

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

**ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ, ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΔΙΑΤΑΞΕΩΝ**

Διδακτορική Διατριβή

***Σύγχρονη Θεωρία Εκπομπής Ηλεκτρονίων από Νανομετρικές Ακίδες υπό Ισχυρό
Ηλεκτρικό Πεδίο – Εφαρμογή στην Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Εγγύς Πεδίου***

Ανδρέας Τ. Χατζηαφράτης



Αθήνα, Ιούλιος 2020

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

Διδακτορική Διατριβή

*Σύγχρονη Θεωρία Εκπομπής Ηλεκτρονίων από Νανομετρικές Ακίδες υπό Ισχυρό
Ηλεκτρικό Πεδίο – Εφαρμογή στην Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Εγγύς Πεδίου*

Ανδρέας Τ. Χατζηαφράτης

Συμβουλευτική Επιτροπή: Ιωάννης Ξανθάκης (επιβλέπων)

Ηλίας Γλύτσης

Δημήτριος Τσαμάκης

Εγκρίθηκε από την επταμελή εξεταστική επιτροπή την 28^η Ιουλίου 2020.

ΟΝΟΜΑΤΕΠΩΝΥΜΟ	ΒΑΘΜΙΑ
1. ΞΑΝΘΑΚΗΣ ΙΩΑΝΝΗΣ	ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ
2. ΓΛΥΤΣΗΣ ΗΛΙΑΣ	ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ
3. ΡΟΥΜΕΛΙΩΤΗΣ ΙΩΑΝΝΗΣ	ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ
4. ΦΙΚΙΩΡΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ	ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ
5. ΤΣΟΥΚΑΛΑΣ ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ	ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ
6. ΧΡΙΣΤΟΦΟΡΟΥ ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ	ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ
7. ΧΑΡΑΛΑΜΠΟΠΟΥΛΟΣ ΑΝΤΩΝΙΟΣ	ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ

Ανδρέας Τ. Χατζηαφράτης
Διδάκτωρ Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Ανδρέας Τ. Χατζηαφράτης, 2020.
Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

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

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

NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS

SCHOOL OF ELECTRICAL AND COMPUTER ENGINEERING

DIVISION OF ELECTROMAGNETICS, ELECTROOPTICS AND ELECTRONIC
MATERIALS

PhD Thesis

*A Modern Theory for the Emission of Electrons from Ultrasharp Nanometric Metal
Tips in Intense Electric Fields – Application to the Lateral Resolution of the Near-
Field-Emission Scanning Electron Microscope*

by Andreas T. Chatziafratis

(MEng, MSc)

Submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of

Doctor of Philosophy in Electrical Engineering

Doctoral Advisor: Professor John P. Xanthakis



Athens, July 2020

Περίληψη Ερευνητικής Πρότασης, Μεθοδολογίας και Αποτελεσμάτων

Στη διατριβή αυτή αναπτύσσουμε μια σύγχρονη θεωρία για την περιγραφή του φαινομένου της εκπομπής ηλεκτρονίων από εξαιρετικά αιχμηρές μεταλλικές ακίδες υπό την επίδραση επιβαλλόμενου εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου. Έναυσμα για την εργασία μας αποτέλεσε το γεγονός ότι η εξέλιξη της θεωρίας πεδιακής εκπομπής από την αρχική της μορφή (Fowler-Nordheim) είχε μέχρι πρόσφατα εστιάσει στη μελέτη του συντελεστή διάδοσης των ηλεκτρονίων μέσα από το εξωτερικό φράγμα δυναμικού χάρη στο κβαντομηχανικό φαινόμενο σήραγγος. Όσον αφορά την παροχή ηλεκτρονίων, δηλαδή την προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος στην εσωτερική επιφάνεια του εκπομπού από τον όγκο του μετάλλου, ακόμα και πρόσφατες θεωρίες υποθέτουν μια σταθερή τιμή που προκύπτει από την παραδοχή ότι οι ηλεκτρονικές καταστάσεις στην περιοχή της αιχμής του εκπομπού περιγράφονται από επίπεδα κύματα. Ωστόσο, είχε παρατηρηθεί στη σύγχρονη βιβλιογραφία ότι αυτή η υπόθεση είναι αμφίβολη για ακίδες με ακτίνα καμπυλότητας στην νανοκλίμακα (1-5nm), των οποίων η παρασκευή είναι σήμερα πλέον εφικτή χάρη στις μοντέρνες εργαστηριακές τεχνικές. Επιπλέον κίνητρο αποτέλεσε η απόκλιση των προβλέψεων της παραδοσιακής θεωρίας από πειραματικά ευρήματα σχετικά με την πλευρική ακρίβεια (ανάλυση) του νέου είδους ηλεκτρονικού μικροσκοπίου κοντινού πεδίου NFESEM.

Το μοντέλο μας ξεκάνει από αναλυτική κβαντομηχανική μελέτη των ενεργειακών ηλεκτρονικών καταστάσεων στο εσωτερικό του εκπομπού στα πλαίσια κατάλληλης γεωμετρίας και προχωράει στον υπολογισμό εκπεμπόμενων τρισδιάστατων ηλεκτρονικών ρευμάτων μετά από συμπερίληψη των αντίστοιχων εξωτερικών ηλεκτροστατικών χαρακτηριστικών του συστήματος. Μελετώνται ιδιότητες όπως η έντονη κβαντοποίηση και η κατανομή ταχυτήτων των ηλεκτρονίων στην κορυφή του νανοσκοπικού εκπομπού, γίνεται σύγκριση με την παραδοσιακή jwkb προσέγγιση του προβλήματος επίπεδων εκπομπών, παρατηρούνται ιδιαιτερότητες της εκπομπής σε υψηλές καμπυλότητες της μεταλλικής επιφάνειας της τάξης του 1nm και ερμηνεύονται, μέσω τόσο του μοντέλου όσο και προσομοίωσης, πειραματικά ευρήματα σχετικά με την πλευρική ανάλυση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου εγγύς πεδίου.

Πιο συγκεκριμένα, στο πρώτο στάδιο των ερευνών μας, προκειμένου να προσδιορίσουμε τις ηλεκτρονικές ιδιοκαταστάσεις και την προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος (μεγέθη απαραίτητα για τη μελέτη της τελικής εκπομπής) καθώς και την ταχύτητα των ηλεκτρονίων την παράλληλη προς την επιφάνεια της ακίδας ακριβώς πριν την εκπομπή τους από το μέταλλο (μέγεθος που καθορίζει την ανάλυση του nfeem), θεωρήσαμε ένα αιχμηρό κβαντικό πηγάδι (που αντιπροσωπεύει μέταλλο ή νανοσωλήνας άνθρακα) σε τρισδιάστατες παραβολικές συντεταγμένες εκ περιστροφής. Καταφέραμε να επιλύσουμε αναλυτικά την εξίσωση schroedinger, της οποίας οι ακριβείς λύσεις είναι οι λεγόμενες ειδικές συναρτήσεις whittaker, αποκτώντας έτσι τις ιδιοκαταστάσεις του εκπομπού. Στη συνέχεια θεωρήσαμε μια άνοδο (δείγμα) σε κοντινή απόσταση από την κορυφή της ακίδας και επιλύσαμε την εξίσωση Laplace για τον προσδιορισμό της τρισδιάστατης κατανομής του ηλεκτροστατικού πεδίου στο χώρο έξω από αυτή. Χρησιμοποιώντας το πεδίο αυτό καθώς και το δυναμικό ειδώλου που αντιστοιχεί σε παραβολική μεταλλική επιφάνεια, υπολογίσαμε, μέσω μιας υβριδικής, τρισδιάστατης μεθόδου τύπου JWKB (Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin), το συντελεστή διέλευσης ηλεκτρονίων μέσα από το σχηματιζόμενο φράγμα δυναμικού και, κατ' επέκταση, προσδιορίστηκε το εκπεμπόμενο ρεύμα. Στο δεύτερο αυτό στάδιο της εργασίας μας (πλήρες

πρόβλημα πεδιακής εκπομπής) χρησιμοποιούνται τα αποτελέσματα της προηγούμενης φάσης διότι οι ιδιοκαταστάσεις του μετάλλου και η παράλληλη ταχύτητα των ηλεκτρονίων στην έξοδο τους από αυτό δεν αλλάζει με την επιβολή του εξωτερικού πεδίου καθώς τα ηλεκτροστατικά πεδία αφενός δε διεισδύουν στα μέταλλα αφετέρου οι ηλεκτρικές δυναμικές γραμμές είναι κάθετες σε κάθε σημείο της μεταλλικής επιφάνειας. Σημαντικές διαφορές σε σχέση με τη συνήθη καρτεσιανή γεωμετρία της παραδοσιακής θεωρίας παρατηρηθήκαν και παρουσιάζονται στη διατριβή αυτή.

Περίληπτικά, τα κυρία ευρήματα μας περιλαμβάνουν τα εξής: (1) τόσο η προσπίπτουσα κάθετα όσο και η παράλληλη ηλεκτρονική ροή στην εσωτερική επιφάνεια της ακίδας είναι συναρτήσεις της γωνίας ως προς τον άξονα συμμετρίας του συστήματος και καθορίζουν τη γωνία εκπομπής. (2) η μονοδιάστατη wkb μέθοδος αποτυγχάνει για το κβαντικό πηγάδι καθώς η εφαρμογή της οδηγεί σε εκθετικά μειούμενα κύματα που αντιστοιχούν σε κλασικά απαγορευμένη περιοχή μέσα στο μέταλλο δηλαδή δίνει αφύσικες λύσεις. Αυτό οφείλεται σε όρους ενεργών (effective) δυναμικών που εμφανίζονται στις διαχωρισμένες μονοδιάστατες εξισώσεις. Οι οροί αυτοί παρουσιάζουν ιδιόμορφα σημεία στον άξονα και στην κορυφή του πηγαιδιού με συνέπεια να μεταβάλλονται ταχέα στην περιοχή της αιχμής της ακίδας παραβιάζοντας έτσι τη συνθήκη εγκυρότητας της μεθόδου. (3) οι ιδιοσυναρτήσεις του νανο-εκπομπου εμφανίζουν ισχυρή κβαντοποίηση: πλήρης διακριτοποίηση παρατηρείται στις δυο συνιστώσες της λύσης λόγω γωνιακής περιοδικότητας (αξιμουθιακή συμμετρία) και της εξαιρετικά μικρής ακτίνας καμπυλότητας ενώ ένα σχεδόν συνεχές φάσμα σχηματίζεται ως προς την τρίτη διάσταση λόγω του σχετικά μεγάλου μήκους της ακίδας. Μόνο οι πρώτες τιμές των κβαντικών αριθμών σε κάθε ενεργειακό επίπεδο κοντά στη στάθμη $fermi$ έχουν σημαντική συνεισφορά στο εκπεμπόμενο ρεύμα καθώς οι επόμενες ιδιοκαταστάσεις περιλαμβάνουν ηλεκτρονική στροφορμή εις βάρος της εγκάρσιας ηλεκτρονικής πρόσπτωσης (για δεδομένη συνολική ενεργεία) έχοντας έτσι μικρότερη κατά τάξεις μεγέθους πιθανότητα εκπομπής. (4) η παράλληλη προς τη μεταλλική επιφάνεια ταχύτητα ηλεκτρονίων μηδενίζεται στην κορυφή της ακίδας οδηγώντας στην επιτυχή θεωρητική ερμηνεία πειραματικών ευρημάτων όσον αφορά το εύρος ίχνους δέσμης στο δείγμα του nfe_{sem} δηλαδή την απεικονιστική ευκρίνεια του πρωτότυπου οργάνου. (5) αντιμαχόμενες συμπεριφορές βρεθήκαν ανάμεσα στο τοπικά ενισχυόμενο ηλεκτρικό πεδίο (που καθορίζει την πιθανότητα διάδοσης μέσα από το φράγμα) στην αιχμηρή κορυφή του εκπομπου και στην κάθετα προσπίπτουσα παροχή ηλεκτρονίων (που είναι διαθέσιμη για εκπομπή) καθώς η ακτίνα καμπυλότητας της ακίδας συρρικνώνεται, γεγονός που σημαίνει ότι ίσως υπάρχει μια βέλτιστη τιμή ακτίνας όσον αφορά τα χαρακτηριστικά εκπομπής. (6) το εύρος του φράγματος δυναμικού υπό σταθερό τοπικό πεδίο αυξάνει καθώς μικραίνει η ακτίνα. Αυτό συνεπάγεται μικρότερη πιθανότητα εκπομπής δηλαδή χαμηλότερο ρεύμα. (7) η εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος είναι συνάρτηση της γωνίας με τον άξονα και οι τιμές της είναι περίπου μια τάξη μεγέθους μικρότερες σε σύγκριση με το συνηθισμένο μοντέλο που χρησιμοποιεί το σφαιρικό δυναμικό ειδώλου. (8) τα διαγράμματα $f-n$ που προκύπτουν παρουσιάζουν καμπύλωση που γίνεται εντονότερη καθώς η ακίδα γίνεται πιο αιχμηρή. Αυτό το φαινόμενο έχει συνέπειες (σφάλματα) στον πειραματικό χαρακτηρισμό ιδιοτήτων νάνο-εκπομπών με βάση παραδοσιακές ρουτίνες που στηρίζονται στην υπόθεση ότι τα εν λόγω διαγράμματα είναι ευθύγραμμα. (9) σε μια πρόσφατη προσπάθεια σύνδεσης της νέας θεωρίας με το πείραμα, παρουσιάστηκαν συντελεστές διόρθωσης -για διάφορα r - με τους οποίους πρέπει να πολλαπλασιαστούν πειραματικά ευρήματα (βασισμένα στην κλασική θεωρία) ώστε να αποφευχθούν σημαντικά σφάλματα.

