t)$. Η καμπύλη αυτή στην επιτρεπόμενη περιοχή όπου $E>V$, είναι η κλασσική τροχιά του σωματιδίου, με βάση το νόμο του Newton:

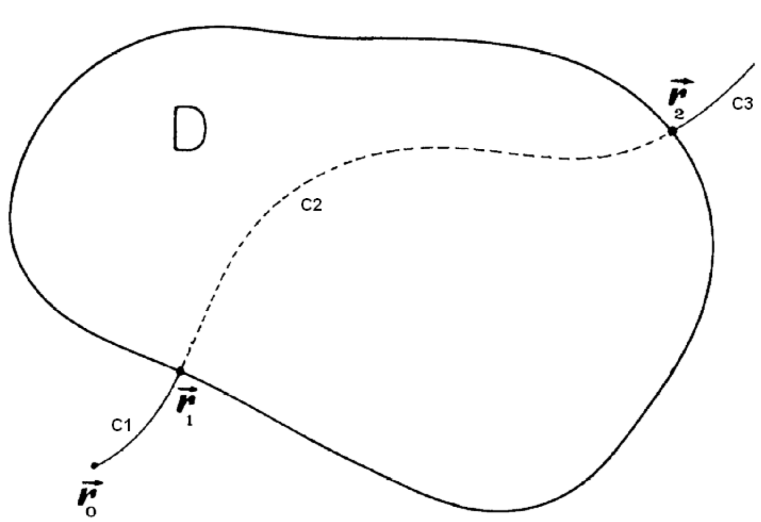
$$\left(\frac{d\vec{r}}{dt}\right)^2 = \frac{2}{m}\left(E - V(\vec{r})\right) \tag{1.42}$$

Η ιδέα αυτή θα επεκταθεί έτσι ώστε να βρεθεί η αντίστοιχη καμπύλη και στην απαγορευμένη περιοχή όπου $E<V$.

Έστω D η περιοχή του χώρου στην οποία $E<V$. Στο σύνορο της περιοχής αυτής ισχύει $E=V$. Οι κλασσικές τροχιές που αποτελούν λύσεις της (1.42), φθάνουν κάθετα στην απαγορευμένη περιοχή, μιας και εκεί η ταχύτητα μηδενίζεται, και είναι οριακά παράλληλη στη δύναμη. Για να βρούμε τη συνέχεια της τροχιάς μέγιστης κλίσης και εντός της απαγορευμένης περιοχής, μπορούμε να μεταβάλλουμε τη χρονική παράμετρο στο φανταστικό άξονα: $t=j\tau$. Η εξίσωση που παίρνουμε είναι:

$$\left(\frac{d\vec{r}}{d\tau}\right)^2 = \frac{2}{m}\left(V(\vec{r}) - E\right). \tag{1.43}$$

Η παραπάνω εξίσωση (1.43) δεν είναι τίποτα άλλο από την εξίσωση κίνησης ενός σωματιδίου που κινείται σε δυναμικό $-V(\vec{r})$ με ολική ενέργεια $-E$. Δηλαδή για να βρούμε την καμπύλη στην οποία πρέπει να γίνει η ολοκλήρωση (1.41) εντός της απαγορευμένης περιοχής, πρέπει το φράγμα της απαγορευμένης περιοχής να μετατραπεί σε πηγάδι, και στη συνέχεια να υπολογιστεί η κλασσική τροχιά ενός σωματιδίου στο πηγάδι αυτό.



Σχήμα 1.4[6] *Η απαγορευμένη περιοχή, το μονοπάτι ολοκλήρωσης και τα αντίστοιχα σημεία. r_1 και r_2 είναι τα σημεία εισόδου και εξόδου αντίστοιχα στην απαγορευμένη περιοχή, ενώ $C_{1,2,3}$ είναι τα τμήματα της τροχιάς πριν, εντός και μετά την απαγορευμένη περιοχή αντίστοιχα.*

Έστω μια τροχιά που ξεκινά από ένα σημείο $\vec{r}_0$ το οποίο βρίσκεται εκτός της απαγορευμένης περιοχής D και καθορίζεται με βάση την εξίσωση (1.42). Έστω ότι αυτή η καμπύλη συναντά (κάθετα) το σύνορο της απαγορευμένης περιοχής στο σημείο $\vec{r}_1$ (βλέπε *σχήμα 1.3*). Τότε η τροχιά αυτή συνεχίζεται και εντός της απαγορευμένης περιοχής με βάση την (1.43), αν η μεταβολή της χρονικής παραμέτρου συνεχιστεί στον φανταστικό άξονα. Η καμπύλη θα συναντήσει το σύνορο της απαγορευμένης περιοχής ξανά σε ένα σημείο $\vec{r}_2$. Τέλος, αν μεταβάλλουμε και πάλι το χρόνο στον πραγματικό άξονα η τροχιά θα εξαχθεί στην άλλη μεριά της απαγορευμένης περιοχής βάσει της (1.42). Αν θέλουμε συνεπώς να βρούμε την τιμή $u(\vec{r})$ σε ένα σημείο της τροχιάς που βρίσκεται στην περιοχή μετά το $\vec{r}_2$, θα έχουμε

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r}_0) + \int_{\vec{r}_0(C_1)}^{\vec{r}_1} n(\vec{r}')d\vec{r}' + \int_{\vec{r}_1(C_2)}^{\vec{r}_2} n(\vec{r}')d\vec{r}' + \int_{\vec{r}_2(C_3)}^{\vec{r}} n(\vec{r}')d\vec{r}'$$

Ωστόσο στην απαγορευμένη περιοχή, ο δείκτης διάθλασης *n* παίρνει μιγαδικές τιμές, οπότε, η *u* μπορεί να γραφεί τελικά:

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r}_0) + \int_{\vec{r}_0(C_1)}^{\vec{r}_1} \sqrt{1-\frac{V}{E}}d\vec{r}' + j\int_{\vec{r}_1(C_2)}^{\vec{r}_2} \sqrt{\frac{V}{E}-1}d\vec{r}' + \int_{\vec{r}_2(C_3)}^{\vec{r}} \sqrt{1-\frac{V}{E}}d\vec{r}' \quad (1.43)$$

Αντικαθιστώντας τώρα την (1.43) στην (1.38) παίρνουμε την τελική μορφή της κυματοσυνάρτησης:

$$\psi(\vec{r}) = \mathrm{A}_0 \exp\left[\frac{j}{\varepsilon}\left(\int_{\vec{r}_0(C_1)}^{\vec{r}_1} \sqrt{1-\frac{V}{E}}d\vec{r}' + j\int_{\vec{r}_1(C_2)}^{\vec{r}_2} \sqrt{\frac{V}{E}-1}d\vec{r}' + \int_{\vec{r}_2(C_3)}^{\vec{r}} \sqrt{1-\frac{V}{E}}d\vec{r}'\right)\right] \quad (1.44)$$

Αν αντίστοιχα το σημείο $\vec{r}$ βρίσκεται σε σημείο της τροχιάς πριν το $\vec{r}_1$, τότε η μορφή θα είναι η ίδια αλλά προφανώς θα περιλαμβάνει μόνο τον πρώτο όρο ολοκλήρωσης.

Ας υπολογίσουμε τώρα το ρεύμα πιθανότητας που δίνει η προσέγγιση WKB και στη συνέχεια το συντελεστή διέλευσης μέσα από το φράγμα δυναμικού.

Ας θεωρήσουμε μία τροχιά ακριβώς όπως πριν, η οποία χωρίζεται σε 3 περιοχές: (1) πριν τη συνάντηση της απαγορευμένης περιοχής, (2) εντός της απαγορευμένης περιοχής, (3) αφού εξέλθει από την απαγορευμένη περιοχή. Το ρεύμα πιθανότητας βάσει της σχέσης (1.3) υπολογίζεται μέσω της κυματοσυνάρτησης (1.44):

$$\vec{J}_1(\vec{r}) = \left[\frac{2}{m}\left(E - V(\vec{r})\right)\right]^{1/2} \hat{t}(\vec{r}) \quad (1.45)$$

για την περιοχή (1) και

$$\vec{J}_3(\vec{r}) = \left[\frac{2}{m}\big(E - V(\vec{r})\big)\right]^{1/2} \exp\big(-T_{12}\big)\hat{t}(\vec{r}) \qquad (1.46)$$

$$T_{12} = \frac{2}{\hbar}\int_{\vec{r}_1(C_2)}^{\vec{r}_2} \sqrt{2m(V(\vec{r}) - E)}\,d\vec{r} \qquad (1.47)$$

για την περιοχή 3. Το μοναδιαίο διάνυσμα $\hat{t}(\vec{r})$ είναι εφαπτομενικό στην τροχιά ολοκλήρωσης. Για να υπολογίσουμε το συντελεστή διέλευσης, μέσα από το φράγμα, δεν μένει παρά να υπολογίσουμε το λόγο των ρευμάτων στα σημεία εισόδου και εξόδου $\vec{r}_1$ $\vec{r}_2$ αντίστοιχα. Βλέπουμε ότι οι εκφράσεις για το ρεύμα μηδενίζονται στα σημεία αυτά, και για να βρούμε το λόγο τους στο όριο εφαρμόζουμε κανόνα L' Hospital. Τελικά παίρνουμε την τελική έκφραση για το συντελεστή διέλευσης:

$$\mathrm{T} = \sqrt{\frac{\left|\nabla V\right|_{\vec{r}=\vec{r}_2}}{\left|\nabla V\right|_{\vec{r}=\vec{r}_1}}} \exp(-T_{12}) \,. \qquad (1.48)$$

Συνοψίζοντας, για να υπολογίσουμε το συντελεστή διέλευσης βάσει της μεθόδου WKB από ένα φράγμα δυναμικού, για ένα δεδομένο σημείο εισόδου στην απαγορευμένη περιοχή, δεν έχουμε παρά να υπολογίσουμε την καμπύλη ολοκλήρωσης εντός της απαγορευμένης περιοχής (path) βάσει της (1.43), και στη συνέχεια να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα (1.47) και την έκφραση (1.48). Η κατεύθυνση εξόδου της τροχιάς από την απαγορευμένη περιοχή, μας δίνει και την κατεύθυνση του ρεύματος στο σημείο αυτό. Γενικότερα η κατεύθυνση της τροχιάς ολοκλήρωσης σε οποιοδήποτε σημείο εκτός της απαγορευμένης περιοχής είναι παράλληλο στο ρεύμα. Αυτός είναι και ο λόγος που πολλές φορές η τροχιά ολοκλήρωσης αναφέρεται και ως ηλεκτρονικό μονοπάτι (electron path).

Κεφάλαιο 2:
Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων: η κλασσική θεωρία Fowler-Nordheim και τρισδιάστατες προεκτάσεις της.

2.1. Γενικά

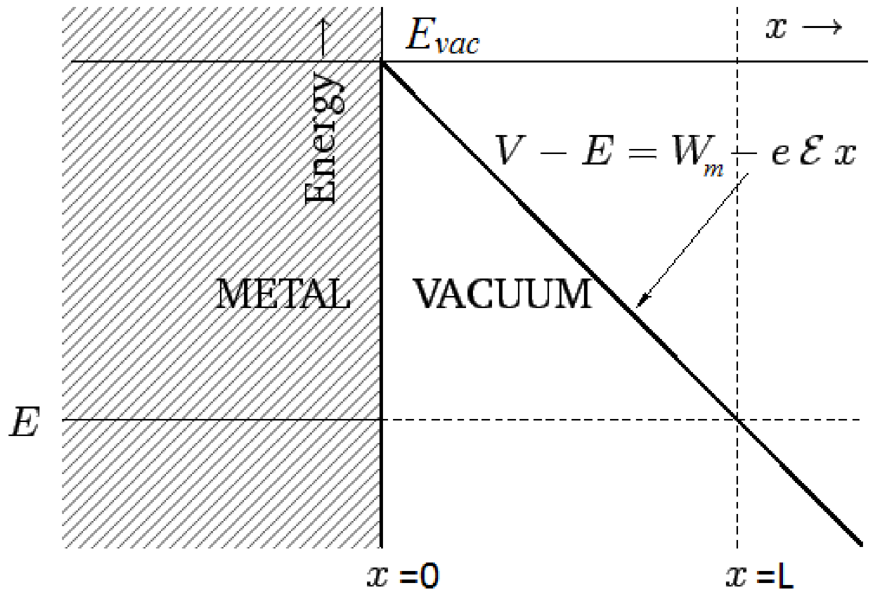
Μία από τις βασικότερες εφαρμογές του φαινομένου σήραγγας που αναπτύχθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, αποτελεί η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από μέταλλα.

Στο εσωτερικό ενός μετάλλου, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας βρίσκονται σε ένα «πηγάδι» δυναμικού το οποίο τα συγκρατεί στο εσωτερικό του μετάλλου. Δηλαδή η μέγιστη ενεργειακή στάθμη στην οποία βρίσκονται σε θερμοκρασία T=0K (ενεργειακή στάθμη Fermi) βρίσκεται κατά μία ενεργειακή ποσότητα W_m χαμηλότερα της ενεργειακής στάθμης του κενού E_{vac}. Η διαφορά ενέργειας αυτή W_m ονομάζεται φράγμα δυναμικού (work function).

Για να εξαχθούν ηλεκτρόνια από το μέταλλο, πρέπει με κάποιο τρόπο να ξεπεραστεί αυτό το φράγμα δυναμικού. Ο πιο κλασσικός τρόπος είναι να θερμανθεί το μέταλλο, έτσι ώστε να βρεθούν ηλεκτρόνια και σε υψηλότερες στάθμες από την στάθμη Fermi, και να ξεπεράσουν έτσι το φράγμα. Αυτή η μέθοδος εφαρμόζεται στις κλασσικές λυχνίες κενού. Ο άλλος τρόπος είναι η πεδιακή εκπομπή, κατά την οποία εφαρμόζεται ένα πολύ ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο γύρω από το μέταλλο, και τα ηλεκτρόνια εξάγονται από αυτό μέσω φαινομένου σήραγγας.

Έστω ότι το μέταλλο από το οποίο θέλουμε να εξάγουμε ηλεκτρόνια γίνεται εξαιρετικά αρνητικό σε σχέση με το περιβάλλον του, δηλαδή γύρω από αυτό εφαρμόζεται ένα ηλεκτρικό πεδίο $\mathcal{E}$, έστω σταθερό όσο απομακρυνόμαστε από το μέταλλο. Θεωρώντας ότι το πρόβλημα είναι μονοδιάστατο και ότι ο άξονας x είναι κάθετος στη διαχωριστική επιφάνεια μετάλλου-κενού που βρίσκεται στο σημείο $x=0$, βλέπουμε στο σχήμα 2.1 πώς γίνεται το ενεργειακό διάγραμμα των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας του μετάλλου. Το δυναμικό είναι:

$$V(x) = 0, x < 0$$
$$V(x) = E_{vac} - e\mathcal{E}x, x \geq 0 \tag{2.1}$$



Σχήμα 2.1: *Ενεργειακό διάγραμμα των ηλεκτρονίων πεδιακής εκπομής*

Ένα ηλεκτρόνιο με ενέργεια $E<E_{vac}$ «βλέπει» ένα τριγωνικό φράγμα δυναμικού που εκτείνεται σε μήκος

$$L = \frac{E_{vac} - E}{e\mathcal{E}} = \frac{W_m}{e\mathcal{E}} \tag{2.2}$$

όπως ακριβώς φαίνεται και στο σχήμα.