Λέξεις Κλειδιά

σύγχρονη θεωρία πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων από μεταλλικές νανο-ακίδες σε ισχυρά ηλεκτρικά πεδία

συνάρτηση ηλεκτρονικής παροχής και παράλληλη ταχύτητα ηλεκτρονίων σε αιχμηρές μεταλλικές νανο-ακίδες

τριδιάστατο φαινόμενο κβαντικής σήραγγος και καμπυλωμένα ηλεκτρονικά μονοπάτια

φαινόμενα εξαιρετικής κβαντικής διακριτοποίησης σε ατομικά αιχμηρούς νανο-εκπομπούς

μαθηματική μοντελοποίηση από θεμελιώδεις αρχές και θεωρητική ερμηνεία πειραματικών ευρημάτων

In all chaos there is a cosmos, in all disorder a secret order

-Carl Jung

We live on an island of knowledge surrounded by a sea of ignorance: both expand together

-John Wheeler

..με τί καρδιά με τί πνοή, τί πόθους και τί πάθος, πήραμε τη ζωή μας λάθος κι αλλάξαμε ζωή..

-Giorgos Seferis

The real voyage of discovery is not in seeking new places but in seeing with new eyes

-Marcel Proust

I was taught that the way of progress was neither swift nor easy

-Marie Skłodowska Curie

Short Summary

Motivation for our work has stemmed from the fact that the progress in field emission theory from its original Fowler–Nordheim (FN) form is focused on the transmission coefficient or penetration factor of quantum tunneling through a potential barrier. For the incident supply of electrons impinging on the internal surface of emitter tips, advanced theories still assume the constant value due to a supply of plane-waves states. However, it has been observed in the literature that for emitting tips of apical radius of curvature R in the range 1–5nm, which are achievable with modern fabrication techniques, this is highly questionable.

To address this issue, we assumed such a sharp quantum well (standing for metal or carbon nanotubes within the Sommerfeld model) in rotationally parabolic coordinates and exactly solved Schrödinger’s equation, which gives rise to the Whittaker wavefunctions, hence obtaining the exact eigenstates of the system. We then assumed a nearby sample (anode), solved exactly Laplace’s equation to find the electric field in three-dimensional (3D) space and used a hybrid three-dimensional Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin (JWKB) method with a parabolic image charge to calculate the emitted current of such nanoscale systems, which are employed nowadays in state-of-the-art nanotechnologies.

Significant differences from the usual Cartesian geometry are noticed and the relevant field emission quantities are shown to exhibit a non-FN behavior. Highlights of our findings include: (1) Both the normally incident and parallel electron fluxes are functions of the angle to the emitter axis and affect the emission angle. (2) The WKB approximation fails for this system. (3) The eigenfunctions of the nanoemitter form a continuum only in one dimension while complete discretization occurs in the other two directions. (4) the parallel, to tip surface, electron velocity vanishes at the emitter’s apex which partly explains the recent measurements of the beam spot-size, and therefore the imaging precision or resolution, of the newly developed Near Field Emission Scanning Electron Microscope (NFESEM). (5) Competing effects are found, between locally enhanced fields and current densities, as the tip radius decreases down to 1nm: The electric field increases but the total supply function decreases so that an optimum radius must exist. (6) Transmitted current density of such an emitter is a function of angle of emission θ and R . (7) The angular dependence is different from that of the classical model of a hemisphere on a post. (8) The resulting Fowler-Nordheim plots appear to be non-straight which impacts parameters extraction in laboratory studies.

A MODERN THEORY FOR THE EMISSION OF ELECTRONS FROM ULTRASHARP NANOMETRIC (radius < 5nm) METAL TIPS IN INTENSE ELECTRIC FIELDS

Extended Summary of Proposal, Methodology and Findings

Andreas Chatziafratis and John P. Xanthakis

School of Electrical & Computer Engineering, National Technical University of Athens

*“..the best theory is inspired by practice and
the best practice is inspired by theory..”*

-Donald Knuth

Field Emission (FE) is the emission of electrons induced by intense electric fields (typically >1 V/nm) usually from metallic surfaces with a sharp tip. It was observed and studied by both experimentalists and theorists, like Thomson, Oppenheimer and Millikan, already since the 19th century. Fowler and Nordheim succeeded in explaining the phenomenon in 1928 assuming a parallel-plate configuration. Their theory was based on the free-electron model of Sommerfeld and the -then recently discovered- quantum mechanical tools including the tunneling effect. Their theory (FN) thus corresponds to an exact triangular barrier stemming from the superposition of the work function and a linear applied field.

After the middle of the 20th century, Murphy and Good included an image charge potential term (corresponding to a planar metallic surface) which is a quantum mechanical necessity representing the interaction of emitted electrons with those within the surface states of the tip. They produced a FN-type formula for the current density which includes correction factors compared to the original FN equation. Edgcombe later developed an extension to the traditional FN theory assuming a hemispherical tip on a cylindrical or conical post and utilizing the one-dimensional emission theory for each adjacent plane tangential to the emitter's surface.

Very recently, Kyritsakis and Xanthakis (KX) further generalized the FN theory for radii R of curvature down to 5nm, successfully explaining/ interpreting experimental findings at the nanoscale. They included the 2nd term of the Taylor expansion of the potential around an arbitrary symmetrical emitter geometry, in addition to the traditional linear term, and the spherical image charge. This term is inversely proportional to R thus becoming more significant as R drops. For $R < 5\text{nm}$ more Taylor terms are necessary to describe accurately the emission properties.

Regarding the applications of FE, these include, for example, lithography and spectroscopy. In our project we are rather focused on emitter characterization and electron microscopy. In particular, our theory relates to the prototypical mode of microscopy called Near-Field-Emission Scanning Electron Microscopy (SEM) which has been recently developed at ETH, Switzerland. This type of SEM has no

electromagnetic lens system and, instead, is based on the self-focusing effect of Low Energy Electrons (LEEs) emitted typically at a distance $d = 5\text{-}25\text{nm}$ from the anode. This novel instrument has both size and cost advantages compared to more traditional configurations. At such small distances between cathode and sample, the lateral resolution is essentially determined by the beam spot at the anode which, in turn, depends crucially on R , bias V and d .

The main properties of electron beams one is generally interested in are intensity and width. As far as emitters characterization is concerned, usually the material work functions, the tip's radius of curvature, the apex field enhancement factor, the angle of emission and the effective area of emission are sought. Traditional experimental routines for finding these quantities are based on the hypothesis of straight FN plots. However, as has been found, this is not the case in modern FE systems. At extremely small values of R we expect severe localization effects (quantum confinement).

From a practical point of view, the theory developed in this thesis finds application in interpreting experimental findings regarding the spot size (lateral resolution) of the NFESM: this has been found to be approximately equal to 3nm at $d=9\text{nm}$, as measured at the location of abrupt monoatomic steps occurring at gold particles on a substrate sample. The traditional one-dimensional theory predicted 17nm while the KX derived an estimate of about 4.5nm , which is clearly very close to the reality. With the present updated theory, we can do a little better.

A central tool in the FE theory has invariantly been the JWKB method of finding approximate solutions to linear ODEs with variable coefficients. It has been used for decades for the Schroedinger equation in Quantum Mechanics and Field Emission theory for determining electronic wavefunctions, the tunneling transmission coefficient (barrier penetration factor) and electron eigenstates through the Bohr-Sommerfeld quantization condition. The error of this technique in tunneling problems depends on how slowly the potential term varies in space: faster variations yield greater errors. The method breaks down near the classical turning points where the particle's energy equals the potential and appropriate connection formulae are needed in order to produce smooth wavefunctions in the whole domain of the problem.

In traditional setups where the radius of curvature is much larger than the tunneling length (invariably $0.5\text{-}2.5\text{ nm}$), the tunneling problem is effectively one-dimensional with the emission process being almost planar and electron paths within the barrier being nearly straight lines. This is no longer true for modern, ultra-sharp emitters which cause the three-dimensional potential distribution around them to have a lateral structure with significant consequences for the emission properties. The extension of the WKB scheme to three-dimensional tunneling problems was done by Kapur & Peierls and Das & Mahanty who used tools from Calculus of Variations and the Least Action Principle to prove that electron tunneling occurs along the most probable paths which are generally curved in space and enter as well as exit the barrier transversely i.e. normally to its surface.

The subject of the present thesis is not just a tunneling problem but this thesis is an attempt to determine the distribution in space of the electronic density, both inside and outside the emitter. It is theoretical work based on *ab initio* (from first principles)

modeling and simulation, but we had continuous and valuable input and feedback from our collaborators. In the 1st stage, to obtain the incident (at the surface, impinging from inside) normal and parallel fluxes we need to solve Schrödinger's equation. Based on TEM images of real emitters, we decided to use the 3D parabolic coordinates as the most representative geometrical form to carry out the modeling (Fig.1). This an orthogonal coordinate system by revolution with azimuthal symmetry.

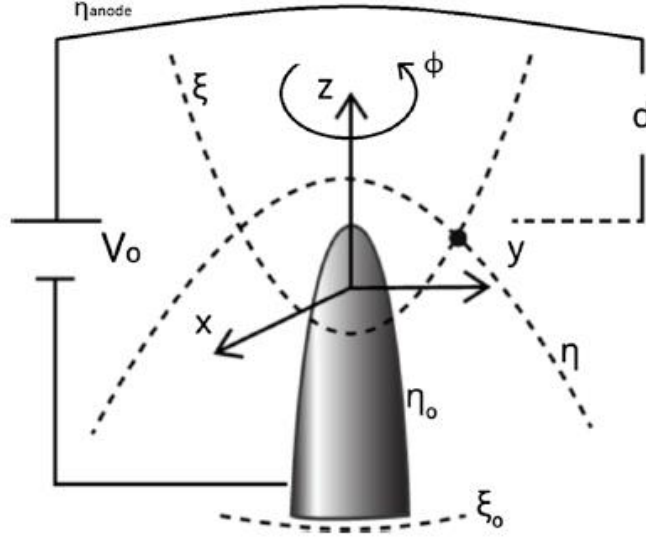


Figure 1. System geometry and configuration. Three-dimensional parabolic coordinates were used for modelling the emitter which was electrically connected to an anode for the simulation of the emission process.

After a series of changes of variables and of functions and analytical manipulations, we succeeded in solving the Schroedinger equation for the closed box (quantum well) system thus determining the actual form of the exact wavefunction solutions. The various quantum numbers (m, n, E) that arise can be determined by the use of the vanishing boundary conditions at the surface of the emitter. In particular, m has to take on integer values due to angular periodicity of the wavefunctions.

Regarding the calculation of the other two quantum numbers of the emitter we have two options available: either use the exact solutions or the traditional WKB (or Bohr-Sommerfeld) quantization condition. During our investigations, both alternatives were examined and compared. It turned out that WKB values become unreliable as n increases and hence unreliable functions will result. More specifically, the semiclassical approach gives real exponentials (instead of exponentials of imaginary argument) which decrease with η and ξ near the apex of the emitter, i.e. it does not give propagating waves in the whole domain of the emitter. This is probably due to the fact that the separated one-dimensional differential equations contain *effective potential* terms (due to curvilinear coordinates) that are not corresponding to real metal bulk (which is a quantum well) and also vary rapidly in space (hence, break the wkb validity condition).

The total probability current densities in both the η and ξ directions are zero because we are dealing with a closed quantum box (as is also the case with the closed rectangular

box) and the incident and reflected waves must cancel out. We must, therefore, decompose the component of the wave function which is associated with the η -direction (Ψ_η) in incident and reflected parts. The incident one is candidate for emission (a tiny portion of it) when we apply external bias field (tentatively, the work function is treated here as an infinite wall from electrons perspective but in reality it is a finite work function that stands for the wall, but the states are not very different i.e. merely a perturbation).

Assuming a realistic tip length much larger than $R=1\text{nm}$, we find, as anticipated, a quasicontinuous E-spectrum (corresponding to large ξ) and complete discretization in the other two dimensions (ϕ and η). Based on the calculated normally incident current density, we deduce that only the first set of quantum numbers yield a non-negligible contribution to the field emission properties we are interested in. This is both expected by physical sense and has a simple qualitative interpretation: at constant total energy, as m increases, the energy (angular momentum) in the lateral ϕ direction increases and hence the energy left in the normal η direction decreases

The derived parallel velocity, which has been used for the lower solid line in fig.2, is significantly smaller than the traditional value calculated by Gomer in his classical textbook on Field Emission, which is usually quoted in the literature and has been used for the upper solid line in fig.2. It is evident, hence, that the lower solid line gives a correct interpretation of experimental data.

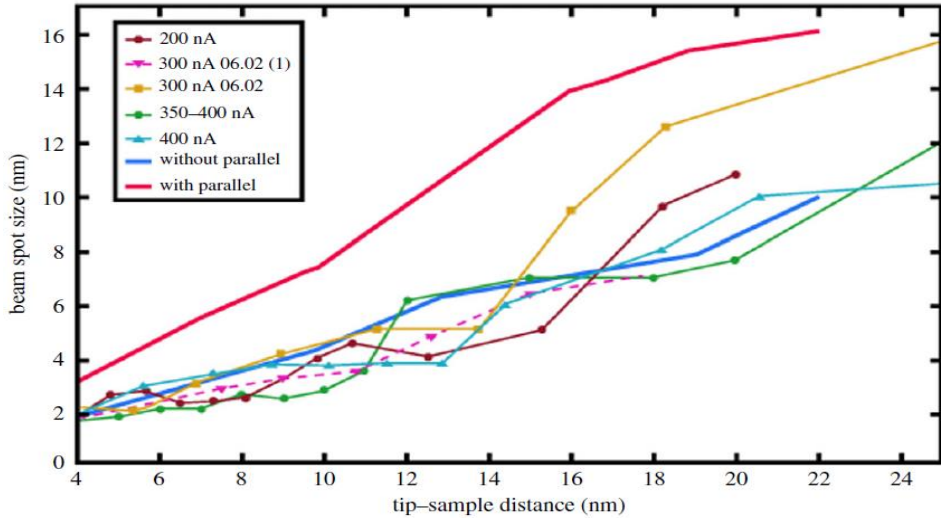


Figure 2. Beam spot diameter at the anode of the NFESEM as a function of the emitter-sample separation. Dotted lines correspond to experimental findings of the ETH group, while solid lines resulted from three-dimensional calculations both with the traditional parallel velocity of the literature (red) and without it (blue) as predicted by the new theory. Excellent agreement is evident between our theory and experiment.

Within effective mass theory—what we have calculated are the envelop functions of the real wavefunctions which (envelops) are dictated by geometry and quantization effects. In effect, the ‘lack of space to move’ near the apex area will impose its restriction on what the Bloch states would otherwise give on a large planar surface.

In addition, we found that an unlimited decrease of R is not necessarily beneficial for field emission and possibly an optimum R exists: as the radius R decreases, the electric field F increases, thereby increasing the transmission coefficient, but the supply of electrons decreases. If the increase in the transmission coefficient is much greater than the drop of the supply there will be no optimum but, on the other hand, if the drop of the supply is fast enough, then there will be one.

Now, as for the “full problem” of emission under an external bias, our calculated parallel velocity inside the tip will also be the parallel velocity on exit after tunneling. When an electric field is applied to the tip and electrons begin to tunnel out, the tangential velocity will be preserved (the electrostatic potential is normal to the surface). This brings us to the 2nd stage of our treatment.

We have assumed an anode at a typical distance $d \sim 20R$ in order to determine the emitted current density from such a nanotip as the product of the supply current density and a transmission function, with the aim of making better contact with experiment at such small radii of emitters. As mentioned, no significant change inside the tip will appear in this stage (very small perturbations): the results of our previous section are relevant here because the application of an external electric field does not change the supply function, electric fields do not enter metals if applied from a distance

The Laplace equation is analytically solvable exactly under the realistic assumption that anode is slightly curved and lies on a η -surface coordinate. It turns out that in our configuration the exact Potential is a function of only the η coordinate. On top of the macroscopic field, a paraboloid image potential is necessary here due to the shape of our emitter. As the emitted electron waves propagate along η -surfaces outside the tip, the integration has been performed, as a good first approximation, along the ξ -coordinate lines (perpendicular to the η ones).

We observed that, as the tip radius R gets smaller, the extent of the barrier increases. This is not the first time this result appears. It has previously been observed by KX and has been attributed to a second-order term in a Taylor expansion of the tunneling potential which becomes important as the tip radius becomes small. This behavior is the main cause for the ordering -in terms of R - of the FN plots, which we derived.

The angular dependence presents a typical behavior. Compared to the standard model of the hemisphere on a post, the angular dependence is practically the same. The transmission coefficient $T(\theta)$ falls to half its maximum value at an angle of $\theta = 0.3$ - 0.35 rad. Nevertheless, we noticed an increase of the transmission coefficient by roughly one order of magnitude due to the difference in the corresponding barrier profiles which determine the transmission coefficient and hence the emitted current in each case.

The whole current seems to be emanated from an angle of about $0.3 \text{ rad} = 17$ degrees either side to the normal. However, the most striking characteristic is the fact that the maximum does not occur at $\theta = 0$ but at an angle $\theta \sim 0.2 \text{ rad} = 11$ degrees at either side of the vertical tip axis. This is entirely due to the angular variation of the incident current density (which exhibits a minimum at $\theta = 0$) and is in no way related to the properties of the barrier

Our calculated FN plots (fig.3) are not straight and, therefore, typical routines that are employed to extract material or other information from the FN plots are not directly applicable here. Curvature in FN plots is not a new feature but in the case of emitters of larger radii -when observed- it has been attributed to the series resistance of the experimental setup, space charge effects and arrays containing emitters of different tip geometries. Here it becomes clear that this characteristic is rather due to the non-planar field emission process and to a certain extent to the use of the appropriate supply function and not the constant supply function of the FN theory

Traditionally, the FN plots from high R emitters have been used to obtain information such as the enhancement factor by looking at the slope of the straight FN lines and, more recently, at the curvature of the plot to obtain R. A constant supply function was always assumed. It is not clear to us how this procedure can be repeated here when the supply function is not constant. It is expected that in the future we could use our results to approximate this non-linear FN plot with an approximate supply function which would be constant in space but dependent on the radius R of the emitter.

In a recent attempt to connect our theory with experiment and make it easily accessible by applying it to experimental FN plots, we presented correction factors that rectify the slope of the original FN equation for the emitted current as a function of known R, compensating for the quantum confinement effects of high apical curvature. These practical-interest correction factors -due to curvature effects- are derived from exact analytical calculations for electron quantum states inside such a nanoscale emitter tip. If experimental FN plots were obtained and the traditional FN equation were employed in order to derive W, then the error could be a multiplicative factor of anything between 2 and 3 depending on R (fig.3). Such a multiplicative factor for the work-function is astonishing. A seminal simple table for such correction factors (namely, for each R, the ratio of the mean -linearized- slope over the traditional FN slope) has been announced at the recent *International Vacuum Nanoelectronics Conference 2020*.

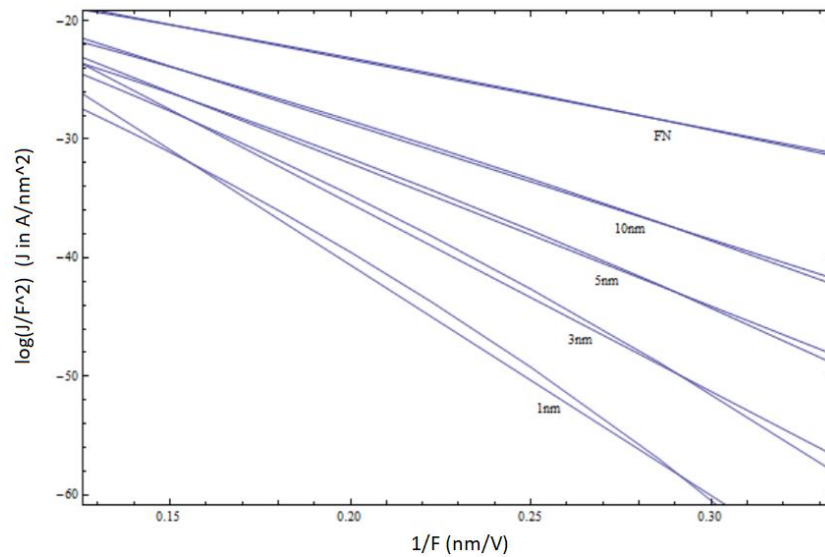


Figure 3. Fowler-Nordheim plots obtained via our first-principles theory for several values of the radius of curvature together with their linearized versions. These can be used to amend the slope predicted by the traditional FN theory in order to experimentally derive emitter characteristics in modern nanoscale configurations.

In short summary overall, in this thesis, we develop a modern theory of electronic emission from ultrasharp metal tips in intense electric fields. Motivation for our work has stemmed from the fact that the progress in field emission theory from its original Fowler–Nordheim (FN) form is focused on the transmission coefficient or penetration factor of quantum tunneling through a potential barrier. For the incident supply of electrons impinging on the internal surface of emitter tips, advanced theories still assume the constant value which is due to a supply of plane-waves states and derived using simple cartesian coordinates. However, it has been observed by both numerical and experimental studies in the literature that for emitting tips of apical radius of curvature R in the range 1–5nm, which are achievable with modern fabrication techniques, this is highly questionable. To address this issue in this thesis, we assumed such a sharp quantum well (standing for a metallic or carbon-nanotube tip within the Sommerfeld model) in rotationally parabolic coordinates and exactly solved Schrödinger’s equation, which gives rise to the Whittaker wavefunctions, hence obtaining the exact eigenstates of the system. We then assumed a nearby sample (anode), solved exactly Laplace’s equation to find the electric field in three-dimensional (3D) space and used a hybrid three-dimensional Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin (JWKB) method with a parabolic image charge to calculate the emitted current of such nanoscale systems, which are employed nowadays in state-of-the-art nanotechnologies. Significant differences from the usual Cartesian geometry are noticed and reported here while the relevant field emission quantities are shown to exhibit a non-FN behavior. Highlights of our findings include: (1) Both the normally incident and parallel electron fluxes are functions of the angle to the emitter axis and affect the emission angle. (2) The WKB approximation fails for this system. (3) The eigenfunctions of the nanoemitter form a continuum only in one dimension while complete discretization occurs in the other two directions. (4) the parallel, to tip surface, electron velocity vanishes (both analytically and graphically through numerical calculations) at the emitter’s apex which partly explains the recent measurements of the NFESEM beam spot-size, and therefore the imaging precision or resolution, of the newly developed Near Field Emission Scanning Electron Microscope (NFESEM). (5) Competing effects are found, between locally enhanced fields and current densities, as the tip radius decreases down to 1nm: The electric field increases but the total supply function decreases so that an optimum radius must exist. (6) Transmitted current density of such an emitter is a function of angle of emission θ and R . (7) The angular dependence is different from that of the classical model of a hemisphere on a post. (8) The resulting Fowler-Nordheim plots appear to be non-straight which impacts parameters extraction in laboratory studies. (9) Practical-interest correction factors were derived from exact analytical calculations for electron quantum states inside a nanoscale emitter tip and may be used in order to avoid serious errata -due to curvature effects- upon estimating experimental parameters via the classical theory of field emission.

The findings of our research have been gradually presented in an array of scientific Meetings and international Conferences:

- SIMDALEE2 consortium periodic meetings

- International Semiconductor Devices Research Symposium (ISDRS) 2016, Washington DC, USA
- International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC) 2017, Regensburg, Germany
- Microscience Microscopy Congress (MMC) 2017, Manchester, UK
- Sources, Interaction with Matter, Detection and Analysis of Low Energy Electrons (SIMDALEE) 2017, Sardinia, Italy
- International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC) 2018, Kyoto, Japan
- International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC) 2020, Lyon, France

Our publications in peer-reviewed Journals include:

- Chatziafratis A., Fikioris G. and Xanthakis J.P., “*Exact eigenstates of a nanometric paraboloidal emitter*”, *Proceedings of the Royal Society A* (2018).
- Chatziafratis A. and Xanthakis J.P., “*Field emission from a nanometric paraboloidal emitter*”, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* (2019).
- Chatziafratis A. and Xanthakis J.P., “*Correction factors for field emission from a nanoscopic emitter based on ab initio calculation of the electron eigenstates*”. *Proceedings of the International Vacuum Nanoelectronics Conference, IEEE Xplore Digital Library* (2020)

I am grateful to All members of the Marie Curie Innovative Training Network *SIMDALEE2* -Sources, Interaction with Matter, Detection and Analysis of Low-Energy Electrons- of the European Commission (EC FP7 ITN 606988) for constant support, valuable scientific discussions and feedback, during the project, as well as for the amusing times we have had at the meetings of the consortium. I feel extremely happy and fortunate for having made so many wonderful new colleagues, fellow researchers as well as friends. Special thanks go to Mr. Ernst-Dieter Janotka and Prof. Wolfgang Werner for plentiful and precious help all along the way. I would like to express again here my gratitude to my advisor and mentor Prof. John P. Xanthakis. I again thank my Professors at NTUA as well as Prof. Antonis Modinos and Dr. Cosmas Zachos for useful discussions. In addition, I am deeply thankful to Prof. Danilo Pescia and his group at ETH Zuerich for generously providing experimental information, Prof. Mehmet Erbudak and Prof Oguzhan Gurlu for their kind characters, advice and for intriguing scientific discussions as well. I also specially thank Dr. Christopher Edgcombe and his group for inviting me for a very warm and inspiring secondment within the Thin-Film Magnetism group at the Cavendish Laboratory, University of Cambridge. Last but not least, I cannot omit to extend my thanks to Dr. Maja Remskar of the Jozef Stefan Institute (IJS) and Dr. Rafal Dunin-Borkowski of the Juelich Research Centre (FZJ) for their kindness as well as for their enthusiastic willingness to host me for secondments within their groups, even though the short timeframe of the project sadly did not allow us to fulfill this desirable objective. Wishfully, we might have again the opportunity to collaborate closely in the near future!