Επειδή ακριβώς το φράγμα τώρα έχει γίνει πεπερασμένου μήκους, βάσει του φαινομένου σήραγγας υπάρχει μία πιθανότητα ένα ηλεκτρόνιο να διεισδύσει στο φράγμα και να βρεθεί έξω από το μέταλλο. Η πιθανότητα αυτή προσεγγίζεται βάσει της μεθόδου WKB που αναπτύχθηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο:

$$T = \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^L \sqrt{V(x) - E}\,dx \right) \tag{2.3}$$

Αντικαθιστώντας το $V(x)$ από τη (2.1) παίρνουμε:

$$T = \exp\left(-\frac{2\sqrt{2me\mathcal{E}}}{\hbar} \int_0^L \sqrt{L - x}\,dx \right) \tag{2.4}$$

Το ολοκλήρωμα (2.4) μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά, δίνοντας την τελική έκφραση για το συντελεστή διέλευσης:

$$T = \exp\left(-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{W_m^{3/2}}{e\mathcal{E}} \right). \tag{2.5}$$

Το πεδίο που απαιτείται για να είναι ο συντελεστής διέλευσης αρκετός ώστε να δώσει ουσιαστικό ρεύμα εκπομπής, είναι τεράστιο: της τάξης του V/nm. Πράγματι, αν βάλουμε τιμές στην εξίσωση (2.5), για ένα μέταλλο με W_m=4eV, βρίσκουμε ότι

$$\mathcal{E}_0 = \frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{W_m^{3/2}}{e} \cong 55V/nm \quad (2.6)$$

Όπου $\mathcal{E}_0$ είναι καθορίζει την χαρακτηριστική ένταση πεδίου του συστήματος βάσει της σχέσης:

$$T = \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right). \quad (2.7)$$

Είναι προφανές ότι για να έχουμε μη αμελητέο συντελεστή διέλευσης, θα πρέπει ο λόγος $\mathcal{E}_0/\mathcal{E}$ θα πρέπει να είναι τουλάχιστον μικρότερος από 50 ($\exp(-50)=10^{-20}$). Δεδομένης της (2.6) βλέπουμε ότι πράγματι η ένταση του πεδίου θα πρέπει να είναι της τάξης μεγέθους του V/nm για να έχουμε μη αμελητέο συντελεστή διέλευσης και συνεπώς αμελητέα πεδιακή εκπομπή.

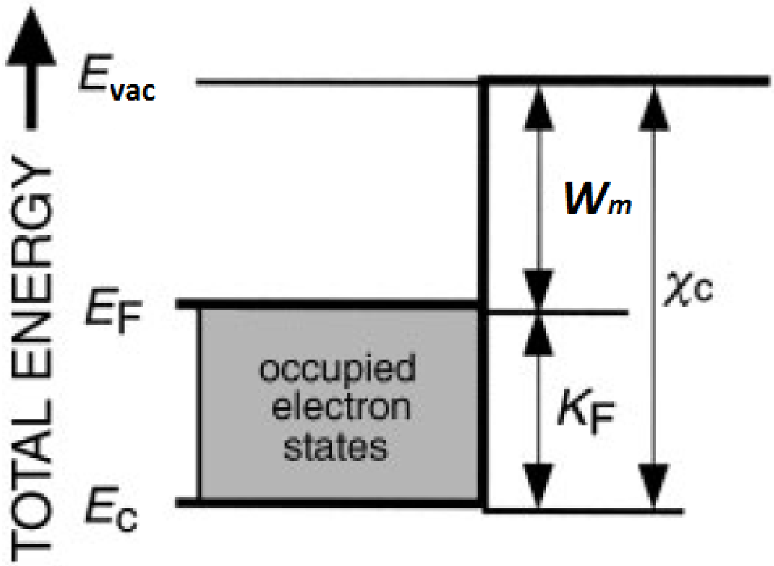
Τέτοιας τάξης μεγέθους εντάσεις πεδίου είναι αδύνατον να παραχθούν από απλούς πυκνωτές. Ωστόσο μπορούν να δημιουργηθούν τοπικά αν η εκπέμπουσα κάθοδος μετατραπεί σε εξαιρετικά μυτερή ακίδα. Σε αυτήν την περίπτωση το πεδίο ενισχύεται τοπικά κατά ένα παράγοντα που σχετίζεται με την αιχμηρότητα της ακίδας (λόγος ύψους προς πάχος). Σήμερα μπορούν να κατασκευαστούν ακίδες που έχουν ακτίνα πάχος της τάξης των nm και ύψος 1000 φορές μεγαλύτερο. Τοπικά λοιπόν, μπορούμε να πάρουμε τέτοιας τάξης μεγέθους πεδία και να πετύχουμε σημαντικά μεγάλους συντελεστές διέλευσης (της τάξης του 10^{-5}) οι οποίοι θα δώσουν σημαντική εκπομπή ηλεκτρονίων.

2.2. Ανάλυση πεδιακής εκπομπής σε 1 διάσταση: κλασσική θεωρία Fowler-Nordheim (F-N).

Η πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων έχει μελετηθεί αναλυτικά από πολύ παλιά (1928) όταν είχε αναπτυχθεί η κλασσική θεωρία Fowler-Nordheim[7] η οποία ανέλυε το φαινόμενο με βάση μονοδιάστατο μοντέλο, παρόμοιο με αυτό της παραγράφου 2.1. Το μονοδιάστατο γεωμετρικό μοντέλο αποτελεί καλή προσέγγιση όταν η διαχωριστική επιφάνεια είναι επίπεδη, οπότε δεν υπάρχει εξάρτηση από τους άξονες άλλων κατευθύνσεων. Για το λόγο αυτό η μονοδιάστατη θεωρία F-N καλείται και επίπεδη (planar).

Η θεωρία F-N χρησιμοποιεί απλές υποθέσεις για τη διάταξη εκπομπής, και καταλήγει σε εξισώσεις που συσχετίζουν την πυκνότητα ρεύματος εκπομπής με τις διάφορες παραμέτρους που σχετίζονται με τη διάταξη. Οι υποθέσεις που γίνονται είναι οι εξής: το μέταλλο έχει μία λεία και επίπεδη διαχωριστική επιφάνεια με ομογενές φράγμα δυναμικού W_m, υπάρχει ένα ομογενές εξωτερικό επιβαλλόμενο πεδίο F που κατευθύνεται προς τον εκπομπό, τα ηλεκτρόνια εντός του μετάλλου ακολουθούν το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων Sommerfeld και τη στατιστική Fermi-Dirac.

Στο σχήμα 2.2 βλέπουμε το ενεργειακό διάγραμμα των ηλεκτρονίων στο εσωτερικό του μετάλλου, μαζί με διάφορους συμβολισμούς ενεργειακών σταθμών και διαφορών. Σε θερμοκρασία T=0K τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν ενεργειακές καταστάσεις από τον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας (στάθμη E_c) μέχρι το επίπεδο Fermi (E_F). Η ενεργειακή στάθμη του κενού καλείται E_{vac}. Η ολική ενέργεια των ηλεκτρονίων καλείται E, και θεωρώντας ότι η δυναμική ενέργεια εντός του μετάλλου είναι στο επίπεδο E_c, η κινητική ενέργεια γράφεται $K=E-E_c=K_F+\varepsilon$ όπου $\varepsilon=E-E_F$ (μιας και τα ηλεκτρόνια θεωρούνται ελεύθερα πάνω από το ενεργειακό επίπεδο E_c).



Σχήμα 2.2[8]: *Το ενεργειακό διάγραμμα στο εσωτερικό του μετάλλου, και ο χρησιμοποιούμενος συμβολισμός.*

Η δυναμική ενέργεια που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια απεικονίζεται στο σχήμα 2.3. Το επίπεδο $x=0$ θεωρείται η διαχωριστική επιφάνεια του μετάλλου. Εντός του μετάλλου το δυναμικό θεωρείται σταθερό και ίσο με E_c. Εκτός του μετάλλου θεωρούμε ότι το δυναμικό αποτελεί το άθροισμα του εξωτερικού πεδίου, του εικονικού δυναμικού (image potential) και της στάθμης του κενού. Συνεπώς έχουμε αθροιστικά:

$$U=E_c \qquad ,x<0 \qquad (2.8)$$
$$= E_{vac}-eFx-B/x \qquad ,x\geq 0$$

όπου $B\equiv e^2/16\pi\varepsilon_0\approx 0.36eV\ nm$.

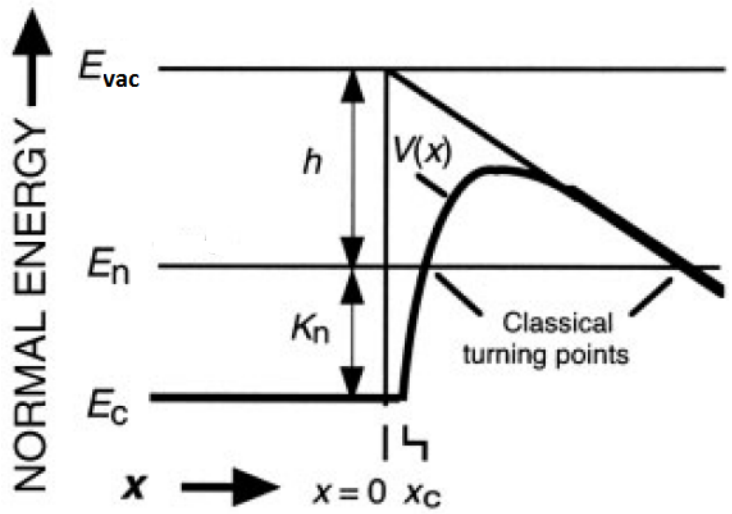
Επειδή ωστόσο το δυναμικό που περιγράφηκε, όταν το x τείνει στο 0 από δεξιά, πέφτει κάτω από την E_c για $x<x_c$, είναι εύκολο να αποφύγουμε αυτή την τεχνητή βύθιση θέτοντας $U=E_c$ για $0\leq x<x_c$, και καταλήγουμε στην τελική μορφή του δυναμικού που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια του μετάλλου:

$$U=E_c \qquad ,x<x_c \qquad (2.9)$$
$$= E_{vac}-eFx-B/x \qquad ,x\geq x_c$$

Η κινητική ενέργεια βάσει της οποίας τα ηλεκτρόνια περνούν μέσα από το φράγμα δυναμικού, δεν είναι η συνολική ενέργειά τους. Προφανώς, μόνο οι συνιστώσα της ορμής που είναι παράλληλη στον άξονα x, δηλαδή κάθετη στη διαχωριστική επιφάνεια «συνεισφέρει» στο φαινόμενο σήραγγας. Συνεπώς για την ανάλυση θα χρειαστεί η συνολική κινητική ενέργεια να αναλυθεί σε 2 συνιστώσες: την παράλληλη συνιστώσα $K_p=\hbar^2k_p^2/2m$, που σχετίζεται με την παράλληλη στην επιφάνεια ορμή $\hbar k_p$, και στην K_n που σχετίζεται με την κάθετη στην επιφάνεια ορμή. Προφανώς ισχύει $K_p+K_n=K=E-E_c$. Η ενεργειακή ποσότητα που χρησιμεύει στους υπολογισμούς είναι η κάθετη συνιστώσα της ολικής ενέργειας $E_n=E-K_p=E_{vac}-h$ όπου

$$h=W_m-\varepsilon+K_p \qquad (2.10)$$

Στο σχήμα 2.3, βλέπουμε εκτός από το δυναμικό, και τις παραπάνω ορισμένες ενεργειακές ποσότητες στο εσωτερικό του μετάλλου.



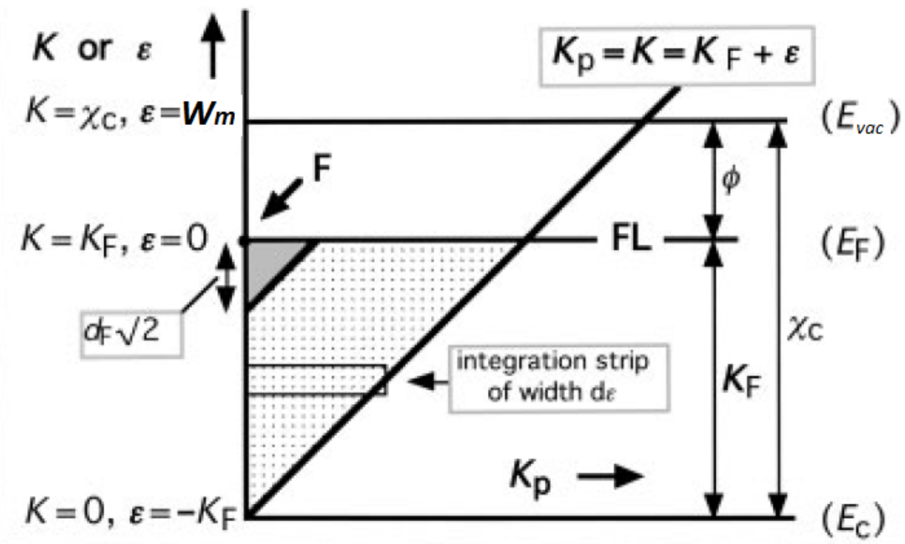
Σχήμα 2.3[8]: *Η μορφή του δυναμικού που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια, καθώς επίσης και ενεργειακό διάγραμμα για την κάθετη στην επιφάνεια συνιστώσα της ενέργειας.*

Ο συντελεστής διέλευσης τώρα υπολογίζεται βάσει της μεθόδου WKB που αναπτύχθηκε στην παράγραφο 1.3, και δίνεται από τη σχέση (1.36):

$$\tau = \exp\left(-g \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - E_n}\, dx \right) \tag{2.11}$$

όπου $g=(8m)^{1/2}/\hbar=10.246\ eV^{-1/2}\ nm^{-1}$, και $x_{1,2}$ είναι τα σημεία καμπής. Θα ήταν βολικό να απλοποιήσουμε το συμβολισμό για την υπόριζη ποσότητα ορίζοντας $V=U-E_n$. Τότε βάσει των προηγούμενων ορισμών έχουμε: $V(x)=h-eFx-B/x$ ($x \geq x_c$).

Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε το διάγραμμα ενεργειακού χώρου (energy-space diagram-ESD) για να εξάγουμε την πυκνότητα ρεύματος εκπομπής[8]. Τα διαγράμματα αυτά είναι 2 τύπων: τα Ν-τύπου και τα Τ-τύπου. Και στις 2 περιπτώσεις στον οριζόντιο άξονα έχουμε την παράλληλη συνιστώσα της κινητικής ενέργειας K_p. Αυτό το οποίο αλλάζει είναι η ποσότητα που παριστάνει ο κατακόρυφος άξονας. Στα Ν-τύπου παριστάνει την κάθετη στην επιφάνεια συνιστώσα της ενέργειας E_n, ενώ στα Τ-τύπου παριστάνεται η ολική ενέργεια E. Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε Τ-τύπου διάγραμμα όπως αυτό που φαίνεται στο σχήμα 2.4. Κάθε σημείο στο διάγραμμα αντιπροσωπεύει μία δεδομένη ενεργειακή κατάσταση με ενέργεια E (τεταγμένη), παράλληλη συνιστώσα κινητικής ενέργειας K_p (τετμημένη), άρα και κάθετη συνιστώσα ενέργειας $E_n=E-K_p$. Το σημείο που σημειώνεται στο διάγραμμα ως F, είναι η ενεργειακή κατάσταση ενός ηλεκτρονίου το οποίο βρίσκεται στο επίπεδο Fermi και κινείται κάθετα στην επιφάνεια.



Σχήμα 2.4[8]: *Διάγραμμα ενεργειακού χώρου τύπου Τ. Ενεργειακές καταστάσεις υπάρχουν μόνο στο άνω αριστερά μέρος του διαγράμματος, καθώς είναι αδύνατον να είναι* $K<K_p$.

Ας δούμε τώρα πως χρησιμοποιείται το παραπάνω διάγραμμα για να υπολογιστεί η πυκνότητα ρεύματος εκπομπής. Με βάση το μοντέλο Sommerfeld των ελεύθερων ηλεκτρονίων, η απειροστή πυκνότητα ρεύματος dZ που περνά μέσα από μία επιφάνεια, και προκαλείται από ηλεκτρόνια τα ο απειροστό στοιχείο του N-ESD $dK_p dK_n$ γύρω από το σημείο (K_p,K_n)

$$dZ = z_S f(K_p, K_n) dK_p dK_n \tag{2.12}$$

Όπου $z_S=em/2\pi^2\hbar^3=0.1618\ A\ \mu m^{-2}\ eV^{-2}$ η σταθερά Sommerfeld, και $f(K_p,K_n)$ η πυκνότητα πιθανότητας κατάληψης της κατάστασης (K_p,K_n). Αντίστοιχα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε σημεία του T-ESD και έχουμε:

$$dZ = z_S f'(\varepsilon, K_p) dK_p d\varepsilon \tag{2.13}$$

Για τον υπολογισμό του αντίστοιχου στοιχειώδους ρεύματος εκπομπής από την επιφάνεια, δεν μένει παρά να πολλαπλασιάσουμε με το συντελεστή διέλευσης τ οπότε έχουμε:

$$dJ = \tau dZ = z_S \tau(\varepsilon, K_p) f'(\varepsilon, K_p) dK_p d\varepsilon \tag{2.14}$$

Έτσι το ολικό ρεύμα εκπομπής θα είναι:

$$J = z_S \iint_{\Omega} \tau(\varepsilon, K_p) f'(\varepsilon, K_p) dK_p d\varepsilon \tag{2.15}$$

όπου Ω είναι το χωρίο του T-ESD το οποίο περιέχει όλες τις πιθανές καταστάσεις των ηλεκτρονίων. Σε θερμοκρασία 0K, καταλαμβάνονται μόνο τα γραμμοσκιασμένα σημεία του σχήματος 2.4 με πιθανότητα $f'=1$, ωστόσο σε διαφορετικές θερμοκρασίες (και σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας) καταλαμβάνονται και τα από πάνω σημεία, και η κατανομή πιθανότητας είναι f' είναι η κατανομή Fermi-Dirac, η οποία εξαρτάται μόνο από την ολική ενέργεια ε, οπότε έχουμε:

$$J = z_S \iint_{\Omega} \frac{\tau(\varepsilon, K_p)}{1+\exp(\varepsilon / k_\mathrm{B} T)} dK_p d\varepsilon \tag{2.16}$$

(όπου k_B η σταθερά Boltzmann) και επιλύοντας το διπλό ολοκλήρωμα για το δεδομένο χωρίο που περιγράφεται στο σχήμα 2.4 παίρνουμε:

$$J = z_S \int_{-K_F}^{\infty} \frac{1}{1+\exp(\varepsilon / k_{\mathrm{B}}T)} d\varepsilon \int_{0}^{K_F+\varepsilon} \tau(\varepsilon, K_p) dK_p \tag{2.17}$$

όπου ως προς *ε* η ολοκλήρωση γίνεται μέχρι το ∞, αλλά πρακτικά η συνάρτηση Fermi-Dirac μηδενίζεται σε σημεία όπου το *ε* γίνεται μερικά k_BT, η ολοκλήρωση έχει νόημα μόνο μέχρι κάποιο σημείο κοντά στο επίπεδο Fermi *ε*=0.

Για να συνεχίσουμε τους υπολογισμούς θα πρέπει να βρούμε μία έκφραση για το συντελεστή διέλευσης $\tau(\varepsilon,K_p)$. O τ δεν εξαρτάται και από το ε και από το K_p, ωστόσο η εξάρτηση αυτή καταρρέει σε εξάρτηση από τη διαφορά τους. Έτσι το ολοκλήρωμα στη (2.11) εξαρτάται μόνο από το *h* της (2.10). Άρα θα έχουμε

$$\tau(h) = \exp[-G(h)] \tag{2.18}$$

Η συνάρτηση *G*(*h*) μπορεί να αναπτυχθεί κατά Taylor γύρω από το σημείο $hG=W_m$ (δηλαδή το σημείο F του T-ESD):

$$G(h) = G(W_m + \delta h) = G(W_m) + \frac{\delta h}{d_F} + O(\delta h^2) \tag{2.19}$$

όπου

$$d = \left[\frac{dG}{dh}\right]^{-1} \tag{2.20}$$

και ο δείκτης F αντιπροσωπεύει ποσότητες μετρούμενες στο σημείο F του διαγράμματος. Στην ανάπτυξη (2.19), αν κρατήσουμε και όρους μεγαλύτερης τάξης, θα πάρουμε καλύτερη συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα, αλλά η βασική θεωρία χρησιμοποιεί γραμμική προσέγγιση. Τελικά έχουμε:

$$G \approx G_F + \frac{\delta h}{d_F} \tag{2.21}$$

και αντικαθιστώντας στην (2.18) παίρνουμε:

$$\tau \approx \tau_F \exp\left[-\frac{\delta h}{d_F}\right] \tag{2.22}$$

Διαφορίζοντας την (2.10) παίρνουμε: $\delta h=\delta K_p-\delta\varepsilon$ κι επειδή η ανάπτυξη έχει γίνει γύρω από τα σημείο F όπου $\varepsilon=K=0$ άρα $\delta h=K_p-\varepsilon$. Καταλήγουμε λοιπόν στην τελική μορφή για το συντελεστή διέλευσης:

$$\tau(\varepsilon, K_p) \approx \tau_F \exp\left[\frac{\varepsilon}{d_F}\right]\exp\left[-\frac{K_p}{d_F}\right] \tag{2.23}$$

Τώρα που βρήκαμε την έκφραση για το το τ, μπορούμε να επιστρέψουμε και να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα (2.17), αντικαθιστώντας από την (2.23):

$$J = z_S \tau_F \int_{-K_F}^{\infty} \frac{\exp(\varepsilon / d_F)}{1+\exp(\varepsilon / k_{\mathrm{B}} T)} d\varepsilon \int_{0}^{K_F+\varepsilon} \exp\left(-\frac{K_p}{d_F}\right) dK_p$$

$$\Rightarrow J = z_S \tau_F d_F \int_{-K_F}^{\infty} \frac{\exp(\varepsilon / d_F) - \exp(-K_F / d_F)}{1+\exp(\varepsilon / k_{\mathrm{B}} T)} d\varepsilon \tag{2.24}$$

στο παραπάνω ολοκλήρωμα μπορούμε να αμελήσουμε τον όρο $\exp(-K_F / d_F)$ μιας και για τα συνήθη μέταλλα το βάθος της ζώνης αγωγιμότητας είναι πολύ μεγεαλύτερο από το d_F οπότε το εκθετικό είναι πρακτικά αμελητέο. Οπότε μπορούμε να καταλήξουμε στην τελική μορφή για την πυκνότητα ρεύματος εκπομπής:

$$J = z_S \tau_F d_F \int_{-K_F}^{\infty} \frac{\exp(\varepsilon / d_F)}{1+\exp(\varepsilon / k_{\mathrm{B}} T)} d\varepsilon \tag{2.25}$$

υπολογίζουμε το παραπάνω ολοκλήρωμα χρησιμοποιώντας τη θεωρία των συναρτήσεων-Βήτα, και παίρνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα:

$$J = J_0 \Theta \tag{2.26}$$

όπου

$$J_0 = z_S d_F^2 \tau_F \tag{2.27}$$

είναι η πυκνότητα ρεύματος σε θερμοκρασία T=0K, και Θ είναι ένας παράγοντας διόρθωσης θερμοκρασίας με

$$\Theta = \frac{\pi \mathrm{k_B} T}{d_F \sin(\pi \mathrm{k_B} T / d_F)} \approx 1 + \frac{1}{6}\left(\frac{\pi \mathrm{k_B} T}{d_F}\right)^2 \tag{2.28}$$

Αυτό που μένει τώρα είναι να συσχετισθούν οι σταθερές d_F και τ_F με τα φυσικά χαρακτηριστικά του μοντέλου. Στο απλό μοντέλο που περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο χρησιμοποιήσαμε απλό τριγωνικό μοντέλο για το φράγμα δυναμικού για να υπολογίσουμε το συντελεστή διέλευσης. Καταλήξαμε στην εξής λύση (2.5):

$$\tau_F^{tr} = \exp\left(-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{W_m^{\ 3/2}}{eF} \right). \qquad (2.29)$$

όπου ο εκθέτης tr συμβολίζει την προσέγγιση με τριγωνικό φράγμα. Επίσης, η G(h) γίνεται:

$$G^{tr} = \frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{h^{3/2}}{eF}. \qquad (2.30)$$

άρα και το d_F:

$$d_F^{tr} = \frac{\hbar eF}{2W_m^{\ 1/2}\sqrt{2m}}. \qquad (2.31)$$

Έτσι προκύπτει η τελική έκφραση της πυκνότητας ρεύματος για την απλή περίπτωση του τριγωνικού φράγματος δυναμικού, αντικαθιστώντας στην (2.27) τις (2.29) και (2.31):

$$J_0^{tr} = \frac{e^3}{8\pi\hbar}\frac{F^2}{W_m^{\ 2}}\exp\left(-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{W_m^{\ 3/2}}{eF} \right). \qquad (2.32)$$

Η παραπάνω έκφραση (2.32) είναι η κλασσική εξίσωση Fowler-Nordheim στη στοιχειώδη μορφή της για τριγωνικό δυναμικό.

Αν θέλουμε να καταλήξουμε στην αντίστοιχη έκφραση για την πυκνότητα σε ένα γενικού τύπου φράγμα το οποίο διαφέρει από το τριγωνικό, η G θα δίνεται από τη σχέση:

$$G = vG^{tr} = v\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{h^{3/2}}{eF}. \qquad (2.33)$$

όπου v είναι ένας παράγοντας διόρθωσης, ο οποίος αλλάζει ανάλογα με την ακριβή μορφή του φράγματος που έχουμε θεωρήσει, και τις περισσότερες φορές υπολογίζεται αριθμητικά. Χρησιμοποιώντας αυτή την έκφραση υπολογίζουμε:

$$d_F = d_F^{tr} / \rho_F. \qquad (2.34)$$

όπου

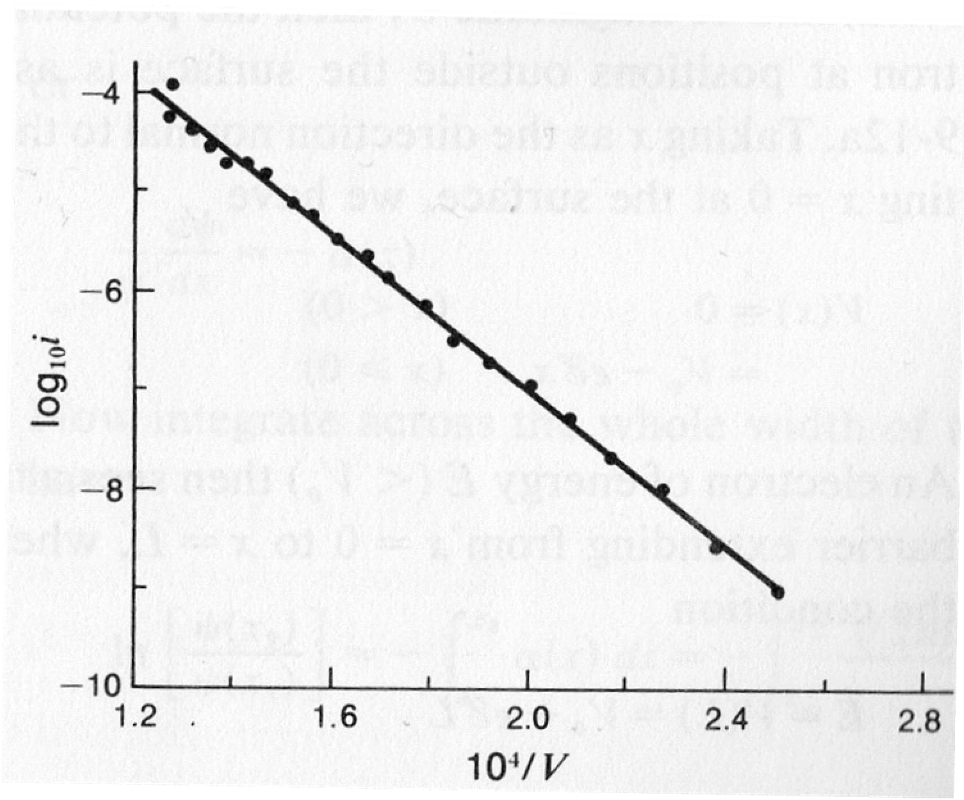
$$\rho \equiv v + \frac{2}{3}h\frac{\partial v}{\partial h}. \qquad (2.35)$$

ένας ακόμα παράγοντας διόρθωσης που εξαρτάται από το v. Έτσι καταλήγουμε στην τελική μορφή της εξίσωσης F-N για γενικού τύπου φράγμα:

$$J_0^{tr} = \frac{e^3}{8\pi\hbar}\frac{F^2}{\rho_F W_m}\exp\left(-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{v_F W_m^{3/2}}{eF}\right). \quad (2.36)$$

Στην περίπτωση τώρα που το φράγμα δυναμικού είναι το φράγμα Shottky-Nordheim της εξίσωσης (2.9), οι παράγοντας διόρθωσης ν και ρ είναι οι γνωστές ελλειπτικές συναρτήσεις πεδιακής εκπομπής. Οι συναρτήσεις αυτές είναι αρκούντως πολύπλοκες και δεν υπάρχει λόγος να αναλυθούν εδώ. Μπορούν να βρεθούν στην αναφορά [9].