Keywords

atomically sharp nanotip / nanometric emitter / nanoscopic electron gun
electron beam spot-size / self-focusing effect
nanoscale electronic supply function and vanishing parallel velocity at tip's apex
lateral resolution of the near-field-emission scanning electron microscope
updated theory of field emission of electrons in intense electric fields
nonlinear / curved Fowler – Nordheim plots
applied mathematics
quantum physics / quantum well
three-dimensional Schrödinger equation in parabolic coordinates
exact electron eigenstates
Sommerfeld model
theoretical explanation / interpretation of experimental findings
parabolic image charge potential
scale-invariance effect
ab initio mathematical modelling and simulation
boundary-values problems
Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) approximation method collapse
Laplace equation in three-dimensional parabolic coordinates
FN-plots' slope correction factors due to curvature effects
extreme nanoscale quantization / quantum confinement effects
Whittaker wavefunctions / Coulomb special functions / confluent hypergeometric eq.
3D quantum tunneling of electrons effect / curved electronic tunneling paths
3D transmission coefficient / penetration probability in several dimensions
ultrasharp metallic nanoemitters (apical radius of curvature $< 5\text{nm}$)
nanotechnology / nanoscience

Ευχαριστίες

Δράττομαι της ευκαιρίας αυτής για να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Ιωάννη Π. Ξανθάκη για τα πολύ ενδιαφέροντα ερευνητικά θέματα στα οποία είχα την τύχη να με εισαγάγει και να με μυήσει, για τη συνεχή επιστημονική καθοδήγησή του και συνεργασία όλα αυτά τα χρόνια και συνολικά για όλη την επιστημονική, ηθική και υλική υποστήριξη που μου παρείχε, οδηγώντας με στο πέρας του διδακτορικού μου με επιτυχία. Επιπλέον, για την αισιοδοξία και ευθυμία που διαρκώς εκπέμπει καθώς και για την εμπύχωση, την έμπνευση, την κατανόηση και τις συμβουλές του στις πιο δύσκολες συγκυρίες. Πάντα θαυμάζω τη φυσική του διαίσθηση στα επιστημονικά ζητήματα αλλά και την αυτοπεποίθηση και την ψυχραιμία του υπό συνθήκες πίεσης χρόνου και φόρτου εργασίας.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους καθηγητές μου στο Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, ιδιαίτερα τους: κ. Ι. Βομβορίδη, κ. Δ. Γκιντίδη, κ. Η. Γλύτση, κ. Γ. Ματσόπουλο, κ. Ι. Ρουμελιώτη, κ. Ι. Τσαλαμέγκα, κ. Δ. Τσαμάκη, κ. Δ. Τσουκαλά, κ. Γ. Φικιώρη, κ. Α. Χαραλαμπίοπουλο, κ. Κ. Χιτζανίδη και κ. Ε. Χριστοφόρου, για τις πολύ χρήσιμες γνώσεις που μου μετέδωσαν κατά τη διάρκεια προχωρημένων μεταπτυχιακών μαθημάτων και διαφωτιστικών επιστημονικών συζητήσεων που είχαμε σε διάφορα στάδια της ερευνητικής μου προσπάθειας. Γενικότερα, τους ευχαριστώ για όλη την ευγενική στήριξη και βοήθειά τους προς εμένα αλλά και για το γεγονός ότι ήταν πάντα διαθέσιμοι κάθε φορά που τους χρειαζόμουν.

Ευχαριστώ τους συναδέλφους μου Διδάκτορες ΕΜΠ: κ. Ι. Βάλβη, κ. Α. Γκίλη, κ. Π. Ζεστανάκη, κ. Γ. Ζούρο, κ. Γ. Κοκκοράκη, κ. Α. Κυριτσάκη και κ. Μ. Τσαγκαράκη, για συμβουλές και καθοδήγηση όταν χρειάστηκα.

Δεν ξεχνάω ποτέ την πολύτιμη βοήθεια του αγαπητού προσωπικού της Γραμματείας της σχολής ΗΜΜΥ ΕΜΠ που μονίμως προσπαθεί πρόθυμα να διευκολύνει όσο είναι δυνατό τους υποψήφιους διδάκτορες της σχολής όσον αφορά τα απαιτητικά γραφειοκρατικά ζητήματα καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών τους. Χωρίς την ευγενική και ανθρώπινη συνεισφορά τους όλα θα ήταν πολύ πιο δύσκολα.

Ευχαριστώ, ακόμη, για τη συνεχή υποστήριξή τους, τις αγαπητές Γραμματείς του Τομέα Ηλεκτρομαγνητικών Εφαρμογών, Ηλεκτροοπτικής και Ηλεκτρονικών Διατάξεων της Σχολής Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Βεβαίως, ευχαριστώ και το εξάίρετο προσωπικό της κεντρικής Βιβλιοθήκης ΕΜΠ αλλά και της Βιβλιοθήκης ΗΜΜΥ ΕΜΠ για κάθε ευγενική εξυπηρέτηση.

Επιπλέον, ευχαριστώ τον επιστήθιο φίλο μου κ. Χατούπη Σωτήρη, για χρήσιμες συμβουλές, όπως και το στενό φιλικό μου περίγυρο που με περιβάλλει με αγάπη και τα κάνει όλα να μοιάζουν πιο εύκολα μέσω ευχάριστων διαλειμμάτων.

Φυσικά, τέλος, οφείλω να ευχαριστήσω πολύ, όπως πάντα, τους γονείς μου, Άννα-Μαρία και Τηλέμαχο, και τον αδερφό μου Ευάγγελο (Vaggos) για όλα όσα κάνουν αδιάκοπα για εμένα.

Περιεχόμενα

Περίληψη.....	7
Extended Summary.....	15
1. Ιστορική αναδρομή.....	31
1.1 Εισαγωγικά σχόλια	
1.2 Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων - Ιστορικά στοιχεία	
1.3 Παραδοσιακές θεωρίες πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων	
1.3.1 Θεωρία Fowler-Nordheim	
1.3.2 Θεωρία Murphy-Good	
1.4 Συντελεστής ενίσχυσης τοπικού πεδίου στην αιχμή ακίδων	
1.5 Ηλεκτρονική Μικροσκοπία	
1.6 Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου	
2. Υπάρχουσες θεωρίες πεδιακής εκπομπής.....	57
2.1 Ημικλασική προσέγγιση – Μέθοδος Wentzel-Kramers-Brillouin	
2.2 Near-Field-Emission Scanning Electron Microscope (NFESM)	
2.2.1. Πλευρική ανάλυση (lateral resolution) – Θεωρία αυτό-εστίασης δέσμης (self-focusing effect)	
2.3 Απόκλιση της πεδιακής εκπομπής από νανομετρικές ακίδες από τη Fowler-Nordheim θεωρία	
2.4 Θεωρία σφαιρικών εκπομπών	
2.5 Αναλλοίωτο κλίμακος (scale invariance effect)	
2.6 Γενικευμένη FN-τύπου θεωρία εκπομπής πεδίου	
2.7 Συμπεράσματα	
2.8 Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου	

3. Ηλεκτρονικές ιδιοκαταστάσεις νανοσκοπικών παραβολοειδών ακίδων.....103

- 3.1 Εισαγωγή
- 3.2 Μεθοδολογία
- 3.3 Αποτελέσματα
- 3.4 Συμπεράσματα
- 3.5 Αναφορές κεφαλαίου

4. Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από πολύ αιχμηρές μεταλλικές ακίδες.....123

- 4.1 Αποτελέσματα της σύγχρονης θεωρίας εκπομπής
 - 4.1.1 Εισαγωγή
 - 4.1.2 Μεθοδολογία
 - 4.1.3 Αποτελέσματα
 - 4.1.4 Συμπεράσματα
- 4.2 Συντελεστές διόρθωσης – Σύνδεση με το πείραμα
- 4.3 Αναφορές κεφαλαίου

Παράρτημα I Προσδιορισμός της σταθεράς ηλεκτρονικής παροχής της θεωρίας FN

Παράρτημα II Ημικλασική προσέγγιση – Μέθοδος JWKB

*The highest form of understanding we can achieve are laughter and human
compassion*

-Richard Feynman

Luck is the residue of design

-Branch Rickey

Give yourself a chance to get lucky

-Stamatios Krimigis

1^ο Κεφάλαιο

1.1 Εισαγωγικά σχόλια

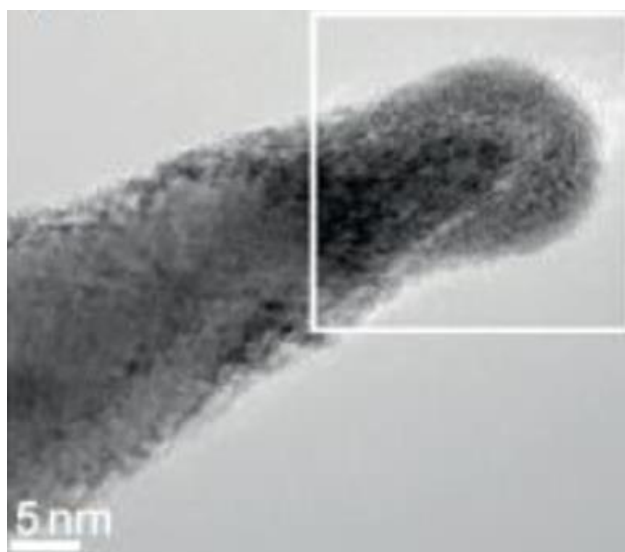
Το φαινόμενο της ψυχρής πεδιακής εκπομπής (cold field-assisted emission of electrons) ηλεκτρονίων βρίσκει εφαρμογές σε πληθώρα τεχνολογιών όπως τρανζίστορ, μικροσκοπία, λιθογραφία, πηγές ακτινοβολίας κ.α. όπου απαιτείται η παροχή ηλεκτρονίων και διάδοσή τους μέσα από ένα φράγμα δυναμικού (potential barrier). Καθώς οι εφαρμογές απαιτούν ολοένα και πιο υψηλές πυκνότητες ρεύματος με χαμηλές εφαρμοζόμενες τάσεις, παραδοσιακά η σμίκρυνση των διαστάσεων εξασφαλίζει βελτίωση του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου στην άκρη αιχμηρών αγωγών, το οποίο με τη σειρά του συνεισφέρει στην «ευκολότερη» εξαγωγή ηλεκτρονίων. Παρά το γεγονός, ωστόσο, ότι οι διαστάσεις των σύγχρονων ηλεκτρονικών συσκευών είναι στο επίπεδο της νάνο-κλίμακας και η λειτουργία τους επηρεάζεται ή και καθορίζεται από ανάλογα κβαντικά φαινόμενα, η ανάλυση των πειραματικών δεδομένων βασίζεται εν πολλοίς σε μοντέλα που υποθέτουν εκπομπή από μακροσκοπικά, επίπεδα μέταλλα. Πληθώρα ερευνητών, στην προσπάθειά τους να επεκτείνουν τη θεωρία ώστε να περιορισθεί η απόκλιση των πειραματικών δεδομένων εκπομπής σύγχρονων διατάξεων από την παραδοσιακή θεωρία, έχουν εστιάσει τις μελέτες τους στο ηλεκτροστατικό πρόβλημα καθώς και σε εκείνο (κβαντομηχανικό) της διάδοσης μέσω του φράγματος (tunneling effect), δηλαδή αποκλειστικά έξω από το μεταλλικό εκπομπό ηλεκτρονίων. Κάτι που σαφώς έχει παραμεληθεί στη βιβλιογραφία είναι η μελέτη του τί συμβαίνει στο εσωτερικό πολύ καμπυλωμένων εκπομπών και η ενοποίηση ενός τέτοιου μοντέλου με τα προαναφερθέντα κεκτημένα.

Παρά τα άλματα που έχουν σημειωθεί στην τεχνολογική πρόοδο, η θεωρία και μοντελοποίηση της ψυχρής εκπομπής πεδίου δεν έχουν ακολουθήσει ανάλογα. Η παραδοσιακή θεωρία (των Fowler και Nordheim) ακόμη χρησιμοποιείται λόγω της απλότητάς της για την ανάλυση πειραματικών μετρήσεων από νανομετρικές ακίδες παρά τα επιστημονικά αποτελέσματα ερευνητών, όπως Cutler et al. [1] και Kyritsakis–Xanthakis [2], που υποδεικνύουν ότι η θεωρία FN αποτυγχάνει στα πλαίσια των σύγχρονων οργάνων, ιδίως για ακτίνες καμπυλότητας ακίδων R μικρότερες από το φράγμα των 5nm, τόσο από ηλεκτροστατική όσο και από κβαντομηχανική σκοπιά.