Βλέπουμε ότι από την τελική εξίσωση F-N, μπορεί να προκύψει το ολικό ρεύμα συναρτήσει της επιβαλλόμενης τάσης. Το ολικό ρεύμα είναι το γινόμενο της πυκνότητας ρεύματος με το εμβαδόν της ενεργής επιφάνειας εκπομπής. Επίσης το πεδίο F είναι ανάλογο της επιβαλλόμενης τάσης. Για το λόγο αυτό, και δεδομένης της εξίσωσης F-N (2.36), το διάγραμμα J-F, όπως επίσης και το I-V έχουν δεδομένη μορφή: Αν στον κατακόρυφο άξονα βάλουμε τιμές του $\ln(J/F^2)$ για το διάγραμμα J-F (ή του $\ln(I/V^2)$ για το I-V διάγραμμα) και στον οριζόντιο άξονα το 1/F (ή το 1/V αντίστοιχα) η γραφική παράσταση θα είναι μία φθίνουσα ευθεία γραμμή. Το γεγονός αυτό συμπίπτει με πειραματικά δεδομένα, κάτι που μπορούμε να δούμε στο σχήμα 2.5

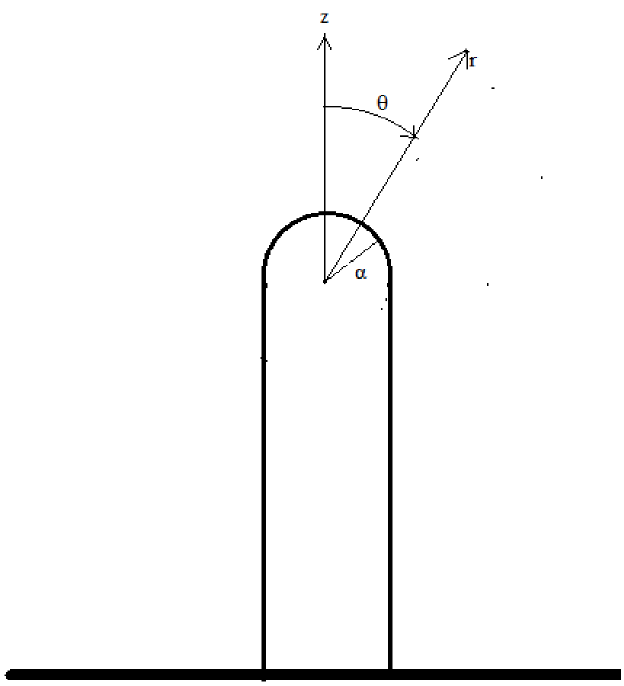


Σχήμα 2.5[3]: *Διάγραμμα Fowler-Nordheim I-V: Συμφωνία θεωρητικής πρόβλεψης και πειραματικών δεδομένων*

2.3. 3-διάστατη επέκταση της θεωρίας F-N: Θεωρία Edgcombe

Το μονοδιάστατο γεωμετρικό μοντέλο που αναπτύχθηκε στην προηγούμενη παράγραφο αποτελεί καλή προσέγγιση όταν η διαχωριστική επιφάνεια είναι σχεδόν επίπεδη, κάτι το οποίο ισχύει κατά προσέγγιση, όταν η ακτίνα καμπυλότητας της διαχωριστικής επιφάνειας είναι πολύ μεγαλύτερη από το εύρος της απαγορευμένης περιοχής. Κάτι τέτοιο ίσχυε στην πράξη στα πρώτα στάδια εφαρμογών της πεδιακής εκπομπής, ωστόσο απέχει μακράν από την πραγματικότητα σε σύγχρονες εφαρμογές όπου οι ακίδες γίνονται εξαιρετικά αιχμηρές (νανομετρικού μεγέθους). Αυτός είναι και ο βασικός λόγος για τον οποίο η κλασσική θεωρία F-N πρέπει να επεκταθεί σε 3διάστατα μοντέλα τα οποία λαμβάνουν υπ' όψιν την έντονη καμπυλότητα των ακίδων εκπομπής, καθώς αυτές γίνονται στην πράξη όλο και μικρότερες.

Ας θεωρήσουμε λοιπόν ένα τρισδιάστατο γεωμετρικό μοντέλο το οποίο προσομοιώνει τη γεωμετρία της ακίδας. Θεωρούμε λοιπόν το κλασσικό μοντέλο του ημισφαιρίου πάνω σε «τηλεγραφόξυλο» (hemisphere on a post). Δηλαδή έχουμε ένα κύλινδρο, ο οποίος τερματίζεται με ένα ημισφαίριο, όπως στο σχήμα 2.6. Τόσο ο κύλινδρος όσο και το ημισφαίριο έχουν ακτίνα α, ενώ τοποθετούμε το σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων (r,θ,φ) στο κέντρο του ημισφαιρίου.



Σχήμα 2.6: *Το μοντέλο της διάταξης"hemisphere on a post" και το σύστημα συντεταγμένων*

Η τρισδιάστατη κατανομή του δυναμικού που λαμβάνουμε αποτελείται από 2 συνιστώσες: τη λύση της εξίσωσης Laplace που μηδενίζει το δυναμικό στη δεδομένη επιφάνεια εκπομπής, και το εικονικό δυναμικό της σφαιρικής επιφάνειας. Η μορφή που παίρνει το δυναμικό σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι:

$$U(r,\theta) = E_F + W_m - eF_0 P_n(\cos\theta) f(R,n) - \frac{W_m k}{2(R^2 - 1)} \quad .(2.37)$$

όπου

$$f(R,n) = \frac{a(R^n - R^{-n-1})}{2n+1} \quad . \quad (2.38)$$

με $R=r/\alpha$, $k=e^2/4\pi\varepsilon_0 \alpha W_m$. P_n είναι η συνάρτηση Legendre ($1^{ου}$ είδους) n-στης τάξης. Για μικρό θ, μπορούμε να κάνουμε την προσέγγιση:

$$P_n(\cos\theta) \approx 1 - n(n+1)\theta^2 / 4 \quad . \quad (2.39)$$

και στη συνέχεια μπορούμε να προσδιορίσουμε το n έτσι ώστε το αποτέλεσμα να προσεγγίζει πειραματικά δεδομένα για τη γωνιακή εξάρτηση του δυναμικού. Τα πειραματικά δεδομένα[12] δίνουν την εξάρτηση αυτή

$$F(\theta) \approx F_0\left(1 - 0.077\theta^2\right) \quad . \quad (2.40)$$

Συνδυάζοντας τις (2.39) και (2.40) παίρνουμε n=0.25.

Για τη συνέχεια της ανάλυσης θα βόλευε να ορίσουμε την ποσότητα:

$$x(\theta) = W_m / aeF(\theta) \quad . \quad (2.41)$$

και να πάρουμε την τελική έκφραση για το δυναμικό:

$$U(r,\theta) = E_F + W_m\left[1 - \frac{1}{ax(\theta)} f(R,n) - \frac{k}{2(R^2-1)}\right]. \quad (2.42)$$

Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε τη (μονοδιάστατη) μέθοδο WKB για να υπολογίσουμε το συντελεστή διέλευσης. Η ολοκλήρωση γίνεται κατά μήκος ενός ακτινικού μονοπατιού, και θεωρούμε ότι το ρεύμα εκπομπής είναι ακτινικό. Ο συντελεστής διέλευσης για ένα ηλεκτρόνιο με κάθετη συνιστώσα ενέργειας ίση με E_F είναι:

$$\tau = \exp\left(-g\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{U(x) - E_F}\, dr\right). \quad (2.43)$$

όπου $r_{1,2}$ είναι τα όρια της απαγορευμένης περιοχής. Το ολοκλήρωμα στη (2.43) θα υπολογιστεί όπως και στην προηγούμενη ενότητα και θα είναι:

$$G = v(y)\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{W_m^{\ 3/2}}{eF} \quad . \tag{2.44}$$

όπου v είναι ο παράγοντας διόρθωσης του τυχαίου δυναμικού ο οποίος εξαρτάται από την παράμετρο $y=(k/x)^{1/2}$. Ας ορίσουμε τη συνάρτηση:

$$f_1(x,k) = \frac{3}{2}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\frac{U(R)-E_F}{W_m}}dR \quad . \tag{2.45}$$

Βάσει της (2.45), η (2.44) γίνεται:

$$G = \frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{W_m^{\ 3/2}}{eF}\frac{f_1}{x} \quad . \tag{2.46}$$

Στη συνέχεια υπολογίζουμε αριθμητικά τιμές της συνάρτησης f_1 με βάση το δυναμικό (2.42) και την προσεγγίζουμε πολυωνυμικά. Παίρνουμε την εξής προσέγγιση:

$$f_1(x,k) \approx -k + c\sqrt{kx} + x + q(x) \quad . \tag{2.47}$$

όπου $q(x)$ είναι πολυώνυμο του x που περιλαμβάνει όρους τάξης μεγαλύτερης από 4[η]. Στην παραπάνω έκφραση οι 3 πρώτοι όροι αντιστοιχούν στην ποσότητα $v(y)$, και συνεπώς $f_1/x=v(y)+q(x)/x$. Κι εδώ φαίνεται η επέκταση σε σχέση με την κλασσική θεωρία, μιας και η προσέγγιση για την f_1 περιλαμβάνει όρους που αντιστοιχούν σε μη γραμμική εξάρτηση του ολοκληρώματος από το $1/F$.

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω προσεγγίσεις και τις σχέσεις από την κλασσική θεωρία F-N της προηγούμενης παραγράφου, μπορούμε να καταλήξουμε στην κατανομή της πυκνότητας ρεύματος:

$$J(\theta) = \frac{e^3}{16\pi^2\hbar}\frac{F^2(\theta)}{W_m\omega^2}\exp\left(-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e}\frac{W_m^{3/2}f_1(\theta)}{F_0 x_0}\right) \tag{2.48}$$

όπου

$$\omega(x,k) = \frac{2W_m^{1/2}}{3x}\frac{\partial\left(W_m^{\ 1/2}f_1\right)}{\partial W_m} \tag{2.49}$$

Στη συνέχεια προσεγγίζουμε την εξάρτηση της f_1 από το θ αναπτύσσοντας κατά Taylor γύρω από το σημείο θ=0, και χρησιμοποιώντας την έκφραση (2.40):

$$f_1 \approx f_{10} - \frac{(F-F_0)x_0}{F_0}\left[\frac{\partial f_1}{\partial x}\right]_{x_0} = f_{10} + 0.077\theta^2 x_0 \left[\frac{\partial f_1}{\partial x}\right]_{x_0} \quad (2.50)$$

Άρα $f_1/x_0 \approx f_{10}/x_0 + \theta^2 b$ όπου $b = 0.077\partial f_1/\partial x_0$. Ομοίως προσεγγίζουμε και το $\omega(x)$ και παίρνουμε:

$$\omega(\theta) = \omega_0 + 0.077\theta^2 x_0 \left[\frac{\partial \omega}{\partial x}\right]_{x_0} \quad (2.51)$$

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω προσεγγίσεις (2.50-2.51) η (2.48) γίνεται:

$$J(\theta) = \frac{e^3 F_0^{\,2}(1-0.077\theta^2)^4}{16\pi^2 \hbar W_m \omega_0^{\,2}} \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e}\frac{W_m^{3/2}}{F_0}\left(\frac{f_{10}}{x_0} + b\theta^2\right)\right] \quad (2.52)$$

Η παραπάνω έκφραση για την κατανομή του ρεύματος εκπομπής είναι πολύ σημαντική διότι μπορεί να δώσει και την ενεργή στερεά γωνία Ω από την οποία εκπέμπονται ηλεκτρόνια. Η γωνία αυτή ορίζεται ως η γωνία εντός της οποίας θα έπρεπε να εκπέμπει ο εκπομπός με σταθερή πυκνότητα αυτή του σημείου θ=0 (μέγιστη) για να πάρουμε το ίδιο συνολικό ρεύμα εκπομπής. Δηλαδή:

$$\Omega = 2\pi \frac{1}{J_0}\int_0^{\theta_{\max}} J(\theta)\sin(\theta)d\theta \quad (2.53)$$

Αντικαθιστώντας από την (2.52) παίρνουμε:

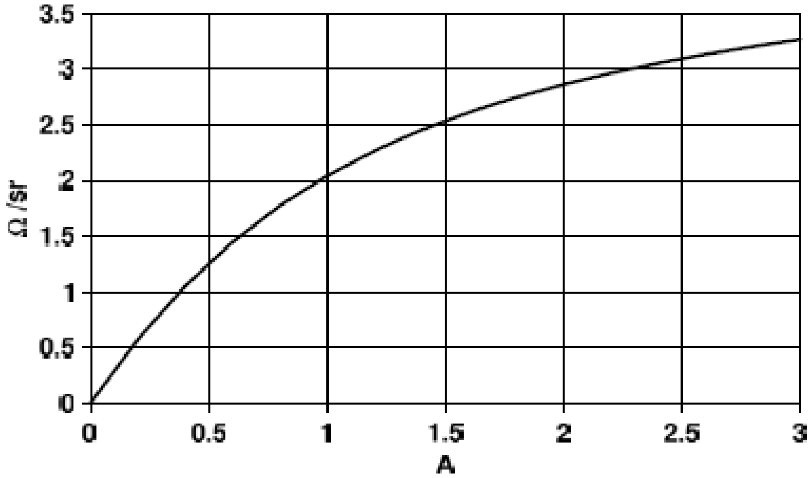
$$\Omega = 2\pi \int_0^{\theta_{\max}} \left(1-0.077\theta^2\right)^4 \exp\left(-\frac{\theta^2}{\mathrm{A}}\right)\sin(\theta)d\theta \quad (2.54)$$

$$A = \frac{3\hbar e}{4b\sqrt{2m}}\frac{F_0}{W_m^{3/2}} \quad (2.55)$$

Υπολογίζοντας το παραπάνω ολοκλήρωμα αριθμητικά και κάνοντας πολυωνυμική παρεμβολή καταλήγουμε στην προσέγγιση:

$$\Omega = 3.13A - 1.39A^2 + 0.34A^3 - 0.034A^4 \quad (2.56)$$

η οποία παριστάται γραφικά στο σχήμα 2.7. Σε αριθμητική προσέγγιση που γίνεται στο b, προκύπτει ότι για συνήθεις τιμές των υπολοίπων χαρακτηριστικών που συμπίπτουν με πειραματικά δεδομένα, ισχύει A=1.48 που αντιστοιχεί σε Ω=2.5sr [11].



Σχήμα 2.7[11]: *Η εξάρτηση της γωνίας εκπομπής από την παράμετρο Α έτσι όπως υπολογίστηκε αριθμητικά*

Κεφάλαιο 3:
Τρισδιάστατη ανάλυση της χωρικής κατανομής ηλεκτρονικής δέσμης πεδιακής εκπομπής από ελλειπτικές ακίδες

3.1. Εισαγωγικά

Στο προηγούμενο κεφάλαιο αναπτύχθηκε η κλασσική θεωρία εκπομπής πεδίου Fowler-Nordheim, η οποία βασίζεται σε μονοδιάστατες προσεγγίσεις του φαινομένου. Οι προεκτάσεις της βασικής θεωρίας F-N σε 3 διαστάσεις που αναλύθηκαν στην παράγραφο 2.3, δεν μπορούν να προβλέψουν με ακρίβεια νέα πειραματικά δεδομένα, τα οποία προέρχονται από διατάξεις μικροσκοπίων που έχουν πρόσφατα αναπτυχθεί. Για να κατανοήσουμε όμως καλύτερα την ασυμφωνία θεωρίας-πειράματος ας αναπτύξουμε εν συντομία τις βασικές αρχές λειτουργίας των διατάξεων αυτών.

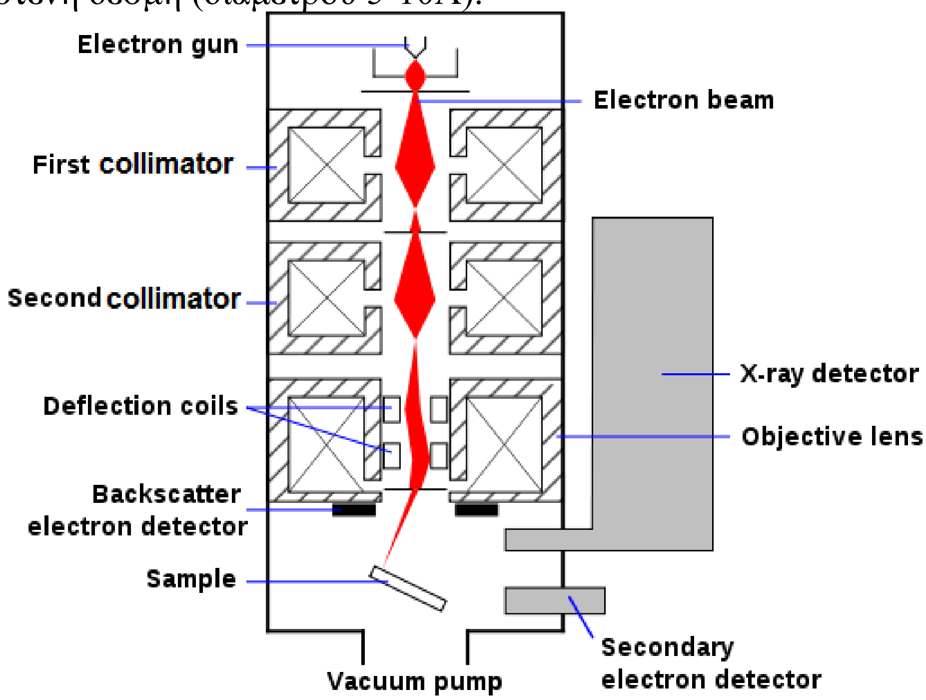
Οι κλασσικές διατάξεις μικροσκοπίων που βασίζονται στην εκπομπή πεδίου είναι το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (SEM) και το μικροσκόπιο σάρωσης σήραγγας (STM). Και στις δύο περιπτώσεις, ηλεκτρόνια που προέρχονται από πεδιακή εκπομπή προσπίπτουν πάνω στο δείγμα το οποίο σαρώνεται από την ηλεκτρονική δέσμη. Η αλληλεπίδραση της ηλεκτρονικής δέσμης με την επιφάνεια στην οποία προσπίπτει, παράγει πληροφορίες για τη μορφολογία ή για άλλα χαρακτηριστικά της επιφάνειας-δείγμα.

Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (Scanning Electron Microscope-SEM).

Το μοντέλο του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου φαίνεται στην εικόνα 3.1. Η ηλεκτρονική δέσμη παράγεται με εκπομπή πεδίου από την ακίδα που συχνά καλείται και ηλεκτρονικό πυροβόλο (electron gun). Στη συνέχεια η δέσμη αυτή συγκεντρώνεται περνώντας μέσα από πολύπλοκα ηλεκτρονικά εστίασης (collimators), και καταλήγει να προσπίπτει σε ένα συγκεκριμένο σημείο του δείγματος, αφού περνάει από μαγνήτες οι οποίοι την εκτρέπουν κατά τρόπο επιθυμητό 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 παράμετροι στην αλληλεπίδραση της προσπίπτουσας δέσμης με το δείγμα (όπως η δευτερεύουσα εκπομπή ηλεκτρονίων, η εκπομπή ακτίνων Χ, η ανάκλαση ηλεκτρονίων κ.α). Ανιχνεύοντας αυτές τις παραμέτρους με κατάλληλους αισθητήρες, μπορούμε να ανιχνεύσουμε διάφορα χαρακτηριστικά του δείγματος.

Ωστόσο, ένας πολύ σημαντικός παράγοντας για τη διακριτική ικανότητα χώρου (lateral resolution) που μας δίνει η διάταξη, είναι η διατομή της δέσμης. 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 μία δέσμη αρκετά στενή, κάτι που εξασφαλίζεται με τη χρήση των ηλεκτρονικών εστίασης τα οποία μπορούν να δώσουν μία πραγματικά πολύ στενή δέσμη (διαμέτρου 5-10Å).



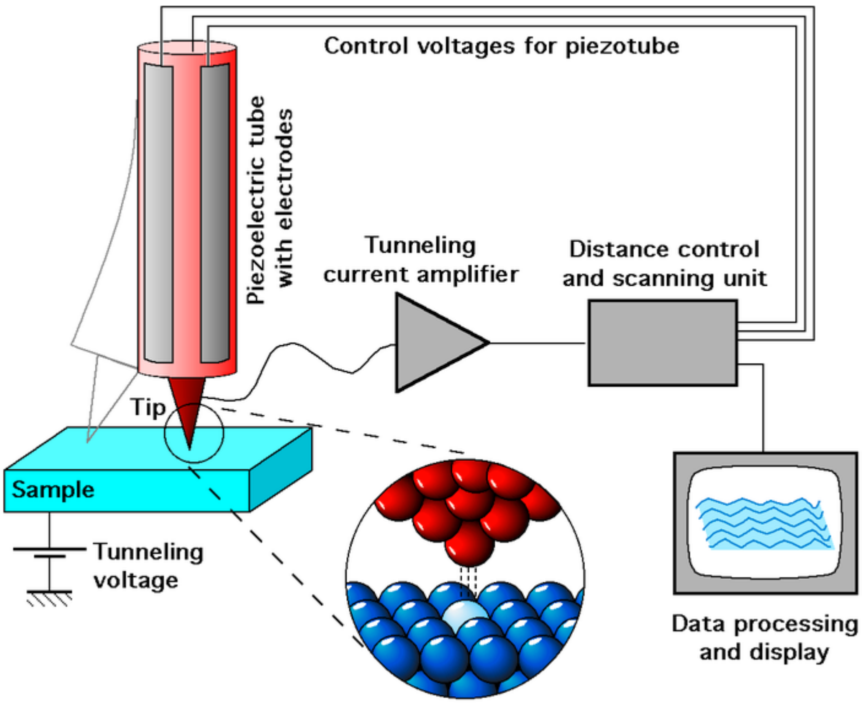
Εικόνα 2.1: *Σχηματική αναπαράσταση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης.*

Μικροσκόπιο σάρωσης σήραγγας (STM).

Το STM είναι όργανο μικροσκοπίας, το οποίο χρησιμεύει περισσότερο στην αναλυτική μελέτη επιφανειών, καθώς μπορεί να δώσει ανάλυση σε ατομικό επίπεδο. Στην εικόνα 3.2 φαίνεται σχηματικό διάγραμμα αναπαράστασης του STM.

Το ρεύμα 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. Αν λοιπόν η ακίδα σαρώνει οριζόντια την επιφάνεια του δείγματος, ενώ η ταυτόχρονα κινείται κατακόρυφα έτσι ώστε το ρεύμα να διατηρείται σταθερό, η κατακόρυφη κίνηση μας 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.

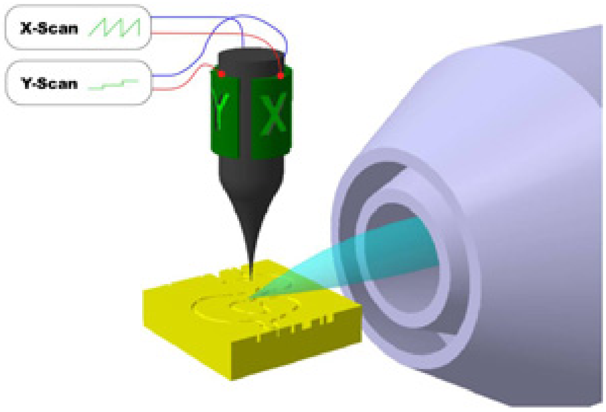
Στο STM η διατομή της ηλεκτρονικής δέσμης είναι από μόνη της πολύ μικρή, καθώς η απόσταση ακίδας-δείγματος είναι μικρότερη από την καμπυλότητα της ακίδας. Συνεπώς η δέσμη δεν προλαβαίνει να ανοίξει, κι έτσι η διακριτική ικανότητα που μας δίνει το STM είναι σχεδόν σε υποατομικό επίπεδο.



Εικόνα 3.2: *Σχηματικό διάγραμμα λειτουργίας του STM*

Μία διάταξη ηλεκτρονικής μικροσκοπίας που έχει αναπτυχθεί πρόσφατα[13-16] και βασίζεται στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων είναι το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης κοντινού πεδίου (Near Field Emission Scanning Electron Microscope-NFESEM) σχηματική αναπαράσταση του οποίου φαίνεται στην εικόνα 3.3.

Στη διάταξη αυτή, η απόσταση ακίδας δείγματος είναι σε μία ενδιάμεση τάξη μεγέθους ως προς το SEM και το STM. Η ακίδα τοποθετείται σε απόσταση 10-20nm από το δείγμα, ενώ συνδυάζονται τεχνικές ανίχνευσης χαρακτηριστικών και από το SEM (όπως η ανίχνευση δευτερεύουσας εκπομπής ηλεκτρονίων) και από το STM (όπως η κατακόρυφη μεταβολή της θέσης της ακίδας έτσι ώστε να διατηρείται σταθερό ρεύμα).



Εικόνα 3.3:*Σχηματικό διάγραμμα του NFESEM*

Το στοιχείο το οποίο και πάλι παίζει πολύ σημαντικό ρόλο για τη διακριτική ικανότητα της διάταξης είναι η διατομή της προσπίπτουσας στο δείγμα δέσμης. Εδώ η διατομή της δέσμης είναι κάτι αρκετά σημαντικό, καθώς δεν χρησιμοποιούνται ηλεκτρονικά εστίασης (κάτι το οποίο είναι και το σημαντικό πλεονέκτημα του NFESEM καθώς μειώνεται σημαντικά το κόστος), ούτε η απόσταση εκπομπού-δείγματος είναι τόσο μικρή όσο του STM ώστε να μην προλαβαίνει η δέσμη να «ανοίξει».

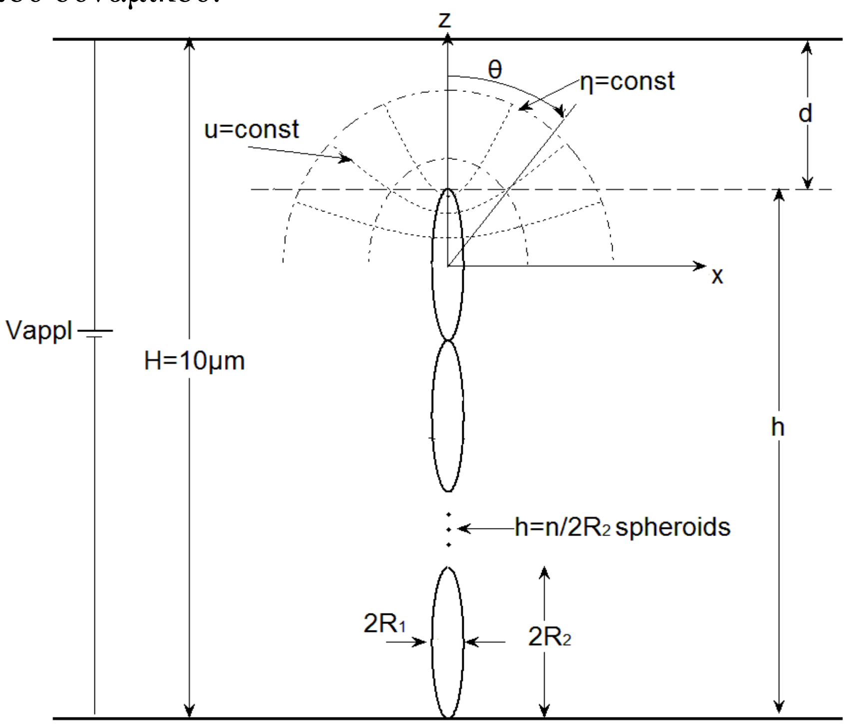
Η διακριτική ικανότητα που δίνει στην πράξη το NFESEM είναι της τάξης των 2-3nm. Βάσει της θεωρίας που αναπτύχθηκε στην παράγραφο 2.3, και θέτοντας τα πραγματικά πειραματικά δεδομένα στη σχέση (2.56), η προβλεπόμενη στερεά γωνία εκπομπής υπολογίζεται περίπου Ω=1.44sr[13] που αντιστοιχεί σε επίπεδη γωνία $\theta \approx 39^o$. Μία τέτοια γωνία εκπομπής, θα έδινε διάμετρο διατομής δέσμης (σε απόσταση 20nm περίπου) 33nm. Η ασυμφωνία πειράματος και θεωρίας είναι προφανής. Για να επιτευχθεί διακριτική ικανότητα 2-3nm, θα πρέπει η δέσμη να βγαίνει από τον εκπομπό πολύ πιο συγκεντρωμένη προς τον άξονα απ’ ότι προβλέπει η κλασσική θεωρία. Πρέπει συνεπώς να υπάρχει μία εγγενής σύγκλιση της δέσμης.

Τα μοντέλα της παραγράφου 2.3, αποτυγχάνουν να προβλέψουν τη σύγκλιση αυτή, διότι αφ’ ενός χρησιμοποιούν σφαιρική γεωμετρία για την ακίδα, η οποία δεν λαμβάνει υπ’ όψιν την αιχμηρότητά της, κι αφ’ ετέρου χρησιμοποιούν μονοδιάστατη-επίπεδη προσέγγιση WKB (ευθείες ακτινικές τροχιές ολοκλήρωσης για το συντελεστή διέλευσης), η οποία δεν μπορεί να προβλέψει την ενδογενή σύγκλιση των ηλεκτρονίων προς τον άξονα της ακίδας.