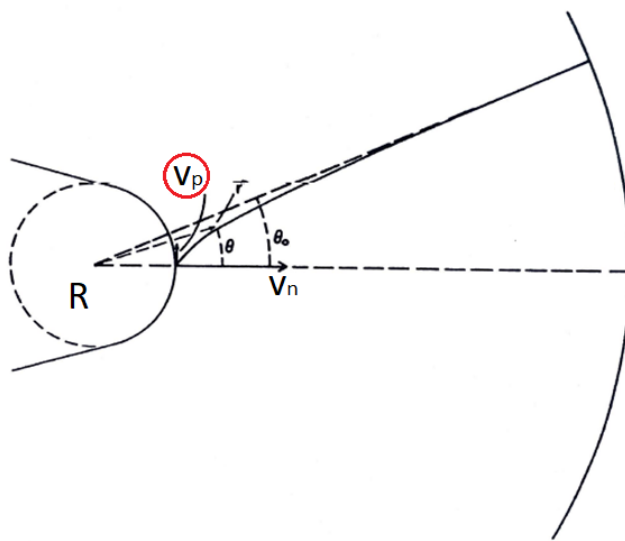
Με βάση τα παραπάνω, βασικός στόχος της διατριβής αυτής είναι η προσπάθεια ανάπτυξης ενός πρωτότυπου τρισδιάστατου «υβριδικού» μοντέλου για την επεξήγηση και πρόβλεψη των σχετικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στη νανομετρική κλίμακα διαστάσεων. Το πρώτο βήμα σε αυτό το εγχείρημα είναι η κβαντομηχανική ανάλυση των ενεργειακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων στο εσωτερικό ενός αιχμηρού μετάλλου με σκοπό τον υπολογισμό της προσπίπτουσας πυκνότητας ρεύματος ηλεκτρονίων στην εσωτερική επιφάνειά του. Αυτό επιτυγχάνεται με τη μοντελοποίηση του αιχμηρού μετάλλου μέσω του συστήματος παραβολοειδών συντεταγμένων και επίλυση της εξίσωσης του Schroedinger στα πλαίσια του μοντέλου ελεύθερων ηλεκτρονίων του Sommerfeld.

Κατόπιν, το δεύτερο βήμα αποτελείται από μία τρισδιάστατη υβριδική θεωρία JWKB (Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin) για τον προσδιορισμό του συντελεστή

διέλευσης (transmission / barrier-penetration coefficient) μέσα από το υποκείμενο νανοσκοπικό φράγμα δυναμικού υπό την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου. Στη συνέχεια γίνεται η σύνδεση των προηγούμενων αποτελεσμάτων προκειμένου να υπολογιστεί το τελικό εκπεμπόμενο ρεύμα. Παράλληλα αναλύονται οι συνέπειες της συνθήκης $R < 5\text{nm}$ σε σχέση με υπάρχουσες θεωρίες (αποδεκτές για μεγαλύτερα R) και γίνεται σύνδεση με τη λειτουργία και την ευκρίνεια του πρόσφατα ανεπτυγμένου πρωτοτύπου ηλεκτρονικού μικροσκοπίου *σάρωσης εγγύς πεδίου* που ονομάζεται NFESM (Near-Field-Emission Scanning Electron Microscope) [3], μέσω υπολογισμού των παράλληλων προς την μεταλλική επιφάνεια ταχυτήτων των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων κατά την έξοδό τους από την ακίδα.



Σχήμα 1-1. [73] Εικόνα TEM σύγχρονης νανο-ακίδας



Σχήμα 1-2. [74] Παράλληλη ταχύτητα ηλεκτρονίων στην κορυφή ακίδας

1.2 Πεδιακή Εκπομπή Ηλεκτρονίων – Ιστορικά στοιχεία

Κατ'αρχήν, πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων ονομάζουμε το φυσικό φαινόμενο κατά το οποίο εκπέμπονται ηλεκτρόνια από υλικές επιφάνειες υπό την επίδραση ηλεκτροστατικού πεδίου. Συνήθως, η ηλεκτρονική αυτή εκπομπή αναφέρεται σε επιφάνειες στερεών και τα ηλεκτρόνια εκπέμπονται προς το κενό που περιβάλλει το στερεό. Ωστόσο, υπάρχουν περιπτώσεις όπου η πεδιακή εκπομπή λαμβάνει χώρα σε επιφάνειες υγρών και, ενδεχομένως, προς τον αέρα, άλλο ρευστό ή άλλα ελαφρώς αγωγίμα ή ακόμα και μονωτικά υλικά. Όσον αφορά τα μέταλλα, η εκπομπή ηλεκτρονίων εξαρτάται έντονα από το έργο εξόδου αλλά, εν γένει, απαιτεί ισχυρά ηλεκτρικά πεδία με εντάσεις της τάξεως του 1 GV/m , ισοδύναμα, 1 V/nm .

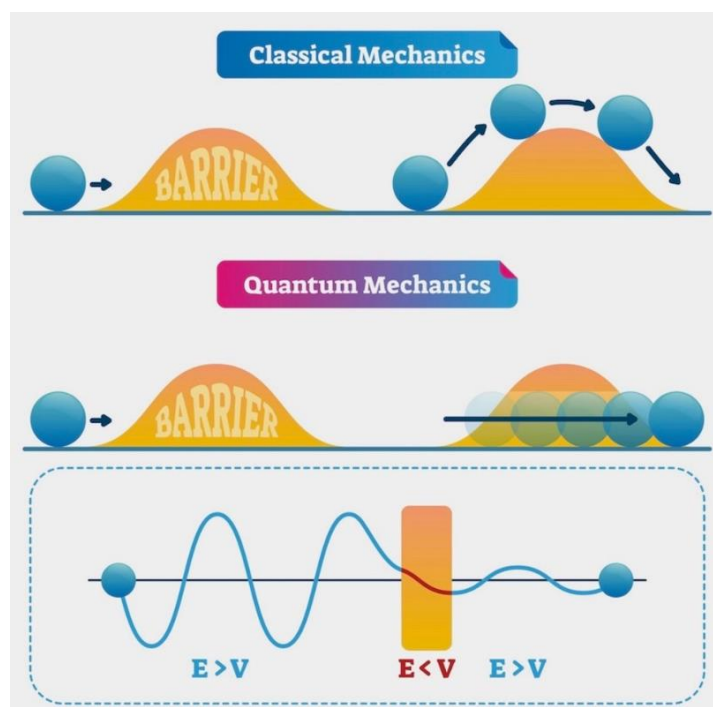
Η εκπομπή ηλεκτρονίων εξαιτίας ηλεκτρικών πεδίων έχει αξιοποιηθεί και εφαρμοστεί σε πληθώρα τεχνολογιών που εκτείνονται από μικροσκοπία, φασματοσκοπία και λιθογραφία έως ιατρικές συσκευές (π.χ. παραγωγή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας), εξομαλυντές συσσωρευμένου ηλεκτρικού φορτίου (π.χ. διαστημόπλοια) και μικροηλεκτρονικές διατάξεις (π.χ. τρανζίστορ, οθόνες κλπ). Παρόλα αυτά, μπορεί ενίοτε να αποτελέσει και ανεπιθύμητο φαινόμενο, κυρίως ως πρωτεύουσα πηγή ηλεκτρικών εκφορτίσεων και εκκενώσεων όπως π.χ. στα τοιχώματα επιταχυντών στοιχειωδών σωματιδίων.

Το φαινόμενο αυτό παρατηρήθηκε για πρώτη φορά κατά την εκφόρτιση μεταξύ ηλεκτροδίων από τον Winckler [4] το 1744. Η εκφόρτιση εξηγήθηκε το 1897 από τον Thomson [5] με την απόδειξη ύπαρξης ηλεκτρονίων. Κατά την εκπομπή πεδίου, τα ηλεκτρόνια δε χρειάζεται να υπερβούν, με την κλασική έννοια, κάποιο φράγμα δυναμικού. Εναλλακτικά, είναι δυνατό να διέλθουν μέσα από αυτό σύμφωνα με το κβαντομηχανικό φαινόμενο σήραγγας. Η πειραματική καταγραφή του φαινομένου έγινε το 1922 από τον Lilienfeld [6]. Το 1928 οι Millikan και Lauritsen [7] προσπάθησαν να προσδιορίσουν το νόμο που διέπει τα πειραματικά δεδομένα, ενώ παράλληλα ο Oppenheimer [8] έκανε απόπειρες να ερμηνεύσει τα ευρήματά τους με χρήση των πρόσφατα ανεπτυγμένων εργαλείων της κβαντικής θεωρίας και του φαινομένου σήραγγας.

Ωστόσο, την πιο εύστοχη και ακριβή αντιμετώπιση κατόρθωσαν το 1928 οι Fowler και Nordheim σε μια ιστορική πλέον δημοσίευση [9]. Η θεωρία τους βασίστηκε σε ευρήματα που είχαν δημοσιευθεί περίπου δυο χρόνια νωρίτερα: υποθέτει ότι τα ηλεκτρόνια είναι ελεύθερα, ακολουθώντας το μοντέλο του Sommerfeld [10], και διέπονται από τη στατιστική Fermi-Dirac [11,12]. Κατέληξαν ότι τα δεδομένα των πειραματικών μετρήσεων ακολουθούν ένα νόμο τέτοιο ώστε σε άξονες $\log(I/V^2)$ vs. $1/V$ είναι διατεταγμένα σχεδόν σε ευθεία γραμμή. Βασικό χαρακτηριστικό του «στοιχειώδους» (original) FN μοντέλου είναι το ακριβώς τριγωνικό φράγμα, που είναι η συνισταμένη του έργου εξόδου ϕ (ελάχιστη ενέργεια που απαιτείται για να απομακρυνθεί πλήρως ένα ηλεκτρόνιο από την επιφάνεια του μετάλλου) και του επιβαλλόμενου πεδίου, καθώς και η ακριβής επίλυση της εξίσωσης Schroedinger.

Λίγο αργότερα ο Nordheim [13] ενσωμάτωσε στο προφίλ του φράγματος και το εικονικό δυναμικό που προβλέπεται από τη μέθοδο των ειδώλων (method of image charges) για επίπεδους αγωγούς. Σε αυτήν την περίπτωση, αλλά και σε όλες τις επεκτάσεις που έχουν γίνει μέχρι σήμερα για την ακριβέστερη ποσοτική ερμηνεία των

δεδομένων από ολοένα και πιο σύγχρονους εκπομπούς, είναι απαραίτητη η χρήση ενός μαθηματικού εργαλείου που αναπτύχθηκε την περίοδο 1923-1926 από τους Jeffreys, Wentzel, Kramers και Brillouin [14-17] για την προσεγγιστική (βασιζόμενη σε θεωρία διαταραχών – perturbations) επίλυση μονοδιάστατων προβλημάτων ηλεκτρονικής σήραγγος, των οποίων η ακριβής αναλυτική λύση είναι ανέφικτη, με σκοπό, ύστερα, την εύρεση του αντίστοιχου συντελεστή διέλευσης. Η προσεγγιστική αυτή τεχνική είναι πλέον γνωστή ως μέθοδος *WKB* ή ημικλασική μέθοδος. Η προσπάθεια επέκτασής της έγινε από τους Karur και Peierls το 1937 [18]. Σήμερα, η ευρέως χρησιμοποιούμενη θεωρία εκπομπής πεδίου έχει τη μορφή που έδωσαν οι Murphy και Good περί το 1956 [19] ενώ πιο σύγχρονες και περίτεχνες θεωρίες, όπως αυτές των Edgcombe, Jensen, Kyritsakis / Xanthakis και Forbes, λαμβάνουν υπόψη την έντονη τοπική καμπύλωση των εκπεμπουσών ακίδων και συνέπειες αυτής στο χώρο έξω από τον αγωγίμο εκπομπό.



Σχήμα 1-3. Σχηματικό διάγραμμα του κβαντομηχανικού φαινομένου «σήραγγος»

1.3 Ανασκόπηση Θεωριών Εκπομπής Πεδίου

Από τη σκοπιά της θεωρητικής μοντελοποίησης, οι ηλεκτρονικοί εκπομποί κατηγοριοποιούνται με βάση τη διάσταση (dimensionality), την επιπεδότητα (planarity), το υλικό τους αλλά και τη θερμοκρασία λειτουργίας τους. Χρονολογικά, πρώτη καθιερώθηκε η στοιχειώδης FN θεωρία για ψυχρούς, επίπεδους, μεταλλικούς εκπομπούς με όγκο (3D bulk). Καθώς οι πειραματικοί κατόρθωναν να κατασκευάζουν όλο και μικρότερου μεγέθους εκπομπούς, έγινε αντιληπτό σταδιακά ότι η αρχική αυτή θεωρία δεν ήταν επαρκής για να περιγράψει όλα τα φαινόμενα που παρατηρούνταν να

συνοδεύουν τη σμίκρυνση και καμπύλωσή τους [1, 20]. Έτσι εμφανίστηκαν τα πρώτα αποτελέσματα προς την κατεύθυνση επέκτασης της στοιχειώδους FN θεωρίας προς ογκώδεις (bulky), μη επίπεδες (non-planar), μεταλλικές πλάκες [2, 21-23]. Οι πιο πρόσφατες από αυτές τις θεωρίες, που λαμβάνουν υπόψη τους και τον «κβαντικό περιορισμό» (quantum confinement) σε χαμηλοδιάστατες (low-dimensional) διατάξεις, αφορούν επίπεδες γεωμετρίες [24, 25] αλλά και μη επίπεδες [2, 23, 26, 27, 72].

Η σχέση FN αποτελεί το θεμέλιο της θεωρίας πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων [9]. Εισήχθη το 1928 στα πλαίσια μιας προσπάθειας να αναπτυχθεί ένα μοντέλο εκπομπής βασισμένο στο φαινόμενο σήραγγος, χρησιμοποιώντας τα νέα, για την εποχή, εργαλεία της κβαντικής φυσικής. Μολονότι οι λεπτομέρειες της σύγχρονης θεωρίας εκπομπής διαφέρουν αρκετά σε τεχνικό και ποσοτικό επίπεδο, το αρχικό FN μοντέλο ενσωματώνει τις θεμελιώδεις φυσικές αρχές και διεργασίες που, ποιοτικά τουλάχιστον, είναι σύμφυτες με το φαινόμενο της εκπομπής πεδίου. Αυτές περιλαμβάνουν την παροχή ροής ηλεκτρονίων προς την αγωγίμη επιφάνεια της πλάκας / ακίδας και την πεπερασμένη (μη μηδενική) πιθανότητα διέλευσης τους μέσα από το φράγμα δυναμικού, που βρίσκεται ακριβώς απέξω, προς το κενό (vacuum nanoelectronics). Συνεπώς, πέρα από την αρχική του επιτυχία στην ερμηνεία των σχετικών φαινομένων, παραμένει ένα πολύ σημαντικό παιδαγωγικό πρότυπο τα τελευταία 90 χρόνια.

1.3.1 Στοιχειώδης θεωρία των Fowler-Nordheim

Η αρχική θεωρία FN προβλέπει την εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος από ένα επίπεδο μέταλλο όπου το ηλεκτρονιακό ενεργειακό φάσμα υποτίθεται συνεχές, δηλαδή πάρα πολύ πυκνό. Σύμφωνα με το μοντέλο Sommerfeld, τα ηλεκτρόνια σχηματίζουν ένα ιδανικό «αέριο» νέφος σε θερμοκρασία απόλυτου μηδενός, δηλαδή μηδέν βαθμών Κέλβιν, και διέπονται από τη στατιστική Fermi-Dirac. Η επιφάνεια του εκπομπού είναι απόλυτα επίπεδη, ομαλή, χωρίς ακαθαρσίες και χαρακτηρίζεται από ομοιόμορφο έργο εξόδου. Ηλεκτρικό πεδίο εφαρμόζεται και προσπίπτει κάθετα στην επιφάνεια χωρίς να εισχωρεί καθόλου (δηλαδή ιδανικά) στο μέταλλο. Έτσι δημιουργείται ένα συνιστάμενο φράγμα, το οποίο «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια, σε σχήμα ακριβώς τριγωνικό.

Γενικά, η πυκνότητα ρεύματος που οφείλεται σε μία ηλεκτρονική κατάσταση ενέργειας E δίνεται από:

$$j(E) = N(E)T(E)e$$

όπου

N : η (ειδική) πυκνότητα ροής (παροχή) ηλεκτρονίων που προσπίπτει κάθετα στην εσωτερική επιφάνεια του μετάλλου, ανά μονάδα επιφάνειας και ανά μονάδα ενέργειας (*electronic supply constant / function*)

T : ο συντελεστής διέλευσης, δηλαδή η πιθανότητα εκπομπής ρεύματος, μέσω του φράγματος, από τη συγκεκριμένη ενεργειακή κατάσταση (*transmission coefficient / penetration factor / tunneling probability*)

Η ολική, ως προς τις ιδιοκαταστάσεις των ηλεκτρονίων, πυκνότητα ρεύματος ανά μονάδα επιφάνειας, δίνεται από το ολοκλήρωμα («άθροιση») ως προς όλες τις αντίστοιχες ενέργειες:

$$J(E) = e \int N(E)T(E)dE$$

Στα πλαίσια της θεωρίας των F-N έχουμε, πιο συγκεκριμένα:

$$N(E) = \frac{4\pi m_0 k_B \Theta}{h^3} \log [1 + \exp (-\frac{E - E_F}{k_B \Theta})]$$

όπου:

m_0 : η μάζα του ελεύθερου ηλεκτρονίου στο κενό

k_B : η σταθερά του Boltzmann

Θ : η απόλυτη θερμοκρασία σε βαθμούς *Kelvin*

h : η σταθερά του *Planck*

$$T(E) \approx \exp [-\frac{\sqrt{2m_0}}{h} \int_0^{z_t} \sqrt{V(z) - E} dz]$$

$$V(z) = E_F + \varphi - eFz$$

$$T^{FN} = T^{FN}(E, F) \approx \exp [-\frac{8\pi\sqrt{2m_0}}{3ehF} (E_F + \varphi - E)^{3/2}]$$

$$B \equiv \frac{8\pi\sqrt{2m_0}}{3eh} , \text{ η δεύτερη σταθερά FN}$$

Εφόσον τα περισσότερα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια προέρχονται από ενεργειακά επίπεδα γύρω από τη στάθμη Fermi, είναι καλή προσέγγιση να αναπτύξουμε κατά Taylor γύρω από $E \approx E_F$:

$$T^{FN} \approx \exp [-\frac{B}{F} \varphi^{\frac{3}{2}} + \frac{3B\sqrt{\varphi}}{2F} (E - E_F)]$$

$$C \equiv \frac{3B\sqrt{\varphi}}{2F}$$

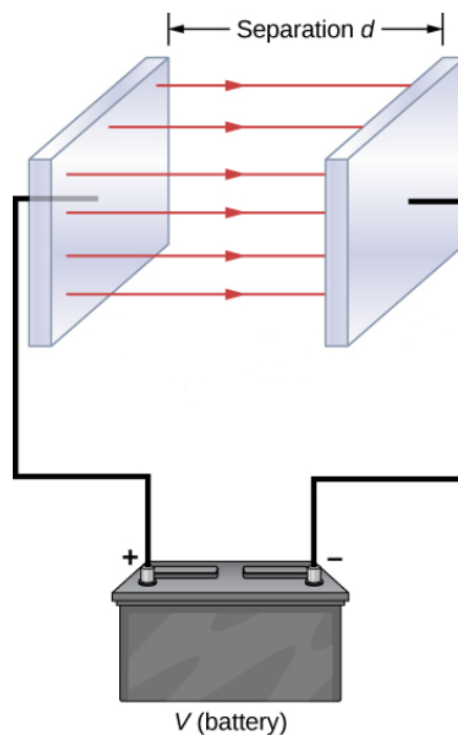
F : το ηλεκτρικό πεδίο

Επεκτείνοντας την ολοκλήρωση ως προς τις ενέργειες μέχρι το ∞ (προς υψηλότερες ενέργειες οι συνεισφορές «κόβονται» λόγω κατανομής F-D ενώ σε χαμηλότερες περιορίζονται από το συντελεστή διάδοσης, δηλαδή απομακρυνόμενοι από την E_F η πιθανότητα εκπομπής ρεύματος πέφτει εκθετικά) προκύπτει:

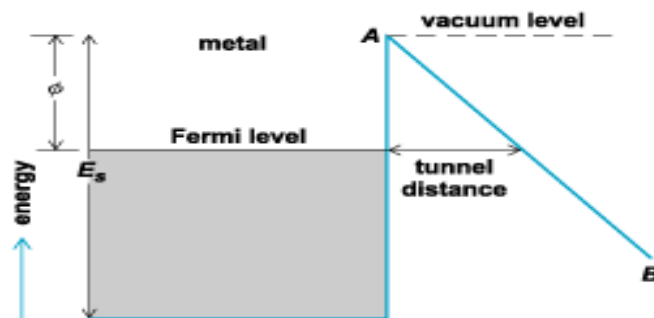
$$J_{FN} = J_{FN}(F) = \frac{A}{\varphi} F^2 \exp \left(-\frac{B}{F} \varphi^{\frac{3}{2}} \right)$$

$$A \equiv \frac{e^3}{8\pi h}, \text{ η πρώτη σταθερά FN}$$

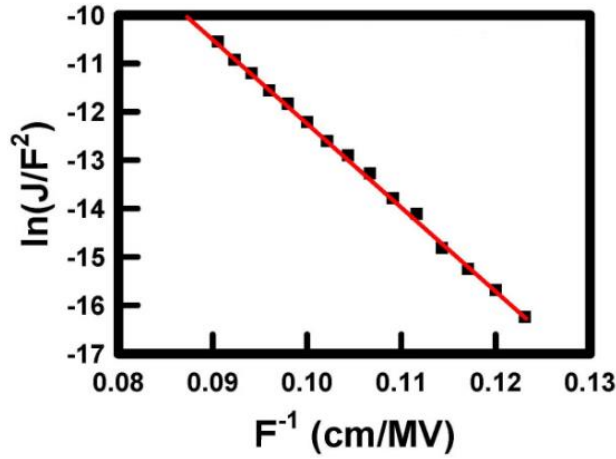
Η FN σχέση υποδεικνύει ότι υπάρχει μια απλή σχέση μεταξύ J και F : αν FE δεδομένα παρασταθούν σε άξονες $\log(J/F^2)$ vs $1/F$ τότε θα πρέπει να σχηματίζουν μια (σε πολύ καλή προσέγγιση, τουλάχιστον) ευθεία γραμμή. Αυτού του είδους η γραφική αναπαράσταση ονομάζεται FN διάγραμμα (FN plot) και χρησιμοποιείται για εξαγωγή παραμέτρων της διάταξης, όπως είναι τα R , ϕ , F καθώς και η ενεργός επιφάνεια εκπομπής, από την κλίση του γραφήματος, τα σημεία τομής του με τους άξονες και κάποια, ίσως, κατάλληλη κατακόρυφη μετατόπιση της ευθείας παλινδρόμησης που έχει προσαρμοστεί σε πραγματικά πειραματικά δεδομένα, τα οποία έχουν ληφθεί (σχεδόν) υπό τις αρχικές, ιδανικές παραδοχές του μοντέλου αυτού.



Σχήμα 1-5. Γεωμετρία πυκνωτή παράλληλων πλακών που υποθέτει η αρχική θεωρία των F-N



Σχήμα 1-6. Τυπικό φράγμα που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια μεταλλικής επιφάνειας



Σχήμα 1-7. Τυπικό διάγραμμα Fowler-Nordheim

1.3.2 Παραδοσιακή (standard) F-N θεωρία των Murphy-Good

Όπως είναι ίσως εύκολα αντιληπτό, οι υποθέσεις του αρχικού FN μοντέλου είναι κάπως μη ρεαλιστικές, πρακτικά και φυσικά. Το επόμενο μοντέλο, το οποίο ξεχωρίζει στη χρονική εξέλιξη των ερευνητικών προσπαθειών για μια βελτιωμένη θεωρία, είναι αυτό των Murphy και Good, όπως καθιερώθηκε κι έχει ευρεία χρήση ακόμη μέχρι σήμερα. Το μοντέλο αυτό, αντί για ακριβώς τριγωνικό φράγμα δυναμικού, χρησιμοποιεί ένα σχεδόν τριγωνικό (nearly triangular), πιο ομαλό στην κορυφή του, το λεγόμενο φράγμα Schottky-Nordheim [13, 28], το οποίο είναι το προηγούμενο, το «στοιχειώδες», των F-N, μαζί με έναν όρο εικονικού δυναμικού (image charge / mirror potential) για επίπεδες μεταλλικές επιφάνειες, δηλαδή:

$$V(z) = E_F + \varphi - eFz - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z}$$

Τότε ο νέος συντελεστής διέλευσης γίνεται:

$$T^{FN} \approx \exp \left[-\frac{B}{F} v(y) (E_F + \varphi - E)^{3/2} \right]$$

$$y \equiv \frac{\sqrt{\frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0}}}{E_F + \varphi - E}$$

και $v(y)$ είναι διορθωτικός παράγοντας του φράγματος (*barrier shape correction factor*) που συνδέεται με ελλειπτικά ολοκληρώματα.

Τότε το ECD γίνεται:

$$J_{MG} = \frac{A}{\varphi} t^{-2}(y_{E_F}) F^2 \exp \left(-\frac{B}{F} v(y_{E_F}) \varphi^{\frac{3}{2}} \right)$$

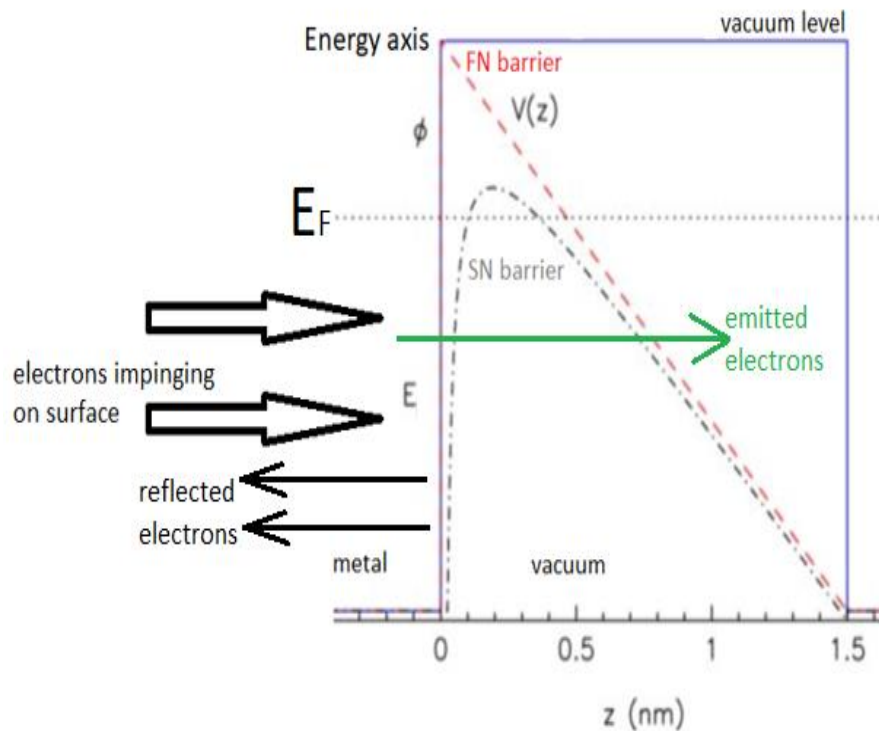
με $t(y) = v(y) - \frac{2}{3}y \frac{dv}{dy}$ τον δεύτερο διορθωτικό παράγοντα του φράγματος.