Στο κεφάλαιο αυτό, θα μοντελοποιήσουμε την ακίδα χρησιμοποιώντας ελλειπτική γεωμετρία, βάσει της οποίας μπορούμε να κάνουμε τον εκπομπό από εντελώς σφαιρικό μέχρι όσο αιχμηρό θέλουμε. Επίσης, θα αναλύσουμε το πρόβλημα με την τρισδιάστατη μέθοδο WKB που αναπτύχθηκε στην παράγραφο 1.4, η οποία θα μπορέσει να προβλέψει την ενδογενή σύγκλιση των ηλεκτρονίων, μιας και επιτρέπει των υπολογισμό καμπυλωμένων ηλεκτρονικών μονοπατιών (curved electron paths).

3.2. Περιγραφή μοντέλου[1]

Θεωρούμε την κλασσική διάταξη της ακίδας πάνω στην κάθοδο πυκνωτικής διάταξης. Η ακίδα μοντελοποιείται ως μία στοίβα (stack) από ελλειψοειδή εκ περιστροφής αγώγιμα αντικείμενα τα οποία εφάπτονται μεταξύ τους, και καταλήγει σε κάθοδο η οποία θεωρείται σφαίρα διαμέτρου ρ>>Η (έτσι ώστε να μπορεί να θεωρηθεί πρακτικά επίπεδη) όπως στο σχήμα 3.1. Η λύση της εξίσωσης Laplace για την περίπτωση ύπαρξης μόνο ενός από τα αντικείμενα μπορεί να εκφρασθεί αναλυτικά. Συνεπώς μπορούμε να βρούμε τη συνολική έκφραση για το δυναμικό, χρησιμοποιώντας το θεώρημα της επαλληλίας για την ηλεκτροστατική και να αποφύγουμε τις πιθανές αριθμητικές αστάθειες της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων, που θα ήταν η εναλλακτική επιλογή για την εύρεση του δυναμικού.



Σχήμα 3.1: *Το μοντέλο της διάταξης εκπομπής πεδίου, συστήματα συντεταγμένων, διαστάσεις*

Το μοντέλο έχει κυλινδρική συμμετρία, συνεπώς επαρκεί μια περιγραφή σε ένα επίπεδο παράλληλο στον άξονα συμμετρίας. Όπως φαίνεται και στο σχήμα, το καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων που θεωρούμε, τοποθετείται έτσι ώστε ο άξονας z να είναι ο άξονας συμμετρίας, ενώ μελετάται το επίπεδο x-z. Η λύση της εξίσωσης Laplace για κάθε σφαιροειδές, εκφράζεται ευκολότερα σε επιμήκεις σφαιροειδείς συντεταγμένες (prolate spheroidal coordinates) γύρω από το κέντρο του, και συνεπώς βολεύει να χρησιμοποιήσουμε το σύστημα σφαιροειδών συντεταγμένων (η,u,φ), γύρω από το κέντρο του τελευταίου σφαιροειδούς. Στο σχήμα φαίνονται οι διάφορες καμπύλες πάνω στις οποίες διατηρούνται σταθερές οι μεταβλητές η και u. Η μεταβλητή φ είναι η γνωστή πολική γωνία και στο επίπεδο x-z ισχύει $\varphi=0$.

Η σχέσεις που συνδέουν τις σφαιροειδείς συντεταγμένες με τις καρτεσιανές είναι οι εξής:

$$x=a\sinh\eta\sin u\cos\varphi,\ y=a\sinh\eta\sin u\sin\varphi,\ z=a\cosh\eta\cos u \qquad (3.1)$$

και αντίστροφα:

$$\eta=\cosh^{-1}\left(\frac{r_1+r_2}{2}\right), u=\cos^{-1}\left(\frac{r_1-r_2}{2}\right) \text{όπου } r_{1,2}=\sqrt{1+\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}\pm 2\frac{z}{a}} \qquad (3.2)$$

όπου a είναι μια παράμετρος που καθορίζει την απόσταση των εστιών των ελλειψοειδών από το κέντρο και ταυτόχρονα το πόσο επιμήκη είναι τα ελλειψοειδή. Επειδή θέλουμε η επιφάνεια που ορίζει το τελευταίο σφαιροειδές να ταυτίζεται με την επιφάνεια σταθεράς συντεταγμένης $\eta=\eta_0$, θα πρέπει η παράμετρος a να καθοριστεί βάσει της σχέσης R_2/R_1. Παίρνουμε λοιπόν μετά από πράξεις που παραλείπονται:

$$\eta_0=\coth^{-1}\left(\frac{R_2}{R_1}\right), a=R_1/\cosh\eta_0 \qquad (3.3)$$

Η γωνία θ είναι αυτή των σφαιρικών συντεταγμένων, δηλαδή η απόκλιση από τον κατακόρυφο άξονα z, όπως φαίνεται στο σχήμα, ενώ οι υπόλοιπες διαστάσεις είναι όπως φαίνονται στο σχήμα.

3.3. Μέθοδος ανάλυσης

Η μέθοδος που χρησιμοποιούμε περιλαμβάνει 2 στάδια: στο πρώτο στάδιο υπολογίζουμε την τρισδιάστατη μορφή που παίρνει το δυναμικό γύρω από τον εκπομπό, και στο δεύτερο στάδιο χρησιμοποιούμε την τρισδιάστατη προσέγγιση WKB και υπολογίζουμε το συντελεστή διέλευσης καθώς επίσης και τα ηλεκτρονικά μονοπάτια συναρτήσει της γωνίας θ.

Υπολογισμός δυναμικού:

Θεωρούμε ότι η άνοδος είναι γειωμένη και η κάθοδος σε δυναμικό $V=-V_{appl}$. Για λόγους συμμετρίας, το πεδίο που αντιστοιχεί στη διάταξη αυτή, είναι το ίδιο με αυτό που θα υπολογίζαμε σε μία σύνθετη διάταξη η οποία περιλαμβάνει τη δεδομένη διάταξη (κάθοδος-ακίδα), και τη διάταξη-είδωλο ως προς το επίπεδο της ανόδου $z=d+R_2$ η οποία βρίσκεται σε σταθερό δυναμικό $V=+V_{appl}$. Το ολικό δυναμικό σε ένα τυχαίο σημείο (x,y,z) μπορεί να γραφεί ως επαλληλία των δυναμικών που παράγονται από κάθε σφαιροειδές και σφαίρα.

Η σχέση που προκύπτει είναι αρκετά πολύπλοκη καθώς περιλαμβάνει πολλά διαφορετικά συστήματα συντεταγμένων (ένα για κάθε σφαιροειδές ή σφαίρα) και δεν έχει νόημα να γραφεί, αφού χρησιμοποιώντας το θεώρημα της άθροισης (addition theorem) μπορεί να ελαττωθεί στην πολύ απλούστερη μορφή:

$$V(\eta,u)=V_{appl}\left[-1+\sum_{k=0}^{\infty}A_kP_k(\cos u)\left(Q_k(\cosh\eta)-P_k(\cosh\eta)\frac{Q_k(\cosh\eta_0)}{P_k(\cosh\eta_0)}\right)\right] \quad (3.4)$$

η οποία είναι έγκυρη στην περιοχή που έξω από το τελευταίο σφαιροειδές, και μέσα από το ομοεστιακό του, το οποίο τέμνει το κέντρο του δεύτερου σφαιροειδούς. Η περιοχή αυτή περιλαμβάνει εξ' ολοκλήρου την απαγορευμένη περιοχή, όπου λαμβάνει χώρα το φαινόμενο σήραγγας και συνεπώς είναι αυτή που μας ενδιαφέρει. Δεδομένου του ηλεκτροστατικού δυναμικού της έκφρασης (3.4) μπορούμε να εκφράσουμε τη δυναμική ενέργεια των ηλεκτρονίων του μετάλλου ακριβώς έξω από τον εκπομπό (δηλαδή για $\eta>\eta_0$):

$$U(\eta,u)=E_F+W_m-V_{appl}\cdot\sum_{k=0}^{\infty}A_kP_k(\cos u)\left(Q_k(\cosh\eta)-P_k(\cosh\eta)\frac{Q_k(\cosh\eta_0)}{P_k(\cosh\eta_0)}\right) \quad (3.5)$$

Όπου E_F η ενεργειακή στάθμη Fermi του μετάλλου, και W_m το αντίστοιχο φράγμα δυναμικού.

Οι συντελεστές A_k στην (3.5) μπορούν να υπολογιστούν μέσω της μεθόδου αντιστοίχησης σημείων (point matching method): με «αμερόληπτο» τρόπο επιλέγουμε αρκετά σημεία (έστω Ν) στην κάθοδο, και θέτοντας τη δυναμική ενέργεια στα σημεία αυτά ίση με E_F+W_m κατασκευάζουμε Κ εξισώσεις για τους Κ αγνώστους συντελεστές A_k.Οι εξισώσεις αυτές μπορούν να λυθούν αριθμητικά, και έτσι να υπολογιστούν οι συντελεστές. Επειδή οι συντελεστές A_k πολύ γρήγορα τείνουν στο 0 καθώς το k αυξάνει, δεν χρειάζονται για τον υπολογισμό του δυναμικού (3.5)να αθροίσουμε πάνω από 5-6 όρους.

Τέλος να σημειωθεί ότι στην έκφραση (3.5) θα έπρεπε να αθροίσει κανείς και το εικονικό δυναμικό (image potential), αλλά αυτό θα ήταν σημαντικό μόνο στα πρώτο 2-3Å και θα έπαιζε ελάχιστο ρόλο στο φαινόμενο σήραγγας. Συνεπώς επιλέγουμε να το αγνοήσουμε σε αυτό το στάδιο.

Υπολογισμός συντελεστή διέλευσης:

Για τον υπολογισμό του συντελεστή διέλευσης, χρησιμοποιούμε την προσεγγιστική μέθοδο που αναπτύχθηκε στην παράγραφο 1.4. Σε αρχικό στάδιο υπολογίζουμε τα ηλεκτρονικά μονοπάτια επιλύοντας το ζεύγος των εξισώσεων Newton (με αντεστραμμένες δυνάμεις):

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{\partial V}{\partial x}, m\frac{d^2z}{dt^2} = \frac{\partial V}{\partial z} \tag{3.6}$$

οι οποίες αν απαλείψουμε το χρόνο χρησιμοποιώντας και τη σχέση (1.43) για την ορμή

$$\frac{1}{2}m\left[\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dz}{dt}\right)^2\right] = V - E \tag{3.7}$$

Καταλήγουμε στην εξίσωση για τα ηλεκτρονικά μονοπάτια:

$$\frac{d^2z}{dx^2} = \frac{1+\left(\frac{dz}{dx}\right)^2}{2(V-E)}\left(\frac{\partial V}{\partial z} - \frac{dz}{dx}\frac{\partial V}{\partial x}\right) \tag{3.8}$$

Η διαφορική αυτή εξίσωση (3.8) ολοκληρώνεται αριθμητικά εντός της απαγορευμένης περιοχής: Επιλέγουμε ένα σημείο πάνω στην επιφάνεια του εκπομπού, το οποίο είναι το αρχικό σημείο (x_0,z_0), και η κλίση του μονοπατιού dz/dx στο σημείο αυτό καθορίζεται τέτοια ώστε να είναι κάθετο στην επιφάνεια του εκπομπού (βάσει της μεθόδου WKB τα μονοπάτια εισέρχονται και εξέρχονται κάθετα στην απαγορευμένη περιοχή). Με αυτές τις αρχικές συνθήκες ολοκληρώνουμε την (3.8) μέχρι τα όρια της απαγορευμένης περιοχής, υπολογίζοντας το ηλεκτρονικό μονοπάτι. Τέλος, υπολογίζουμε το συντελεστή διέλευσης που αντιστοιχεί στο δεδομένο μονοπάτι με βάση το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα (1.48).

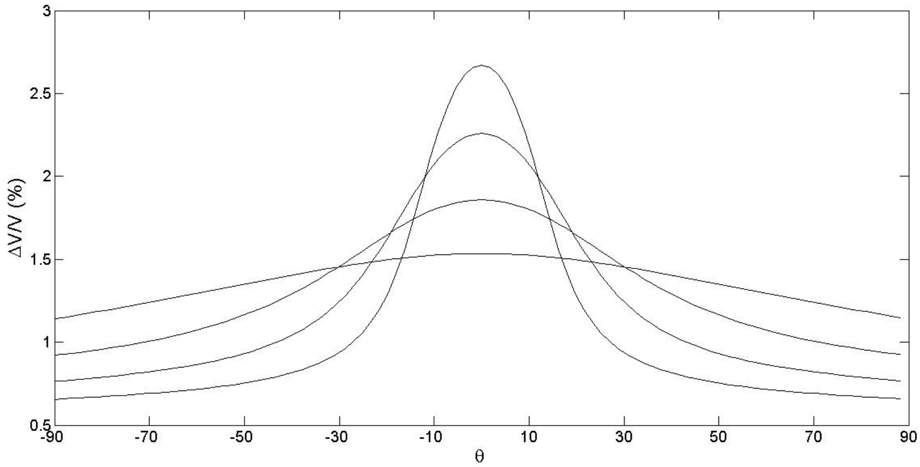
Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται για διαφορετικά αρχικά σημεία, κινούμενοι από την κορυφή προς τις πλευρές του εκπομπού και έτσι παίρνουμε τη χωρική κατανομή του συντελεστή διέλευσης, καθώς κάθε διαφορετικό μονοπάτι αντιστοιχεί σε διαφορετικό σημείο του χώρου από όπου λαμβάνεται ρεύμα εκπομπής πεδίου.