Υπάρχουν αναλυτικές προσεγγιστικές εκφράσεις για τους διορθωτικούς παράγοντες από τον Forbes [29]:

$$v(y) \approx 1 - y^2 + \frac{1}{3}y^2 \log(y)$$

$$t(y) \approx 1 + \frac{1}{9}y^2 - \frac{1}{9}y^2 \log(y)$$

Παρατηρείται ότι για $y > 0$, είναι $v(y) < 1$ κι έτσι το ECD, για δοσμένο F , είναι μεγαλύτερο από εκείνο που προβλέπεται από το στοιχειώδες μοντέλο FN, γεγονός το οποίο ερμηνεύεται από τον περιορισμό του ύψους του δυναμικού φράγματος που με τη σειρά του «ισοδυναμεί» με, δηλαδή συνοδεύεται από, αυξημένη πιθανότητα εκπομπής για τις διάφορες ενεργειακές στάθμες.



Σχήμα 1-8. Κύματα ηλεκτρονίων στην επιφάνεια μεταλλικής ακίδας

1.3.3 Φυσικώς πλήρης (physically complete) FN-τύπου εξίσωση

Η θεωρία M-G καταλήγει σε μια έκφραση για την πυκνότητα ρεύματος που, ουσιαστικά, αποτελείται από την FN εξίσωση μαζί με ένα διορθωτικό παράγοντα. Αποτελεί μια ειδική αλλά και αντιπροσωπευτική περίπτωση μιας γενικότερης κλάσης εξισώσεων «τύπου FN» που σκοπό έχουν να αντιμετωπίσουν φαινομενολογικά μη-ιδανικότητες στη μοντελοποίηση, καθώς έχει δειχθεί οργανωμένα από πειραματικές μελέτες ότι η αρχική FN θεωρία υποτιμά (δηλαδή προβλέπει υψηλότερες τιμές) το

πειραματικά μετρούμενο ρεύμα. Έτσι, κάθε μια από τις πιθανές μη-ιδανικότητες συνοδεύεται από έναν αντίστοιχο διορθωτικό παράγοντα /συντελεστή που ενσωματώνεται στην FN σχέση και, κατά συνέπεια, προκύπτει το *φυσικώς πλήρες* FN μοντέλο [58] :

$$J_{PC}(F) = \lambda_{\theta} \lambda_{\beta} \lambda_p \frac{A}{\varphi} F^2 \exp \left(-\frac{B}{F} \lambda_{\mu} \varphi^2 \right)$$

όπου:

λ_p, λ_{μ} : παράγοντες διόρθωσης λόγω μορφής φράγματος [2, 13, 59, 60]

λ_{θ} : συντελεστής διόρθωσης για εκπομπή σε πεπερασμένες θερμοκρασίες [19]

λ_{β} : διορθωτικός παράγοντας εξαιτίας δομής ζωνών στερεού [61 – 63]

1.4 Συντελεστής ενίσχυσης τοπικού πεδίου στην αιχμή ακίδων

Σε γεωμετρικές διατάξεις που προσομοιάζουν σε πυκνωτές παράλληλων πλακών, το μακροσκοπικό πεδίο F_m ορίζεται ως το πηλίκο της εφαρμοζόμενης τάσης V προς την απόσταση d . Το τοπικό πεδίο F_l στην περιοχή της εκπέμπουσας επιφάνειας (μέχρι 1-2nm) είναι εκείνο που καθορίζει κατά κύριο λόγο το φράγμα δυναμικού μέσα από το οποίο εκπέμπονται με φαινόμενο σήραγγος ηλεκτρόνια σε συνθήκες πεδιακής εκπομπής. Το F_l είναι τυπικά της τάξης των μερικών V/nm και συνήθως είναι πολύ ισχυρότερο από το F_m . Το πηλίκο των δύο αυτών μεγεθών ονομάζεται στη βιβλιογραφία συντελεστής ενίσχυσης ηλεκτρικού πεδίου και συμβολίζεται με γ .

Η κυριότερη και απλούστερη φυσική αιτία για την εν λόγω ενίσχυση πεδίου η παρουσία μιας αγωγίμης μικρο/νανο-εξοχής πάνω σε μια ευρύτερη επιφάνεια. Ο κλάδος της νανοηλεκτρονικής κενού (vacuum nanoelectronics) στηρίζεται εν μέρει σε διατάξεις ηλεκτρονικής εκπομπής από αιχμηρές ακίδες με ακτίνα καμπυλότητας στην νανοκλίμακα. Εξαιτίας των υψηλών τιμών του λόγου μήκους ακίδας προς ακτίνα, τέτοιοι εκπομποί ηλεκτρονίων παρουσιάζουν αντίστοιχα υψηλό γ . Το ερώτημα που προκύπτει λοιπόν και που έχει ενδιαφέρον για το αντικείμενο της πεδιακής εκπομπής είναι το πως μπορούν να εκτιμηθούν οι τιμές του παράγοντα γ στην κορυφή μιας τέτοιας νανοακίδας. Το πρόβλημα αυτό ανακύπτει γενικότερα σε όλες τις περιστάσεις όπου μια μικρό, αιχμηρό εξόγκωμα περιορισμένου ύψους ευρίσκεται πάνω σε μια μεγαλύτερη γεωμετρική δομή με ακτίνα καμπυλότητας σημαντικά υψηλότερη εν σχέση με το ύψος της προεξοχής. Σε πρώτη προσέγγιση η μικροεξοχή μπορεί να μοντελοποιηθεί σαν να βρισκόταν πάνω σε μια σχεδόν (τοπικά και πρακτικά) επίπεδη επιφάνεια που αποκαλούμε επίπεδο εκπομπού.

Τα τρία πιο απλά μοντέλα που έχουν αναπτυχθεί για τη μελέτη τέτοιων προβλημάτων είναι τα εξής: το ημισφαίριο πάνω σε επίπεδο (hemisphere on a plane), η επιπλέουσα σφαίρα στο δυναμικό του επίπεδου του εκπομπού (floating sphere at emitter-plane potential) και το ημισφαίριο πάνω σε κυλινδρικό στέλεχος (hemisphere on a post). Τα μοντέλα αυτά μελετώνται στις εργασίες [30-45] ενώ στο σχήμα 9 φαίνονται

γεωμετρικές αναπαραστάσεις των διατάξεων αυτών μαζί με ένα ακόμα αξιοσημείωτο μοντέλο, εκείνο του ημιελλειψοειδούς σε επίπεδο (hemi-ellipsoid on a plane) [31,31,40]. Στις εργασίες [34,42] έχει μελετηθεί και το μοντέλο του στρογγυλεμένου κώνου (rounded conical protrusion) δηλαδή της σφαίρας σε κωνικό, αντί για κυλινδρικό, στέλεχος.

Το πρώτο από αυτά τα μοντέλα μπορεί να αναλυθεί ακριβώς [35] δίνοντας $\gamma=3$. Για το δεύτερο και το τρίτο μοντέλο χρησιμοποιείται εκτενώς η πρακτική μαθηματική έκφραση $\gamma=h/r+c$ όπου h είναι η απόσταση (ύψος) του κέντρου της σφαίρας ή του ημισφαιρίου από το επίπεδο ίδιου δυναμικού, r είναι η ακτίνα της σφαίρας ή του ημισφαιρίου και c είναι μια σταθερά που παίρνει, ανάλογα με την περίπτωση, τιμές συνήθως από 0 έως 3,5. Για παράδειγμα, το δεύτερο μοντέλο έχει θεωρητικά ακριβή επίλυση σε δισφαιρικές συντεταγμένες (bispherical coordinates) [47] αλλά μετά από μια σειρά από εύλογες προσεγγίσεις [Forbes] όταν $h \gg r$ βρίσκουμε $c=3,5$ ενώ η εξάρτηση του τοπικού πεδίου πάνω στη σφαιρική επιφάνεια από τη γωνία θ που σχηματίζεται από την επιβατική ακτίνα του εκάστοτε σημείου ενδιαφέροντος με τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας της σφαίρας δίνεται από τη σχέση $F_l(\theta)=h/r+0,5+3\cos\theta$.

Το τρίτο μοντέλο είναι γεωμετρικά κάπως πιο ρεαλιστικό και αντιπροσωπευτικό των πειραματικών ακίδων εκπομπής ηλεκτρονίων. Η σχετική ανάλυση γίνεται για παράδειγμα στα [31, 39, 40, 41, 45]. Σύμφωνα με τον Rohrbach [41], μια κατάλληλη εμπειρική σχέση που δίνει με ικανοποιητική ακρίβεια τον υπό μελέτη συντελεστή ενίσχυσης τοπικού πεδίου αιχμής είναι η $\gamma \sim h/r+3$. Στην ειδική περίπτωση όπου $h=0$, δηλαδή απουσία του κυλινδρικού στύλου που σημαίνει ότι το μοντέλο εκφυλίζεται σε ημισφαίριο πάνω σε επίπεδο, η σχέση αυτή δίνει $\gamma=3$ που συμπίπτει πράγματι με το αποτέλεσμα της αναλυτικής ηλεκτροστατικής μελέτης που αναφέρθηκε νωρίτερα. Ωστόσο, όπως ίσως είναι αντιληπτό, σε τυπικές διατάξεις πειραμάτων πεδιακής εκπομπής συνήθως ισχύει $h/r \gg 3$, επομένως $\gamma \sim h/r$, στην κορυφή ($\theta=0$).

Αξίζει να σημειωθεί ότι η αναλυτική μελέτη των παραπάνω θεωρητικών μοντέλων υποθέτει εγγενώς ότι η κλίμακα της εξοχής είναι πολύ μικρότερη από τη διάσταση της πειραματικής διάταξης. Πιο συγκεκριμένα, η απόσταση d μεταξύ των μακροσκοπικά παράλληλων επιπέδων πρέπει να είναι πολύ μεγαλύτερη από το ύψος $h+r$ της ακίδας και συγχρόνως οι πλευρικές διαστάσεις του συστήματος να είναι πολύ μεγαλύτερες από το d (θεωρητικά «άπειρης» έκτασης πλάκες). Έτσι, οι παραπάνω εκφράσεις για το γ αντιστοιχούν ουσιαστικά σε άπειρο d . Ο Miller [48] έδωσε μια διόρθωση για το $\gamma(d)$ για πεπερασμένες τιμές του d :

$$\gamma \sim (h/r+c)[1-(h+r)/d].$$

Τα παραπάνω αποτελέσματα, όπως είπαμε, εμπεριέχουν κάποιες παραδοχές ή προσεγγίσεις που επιτρέπουν την αναλυτική μελέτη του κάθε μοντέλου. Πιο πρόσφατες εργασίες [34, 35, 46], ωστόσο, στηριζόμενες σε αριθμητική επίλυση των αντίστοιχων ρεαλιστικών διατάξεων, έδωσαν πιο ακριβή αποτελέσματα τα οποία υποδεικνύουν ότι η προαναφερθείσα πρακτική έκφραση για το γ ενίοτε υπερεκτιμάει την τιμή του όταν το πηλίκο ν της απόστασης L της κορυφής της εξοχής από το επίπεδο εκπομπής προς την ακτίνα ρ της βάσης της κυμαίνεται σε πολύ υψηλές τιμές, δηλαδή

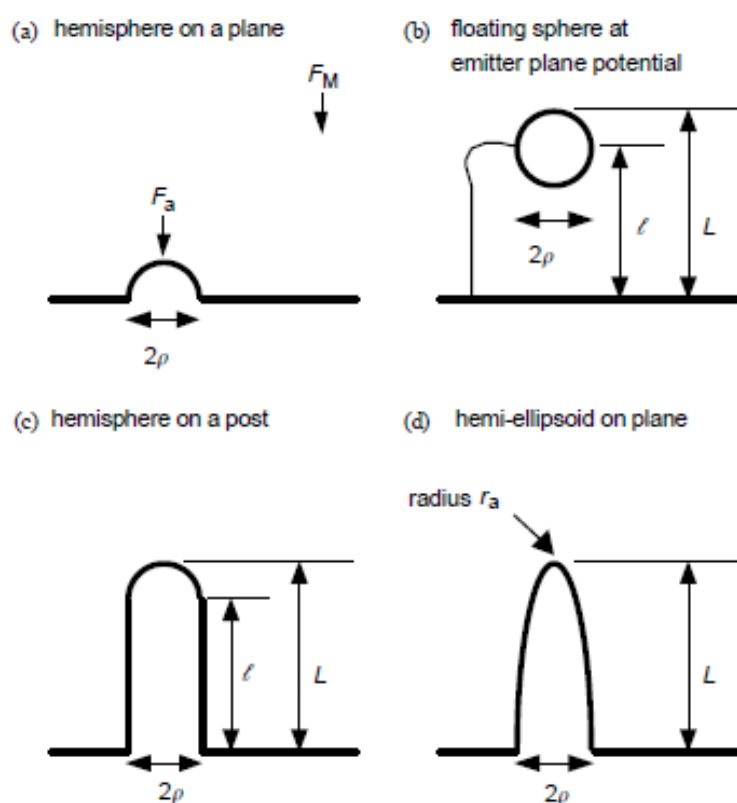
όταν $L \gg r$. Προφανώς, σε κάποια μοντέλα όπως στα παραπάνω, τα L και ρ εκφράζονται συναρτήσει των συμβόλων h και r που είχαμε παραπάνω.