3.4. Αποτελέσματα

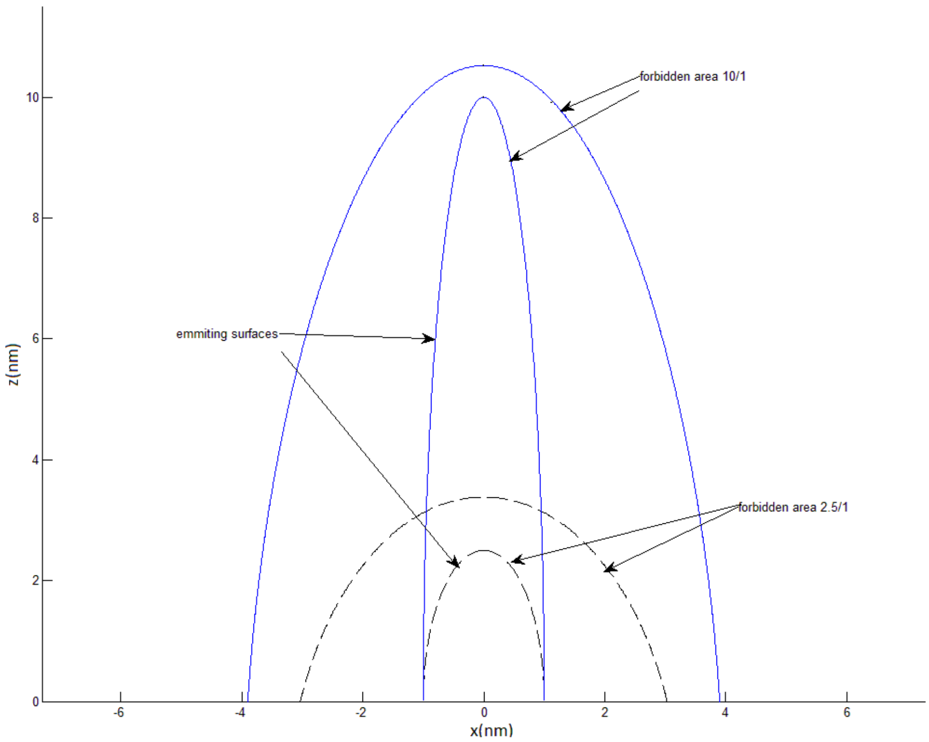
Σε όλους τους υπολογισμούς που έλαβαν χώρα, η μικρή ακτίνα των ελλειψοειδών λαμβάνεται σταθερή και ίση με $R_1=1nm$. Η μεγάλη ακτίνα μεταβάλλεται, έτσι ώστε να δούμε τις διαφοροποιήσεις των αποτελεσμάτων καθώς μεταβάλλεται η αιχμηρότητα του εκπομπού, την οποία θα μπορούσαμε να ορίσουμε ως το λόγο $S=R_2/R_1$. Συνεπώς εκτελούμε υπολογισμούς για 4 διαφορετικές τιμές της μεγάλης ακτίνας, άρα και της αιχμηρότητας: $R_2=1.25,2.5,5,10nm$. Επίσης εκτελούμε υπολογισμούς για διάφορες τιμές του ύψους της ακίδας $h=300,600,900,1200nm$, ενώ η απόσταση διαχωρισμού ανόδου-καθόδου διατηρείται σταθερή $H=1\mu m$. Σε μία σταθερή εφαρμοζόμενη τάση ανόδου-καθόδου V_{appl}, το τοπικό πεδίο κοντά στην αιχμή του εκπομπού είναι χοντρικά ανάλογο του h και του V_{appl}. Κάτι τέτοιο παρατηρήθηκε στους υπολογισμούς μας: αν αλλάζοντας το ύψος h της ακίδας μεταβάλλουμε ταυτόχρονα την εφαρμοζόμενη τάση έτσι ώστε το τοπικό πεδίο να μείνει σταθερό, τότε δεν παρατηρείται ουσιαστική διαφοροποίηση στα αποτελέσματα για τη χωρική κατανομή της εκπεμπόμενης δέσμης. Η κατανομή αυτή εξαρτάται πρακτικά μόνο από τη μορφή του πεδίου κοντά στην αιχμή του εκπομπού, η οποία με τη σειρά της εξαρτάται από την παράμετρο αιχμηρότητας S. Συνεπώς εδώ θα παρουσιαστούν αποτελέσματα μόνο για ύψος $h=900nm$.

Ακόμα και από τη μορφή που παίρνει το υπολογισμένο με τη μέθοδο που περιγράφηκε στην παράγραφο 3.2 δυναμικό, μπορεί κανείς να δει ότι προβλέπεται μεγαλύτερη συγκέντρωση της εκπεμπόμενης δέσμης όσο αυξάνεται η αιχμηρότητα S. Στο σχήμα 3.2 αναπαριστάται το υπολογισμένο δυναμικό U, γύρω από τον εκπομπό. Ο κατακόρυφος άξονας αντιπροσωπεύει την ποσοστιαία πτώση τάσης σε σχέση με την επιφάνεια του εκπομπού σε απόσταση $0.1R_1$ συναρτήσει της σφαιρικής γωνιακής απόκλισης θ από τον άξονα της ακίδας. Οι 4 καμπύλες αντιστοιχούν στις 4 διαφορετικές αιχμηρότητες $S=1.25,2.5,5,10$.

Μπορεί να φανεί ολοκάθαρα ότι όσο αυξάνει το S η πτώση τάσης μετατρέπεται από σχεδόν ανεξάρτητη της γωνίας θ, σε εξαιρετικά κατευθυντική προς τον άξονα z. Το γεγονός αυτός αντικατοπτρίζεται επίσης και στη μορφή που παίρνει η κλασσικά απαγορευμένη περιοχή για τις 2 ακραίες περιπτώσεις αιχμηρότητας στο σχήμα 3.3. Βλέπουμε ότι στην περίπτωση της σχεδόν σφαιρικής ακίδας, το μήκος της απαγορευμένης περιοχής είναι σχεδόν σταθερό γύρω από τον εκπομπό. Αντίθετα στην περίπτωση της αιχμηρής ακίδας, όσο απομακρυνόμαστε από τον άξονά *z* βλέπουμε ότι αυξάνεται σημαντικά το μήκος της απαγορευμένης περιοχής. Συνεπώς όσο απομακρυνόμαστε από την κορυφή μειώνεται γρήγορα ο συντελεστής διέλευσης, μιας και το μήκος ολοκλήρωσης στην (1.45) γίνεται μεγαλύτερο. Να επισημανθεί ότι ακόμα και μία μικρή αύξηση στο μήκος ολοκλήρωσης οδηγεί σε μεγάλη μείωση του συντελεστή διέλευσης λόγω της εκθετικής σχέσης που τα συνδέει.



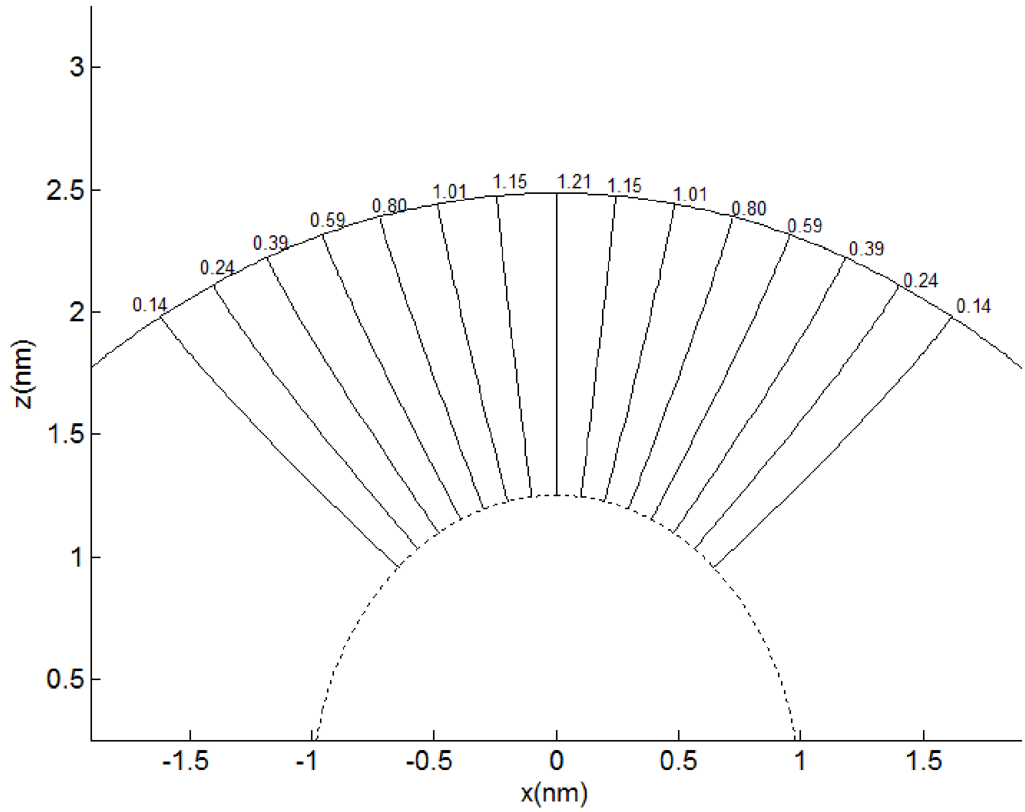
Σχήμα 3.2: *Η εξάρτηση της ποσοστιαίας πτώσης δυναμικού σε απόσταση 0,1R_1 από τη γωνιακή απόκλιση από τον κατακόρυφο άξονα. Οι διαφορετικές καμπύλες αντιστοιχούν σε διαφορετική τιμή της αιχμηρότητας της ακίδας.*



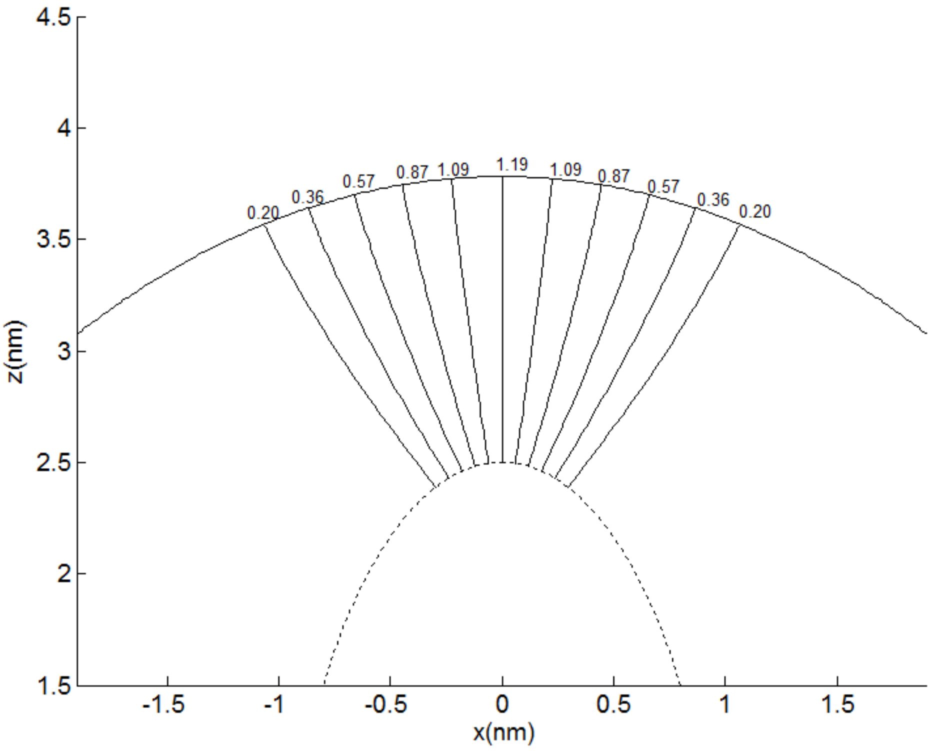
Σχήμα 3.3: Η *μορφή της απαγορευμένης περιοχής για 2 διαφορετικές τιμές της αιχμηρότητας*

Τα στοιχεία που αναφέρθηκαν παραπάνω μπορούν να θεωρηθούν αναμενόμενα από τη μορφή και μόνο του υπολογιζόμενου δυναμικού. Μπορούν όμως να φανούν πιο ξεκάθαρα αν δούμε τη μορφή που παίρνουν τα ηλεκτρονικά μονοπάτια καθώς επίσης και οι αντίστοιχοι συντελεστές διέλευσης στα σχήματα 3.4a-d. Είναι ευκρινής η μείωση της περιοχής εκπομπής όσο αυξάνει η αιχμηρότητα.

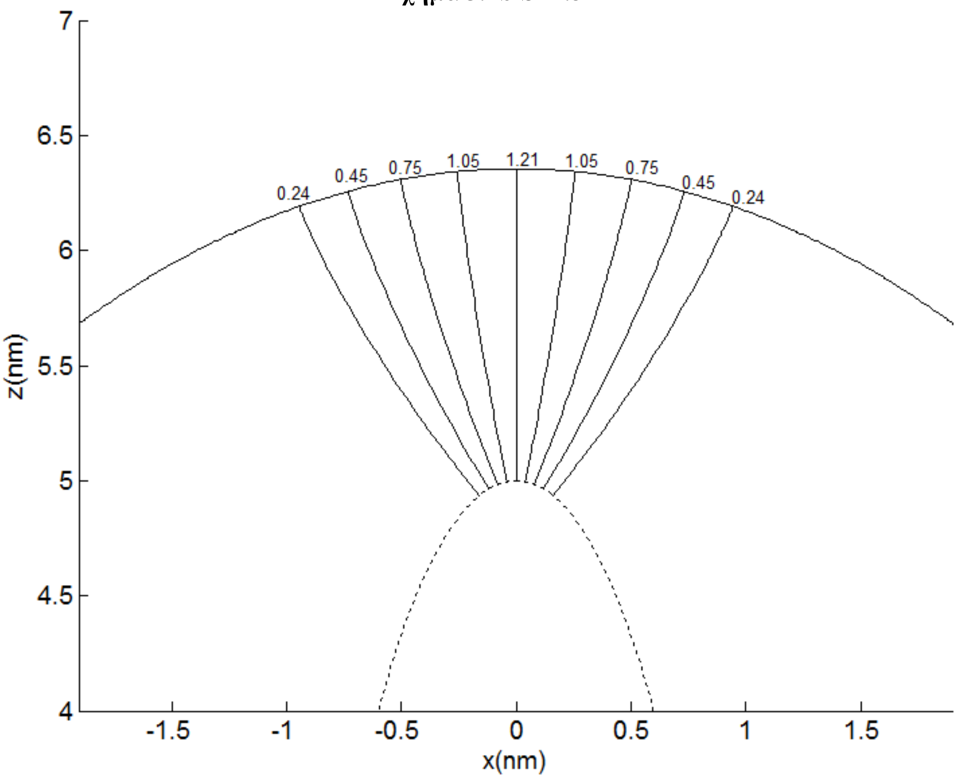
Μπορούμε επίσης από τα σχήματα αυτά να παρατηρήσουμε ένα ακόμη γεγονός: τα μονοπάτια καμπυλώνουν προς τον κατακόρυφο άξονα όλο και περισσότερο όσο αυξάνει η αιχμηρότητα. Το γεγονός αυτό, σε συνδυασμό με τη μείωση της περιοχής εκπομπής, οδηγεί στο συμπέρασμα ότι όσο αυξάνει η αιχμηρότητα της ακίδας, παρατηρείται μία εγγενής τάση της δέσμης να συγκλίνει προς τον κατακόρυφα άξονα και να γίνεται στενότερη. Τα φαινόμενα αυτά δεν θα μπορούσαν να παρατηρηθούν αν δεν χρησιμοποιούσαμε ελλειπτικό γεωμετρικό μοντέλο για την ακίδα και τρισδιάστατη προσέγγιση WKB.



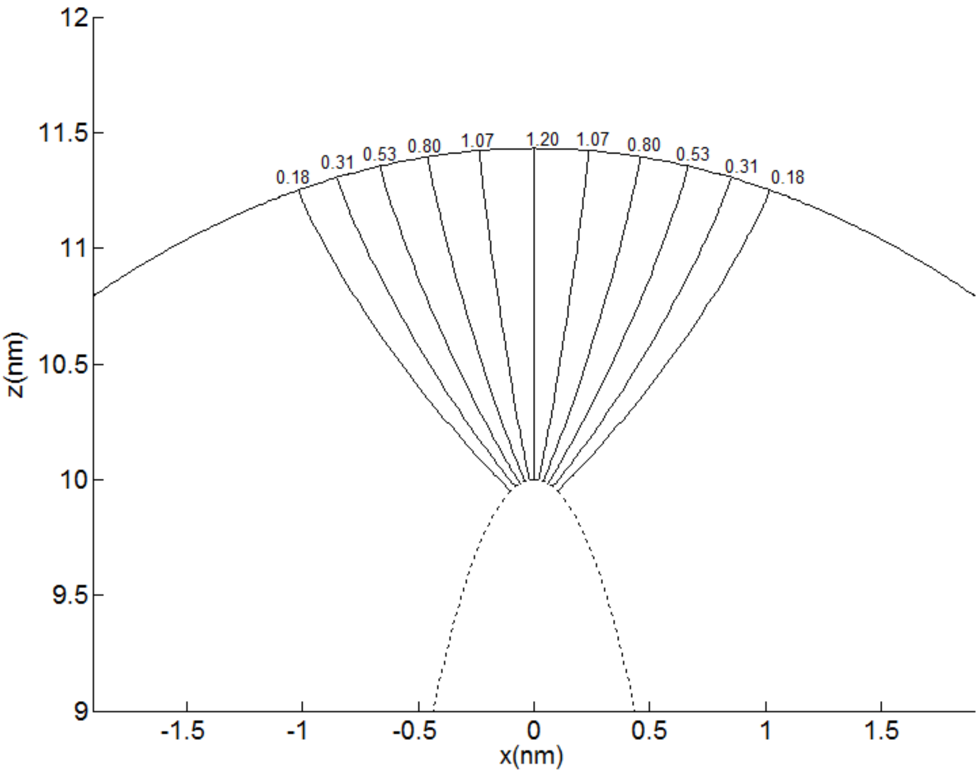
Σχήμα 3.3a S=1.25



Σχήμα 3.4b S=2.5



Σχήμα 3.4c S=5

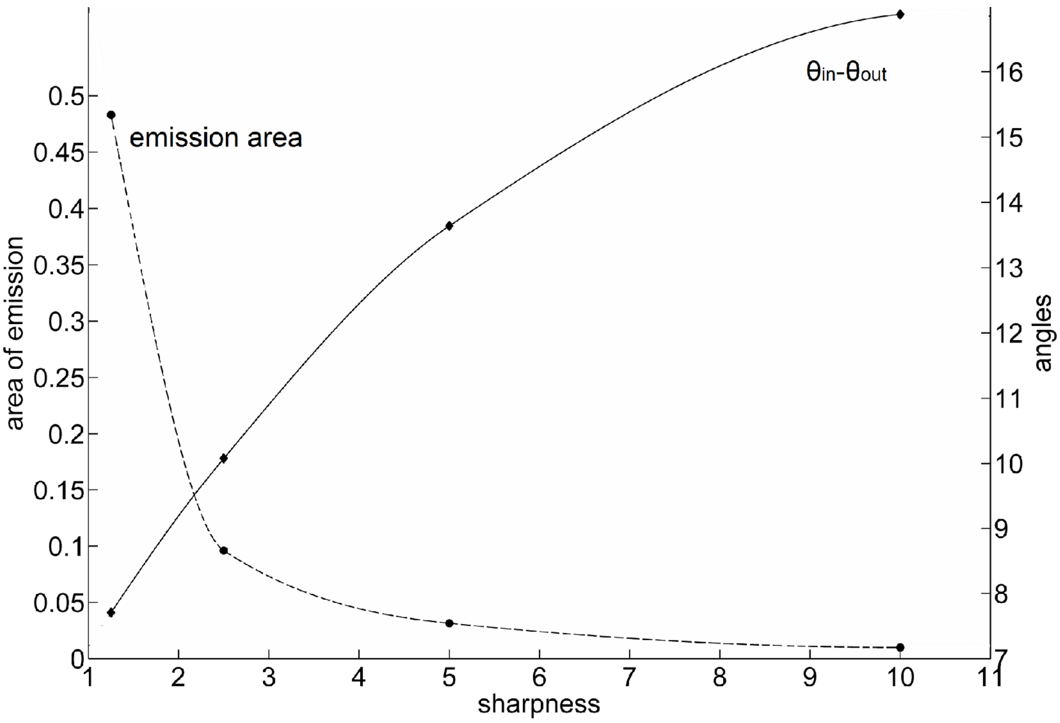


Σχήμα 3.4d S=10

Σχήμα 3.4: *Τα ηλεκτρονικά μονοπάτια και οι αντίστοιχοι συντελεστές διέλευσης για τις 4 περιπτώσεις αιχμηρότητας.*

Ας ορίσουμε όμως με ακρίβεια τι θεωρούμε περιοχή εκπομπής. Το κριτήριο που θα θέσουμε για το όριο της περιοχής από την οποία γίνεται επί της ουσίας η εκπομπή, θα είναι το σημείο για το οποίο ο συντελεστής διέλευσης μειώνεται στο μισό σε σχέση με τη μέγιστη τιμή του, η οποία προφανώς είναι στον κατακόρυφο άξονα. Δηλαδή σε γωνία θ_{FWHM} όπου ισχύει $T(\theta_{FWHM})=T(0)/2$ (κριτήριο Full-Width-Half-Maximum). Η περιοχή εκπομπής ορίζεται ως το εμβαδόν A της επιφάνειας του εκπομπού που ορίζεται μεταξύ του κατακόρυφου άξονα και της γωνίας θ_{FWHM}.

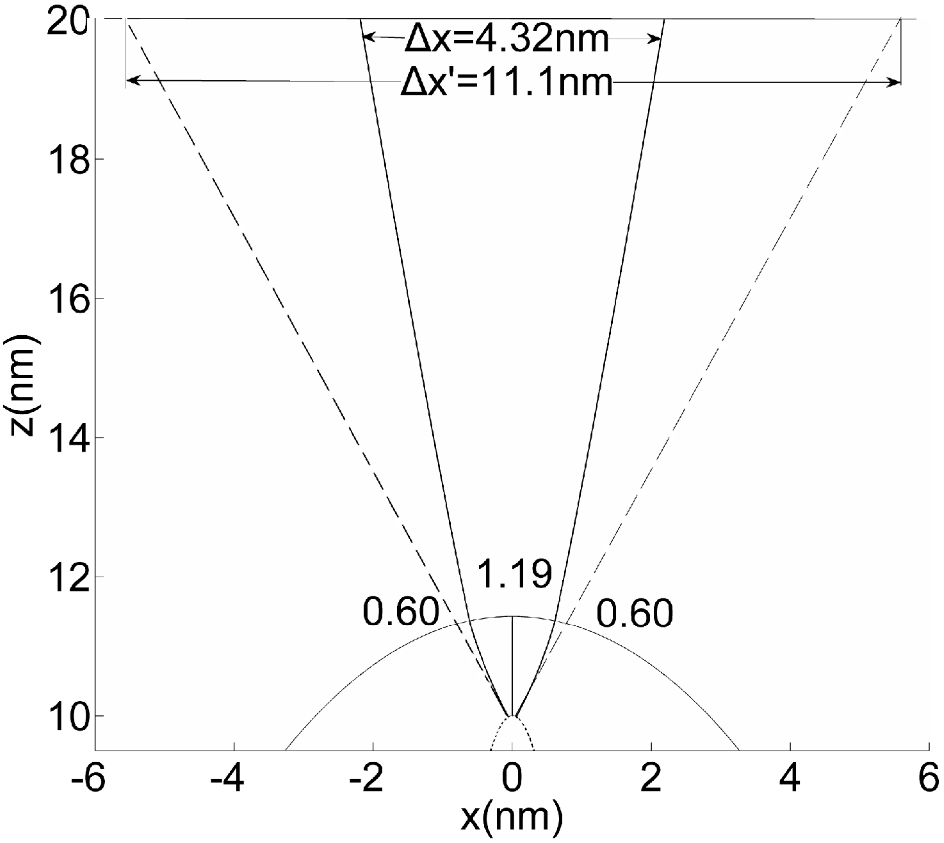
Η εξάρτηση της περιοχής εκπομπής από την αιχμηρότητα της ακίδας φαίνεται στο σχήμα 3.5. Μπορούμε να δούμε ότι όταν S=10 η περιοχή εκπομπής είναι 40 φορές μικρότερη σε σχέση με την σχεδόν σφαιρική περίπτωση του S=1.25.



Σχήμα 3.5: *Εξάρτηση της περιοχής εκπομπής όπως επίσης και της καμπύλωσης των ηλεκτρονικών μονοπατιών (εκφρασμένη ως η διαφορά των γωνιών κατεύθυνσης εισόδου και εξόδου) από την αιχμηρότητα της ακίδας εκπομπής.*

Μία άλλη σημαντική ποσότητα που θα ορίσουμε είναι η γωνία κατεύθυνσης του μονοπατιού. Αν σε δεδομένο σημείο του μονοπατιού φέρουμε την εφαπτομένη του, η γωνία κατεύθυνσης είναι η γωνία που σχηματίζει η εφαπτομένη με τον κατακόρυφο άξονα z. Βάσει των σχέσεων 1.45-1.46, η κατεύθυνση του μονοπατιού ταυτίζεται με την κατεύθυνση του ρεύματος, συνεπώς η γωνία κατεύθυνσης δείχνει την απόκλιση που έχει το διάνυσμα της πυκνότητας ρεύματος σε σχέση με τον κατακόρυφο άξονα. Τα δύο σημαντικότερα σημεία για τη γωνία κατεύθυνσης είναι στην είσοδο και στην έξοδο της απαγορευμένης περιοχής (θ_{in} και θ_{out} αντίστοιχα). Η διαφορά τους θ_{in}-θ_{out} αποτελεί ένα μέτρο για την καμπύλωση του μονοπατιού. Στο σχήμα 3.5 μπορούμε επίσης να δούμε την εξάρτηση της καμπύλωσης του μονοπατιού από την αιχμηρότητα της ακίδας. Βλέπουμε ότι η καμπύλωση αυξάνει σημαντικά όσο αυξάνει και η αιχμηρότητα της ακίδας.

Το πόσο σημαντική είναι αυτή η καμπύλωση του ηλεκτρονικού μονοπατιού για τη μείωση της διατομής της δέσμης φαίνεται ξεκάθαρα στο σχήμα 3.6. Η ευθεία γραμμή δείχνει τη συνέχιση του μονοπατιού-ορίου FWHM και έξω από την απαγορευμένη περιοχή βάσει της κλασσικής εξίσωσης Newton. Η διακεκομμένες ευθείες δείχνουν τη συνέχεια του μονοπατιού σε ευθεία γραμμή με βάσει την κλίση εκκίνησης από τον εκπομπό. Βλέπουμε ότι η ύπαρξη της καμπύλωσης μειώνει σχεδόν στο 1/3 το πλάτος της διατομής της δέσμης σε απόσταση 10nm από τον εκπομπό.



Σχήμα 3.6: *Εύρος ηλεκτρονικής δέσμης μακριά από τον εκπομπό για S=10, όπως υπολογίζεται από την 3Δ WKB (ευθεία γραμμή) και όπως θα υπολογιζόταν από ευθεία μονοπάτια (διακεκομμένη γραμμή)*

Βλέπουμε επίσης ότι η διατομή της δέσμης είναι πολύ μικρότερη από αυτή που προβλέπει η κλασσική θεωρία της παραγράφου 2.3, ενώ η διακριτική ικανότητα του NFESEM που θα προβλεπόταν με βάσει το μοντέλο που αναπτύξαμε θα είναι πολύ μικρότερη (της τάξης των 6-8nm) και πολύ πλησιέστερη στην πειραματικά παρατηρούμενη.

3.5. Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό αναπτύξαμε ένα νέο μοντέλο για την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων, το οποίο προσομοιώνει την ακίδα εκπομπής ως μία στοίβα ελλειψοειδών. Το γεωμετρικό αυτό μοντέλο επιτυγχάνει να προσομοιώσει την αιχμηρότητα των ακίδων που χρησιμοποιούνται ως εκπομποί. Το γεγονός αυτό, σε συνδυασμό με τη χρήση της τρισδιάστατης μεθόδου WKB (δηλαδή καμπυλωμένων ηλεκτρονικών μονοπατιών) οδηγεί σε πρόβλεψη πολύ στενότερης δέσμης εκπομπής, γεγονός που εξηγεί σε ικανοποιητικό βαθμό την διακριτική ικανότητα μίας πρόσφατα ανεπτυγμένης διάταξης ηλεκτρονικής μικροσκοπίας, του NFESEM, η οποία ήταν ασύμφωνη με την κλασσική θεωρία εκπομπής πεδίου του κεφαλαίου 2.

Βιβλιογραφία

[1] A. Kyritsakis, G.C. Kokkorakis, J.P. Xanthakis, T.L. Kirk, and D. Pescia. *Appl. Phys. Lett*. 97: 023104 (2010)
[2] Siegfried Flugge. *Practical quantum mechanics*, Springer, Berlin. (1971)
[3] A.P. French, Edwin F. Taylor. *Introduction to quantum physics*, W.W.Norton & Company, New York. (1978)
[4] L. Eyges. *The classical electromagnetic field*, Dover, New York. (1980)
[5] D. Cocolicchio and M. Viggiano, *International Journal of Theoretical Physics*, 36: 12, (1997)
[6] B. Das and J. Mahanty. *Phys. Rev. B*, 36:898-903 (1987)
[7] R.H. Fowler and L. Nordheim. *Proc. R. Soc. A,* 119: 173–181 (1928)
[8] R.G. Forbes. *Surf. Interface Anal*. 36: 395–401 (2004)
[9] R.G. Forbes. *J. Vac. Sci. Tech. B*, 17: 534 (1999)
[10] C.J. Edgcombe. *Phys. Rev. B,* 72: 045420 (2005)
[11] C.J. Edgcombe and N. de Jonge. *Phys. D: Appl. Phys.* 40: 4123–4128 (2007)
[12] S. Podenok, M. Sveningsson, K. Hansen and E.E.B. Campbell, *Nano* 1:87–93 (2006)
[13] T.L. Kirk, *Ph.D. Thesis*, ETH Zurich (2010)
[14] T.L. Kirk, U. Ramsperger and D. Pescia, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 27: 152 (2009)
[15] T.L. Kirk, L.G. De Pietro, D. Pescia, and U. Ramsperger, *Ultramicroscopy* 109: 463 (2009)
[16] T.L. Kirk, O. Scholder, L.G. De Pietro, U. Ramsperger, and D. Pescia.*Appl. Phys. Lett*. 94: 153502 (2009)