Για παράδειγμα, οι Edgcombe και Valdre στην [35] δείχνουν, με χρήση παραδοσιακής ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων, ότι στο εύρος τιμών $4 < \nu < 3000$ μια καλύτερη αναπαράσταση του γ για το μοντέλο ημισφαιρίου σε στέλεχος είναι η $\gamma \sim 1,2(2,15 + \nu)^{0,9}$ με σφάλμα μόνο 3%. Στη [46], οι Kokkorakis, Modinos και Xanthakis ενδιαφερόμενοι για την κατανομή ηλεκτρικών πεδίων γύρω από νανοσωλήνες άνθρακα (carbon nanotubes), μοντελοποίησαν κάθε άτομο με μια αγωγίμη σφαίρα και έλυσαν το συνολικό ηλεκτροστατικό πρόβλημα αυτοσυνεπώς (self-consistently) ως υπέρθεση των επιμέρους συνιστωσών, προσδιορίζοντας τα ζητούμενα δυναμικά και πεδία. Συμπέραναν ότι για $20 < \nu < 600$ ο τύπος $\gamma \sim 5,93 + 0,73\nu - 0,0001\nu^2$ δίνει τη βέλτιστη προσαρμογή στον πραγματικό συντελεστή ενίσχυσης τοπικού πεδίου. Αντίστοιχοι υπολογισμοί για το μοντέλο επιπλεύουσας σφαίρας έδειξαν ότι η αρχική πρακτική έκφραση $\gamma \sim L/\rho$ είναι καλή ασυμπτωτική προσέγγιση για μεγάλες τιμές του ν . Επιπλέον, το δυναμικό στην κορυφή αυτής της διάταξης είναι σημαντικά πιο ισχυρό από το αντίστοιχο του ημισφαιρίου σε κυλινδρικό στέλεχος με τις ίδιες γεωμετρικές παραμέτρους L, ρ .

Ένα χαρακτηριστικό του μοντέλου ημισφαιρίου σε κύλινδρο είναι ότι η ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή είναι ίση με την ακτίνα της βάσης, δηλαδή $\rho = r$. Αυτό είναι μια αποδεκτή παραδοχή σε κάποιες περιπτώσεις αλλά είναι γενικά περιοριστικό και σίγουρα αποκλίνει από την πραγματικότητα όταν $r \ll \rho$. Τα φαινόμενα που αναπτύσσονται σε μια τέτοια περίπτωση μπορούν να εξερευνηθούν αναλυτικά πολύ πιο εύστοχα μέσω του μοντέλου ημιελλειψοειδούς σε επίπεδο. Το μοντέλο αυτό έχει μελετηθεί πλήρως και είναι γνωστός ο παράγοντας γ [31,32,41]. Πιο συγκεκριμένα προκύπτει $\gamma = \zeta^3 / \{[\nu \log(\nu + \zeta)] - \zeta\}$, όπου ν είναι ο λόγος του μεγάλου (L) προς το μικρό (ρ) ημιάξονα της έλλειψης, η ακτίνα καμπυλότητας στην αιχμή είναι $r = \rho^2/L = \rho/\nu$ και $\zeta = (\nu^2 - 1)^{1/2}$. Επιπλέον, παρατήρηση αριθμητικών υπολογισμών για το εν λόγω μοντέλο δείχνει ότι, καθώς το ν αυξάνει, το γ γίνεται γρήγορα μεγαλύτερο από το αντίστοιχο του ημισφαιρίου σε κύλινδρο [34].

Το γενικό συμπέρασμα που μπορούμε να αναφέρουμε [70] για τον παράγοντα ενίσχυσης γ μιας νανοεξοχής είναι ότι εξαρτάται έντονα από το λεπτομερές σχήμα της. Εν γένει, ούτε μόνο η ακτίνα r ή ρ ούτε μόνο το ύψος h ή L ούτε μόνο κάποιος λόγος μεταξύ αυτών αρκεί για να προσδιοριστεί με αξιοπιστία το γ . Αν βέβαια το ακριβές σχήμα της ακίδας μιας πειραματικής διάταξης είναι άγνωστο τότε προφανώς οποιαδήποτε θεωρητική πρόβλεψη θα περιέχει αβεβαιότητα και σφάλμα. Τα θεωρητικά αναλυτικά και αριθμητικά μοντέλα ωστόσο είναι απαραίτητα για εξαγωγή τουλάχιστον ποιοτικών -και σε πολλές περιπτώσεις και ποσοτικών- χαρακτηριστικών τυπικών ακίδων. Σίγουρα, η διενέργεια κατάλληλων πειραματικών μετρήσεων χρησιμεύει πάντα για τη διασταύρωση αντίστοιχων μεγεθών που προβλέπονται από τη θεωρία. Μερικά άλλα ζητήματα που σχετίζονται με το παράγοντα γ ενίσχυσης πεδίου νανοακίδων είναι τα ακόλουθα: (1) Αν η ευρύτερη επιφάνεια που φέρει την ακίδα δεν είναι επίπεδη όπως στα παραπάνω μοντέλα, τότε χρειάζεται περισσότερη προσοχή στον ορισμό των αντίστοιχων παραμέτρων και στον προσδιορισμό του «μακροσκοπικού» πεδίου (background underlying field) που αναπτύσσεται απουσία της προεξοχής καθώς και στο πώς συνδέονται όλα αυτά με την εφαρμοζόμενη τάση V .

Στο [45] συζητείται το μοντέλο του ημισφαιρίου πάνω σε υπερβολή, ενώ στο [35] διάφορες περιπτώσεις προεξοχών πάνω σε σφαιρική επιφάνεια. (2) Εάν το ηλεκτρόδιο της ανόδου -που έλκει τα ηλεκτρόνια της ακίδας- είναι σχετικά κοντά στην προεξοχή τότε πρέπει να ληφθεί υπόψιν και η τιμή του γ θα είναι συνάρτηση της απόστασης αυτής d . (3) Αν η προεξοχή είναι «ατομικών» διαστάσεων τότε ίσως δεν επαρκεί ηλεκτροστατική ανάλυση που υποθέτει απλά σχήματα τέλειων αγωγών. Θεωρητικά, σε τέτοιες καταστάσεις η κατανομή του ηλεκτρικού φορτίου πρέπει να προσδιοριστεί με χρήση των αρχών της κβαντομηχανικής και, κατ' επέκταση, να υπολογιστεί από αυτή το ηλεκτρικό πεδίο στα σημεία ενδιαφέροντος. Σχετικά πάλι με αυτό το ζήτημα, γενικότερα, οι «τέλειες» αγωγίμες επιφάνειες φέρουν στην πραγματικότητα μια «τραχύτητα ατομικής κλίμακας» (atomic-scale roughness) που σίγουρα καθιστά πιο περίπλοκη την έκφραση που δίνει το γ , το οποίο με τη σειρά του καθορίζει τις ιδιότητες πεδιακής εκπομπής της υπό μελέτη νανοδομής. Η αναφορά [45] περιέχει μια εκτεταμένη ανασκόπηση αυτών των θεμάτων και αντίστοιχων επιστημονικών δημοσιεύσεων.



Σχήμα 1-9. Γεωμετρικά μοντέλα που έχουν μελετηθεί ως προς το συντελεστή ενίσχυσης τοπικού πεδίου [70]

1.4.1 Μεταβολή του συντελεστή ενίσχυσης γύρω από την αιχμή του εκπομπού

Μέχρι τώρα ασχοληθήκαμε με τις τιμές που παίρνει, ανάλογα με τη γεωμετρία, το γ συγκεκριμένα στην κορυφή της ακίδας (το οποίο πλέον θα συμβολίζουμε με γ_k). Ωστόσο δεν είναι αρκετός ο προσδιορισμός μόνο της τιμής αυτής για αξιόπιστη μελέτη προβλημάτων πεδιακής εκπομπής καθώς το ρεύμα εκπέμπεται από ένα πεπερασμένο τμήμα της επιφάνειας της ακίδας όπου το γ λαμβάνει διάφορες τιμές. Η μεταβολή λοιπόν του γ στην περιοχή γύρω από την κορυφή της ακίδας είναι εκείνη που καθορίζει τα χαρακτηριστικά του εκπεμπόμενου ρεύματος της συγκεκριμένης διάταξης. Ωστόσο, ενώ για την τιμή γ_k έχουν γίνει ποικίλες και εκτεταμένες μελέτες, η μεταβολή του γ πάνω στην επιφάνεια της προεξοχής και στην ευρύτερη περιοχή δεν είναι ξεκάθαρη τις περισσότερες φορές. Όπως είπαμε νωρίτερα, για παράδειγμα, στο απλό μοντέλο του ημισφαιρίου πάνω σε αγώγιμο επίπεδο, η εξάρτηση του γ από τη γωνία θ πάνω στη σφαιρική επιφάνεια είναι $\gamma(\theta) = \gamma_k \cos\theta$ όπου $\gamma(\theta=0) = \gamma_k = 3$. Για το μοντέλο του ημισφαιρίου πάνω σε κύλινδρο έχει αναφερθεί ότι η εξάρτηση ως προς τη γωνία θ (με το κέντρο της σφαίρας και τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας) είναι τετραγωνική [49] ή μεταβάλλεται σύμφωνα με ένα παράγοντα $(\cos\theta)^{1/2}$ [50]. Για ένα κωνικό εκπομπό με σφαιρική κορυφή, οι Spindt et al. [52] βρήκαν μικρή μόνο μεταβολή του γ με το θ ενώ μια μεταγενέστερη έρευνα [53] αναφέρει πιο έντονη μεταβολή για μικρές τιμές του θ . Όπως φαίνεται υπάρχει μια ασάφεια ως προς το εν λόγω πρόβλημα του $\gamma(\theta)$ και περισσότερες έρευνες είναι αναγκαίες για να ρίξουν φως.

Η σημασία της αιχμής του εκπομπού και της περιοχής της προκύπτει από το γεγονός ότι, στις μοντέρνες διατάξεις ηλεκτρονικής εκπομπής, ο συντελεστής ενίσχυσης πέφτει γενικώς πολύ απότομα καθώς απομακρυνόμαστε από την κορυφή ακόμα και για σημεία της μεταλλικής επιφάνειας με υψομετρική διαφορά μόλις ίση με την ακτίνα καμπυλότητας R της ακίδας. Κατά συνέπεια, ο συντελεστής διάδοσης μέσα από το φράγμα δυναμικού μειώνεται κατά μερικές τάξεις μεγέθους καθιστώντας το υπόλοιπο «σώμα» του εκπομπού «άσχετο» με την εκπομπή ηλεκτρονίων. Τελικά, η ίδια η πυκνότητα ρεύματος και το εκπεμπόμενο ρεύμα που μας ενδιαφέρει εξαρτώνται από τις διάφορες τιμές του $\gamma(\theta)$ πάνω στη μεταλλική επιφάνεια.

Παρακάτω θα δούμε [71] πως η εξάρτηση με το $\cos\theta$ στο μοντέλο του ημισφαιρίου μπορεί να «μεταφερθεί» αντίστοιχα για το ημιελλειψοειδές μοντέλο -και γενικότερα σε ακίδες των οποίων το προφίλ είναι τοπικά τετραγωνικό (locally quadratic)-χρησιμοποιώντας μια κατάλληλη γωνία θ' .

Θεωρούμε λοιπόν ένα κατακόρυφο ημιελλειψοειδές πάνω σε ένα γειωμένο επίπεδο μέσα σε ένα εξωτερικό ηλεκτροστατικό πεδίο $-E_0 z$ με τις δυναμικές γραμμές του να είναι παράλληλες με τον άξονα συμμετρίας του συστήματος και να καταλήγουν στη γειωμένη μεταλλική επιφάνεια. Είναι βολικό εδώ να εισαγάγουμε τις σφαιροειδείς συντεταγμένες (prolate spheroidal coordinates): (ξ, η, φ) [56]. Αυτές συνδέονται με τις Καρτεσιανές μέσω των ακόλουθων σχέσεων:

$$\begin{aligned}x &= L\sqrt{(\eta^2 - 1)(1 - \xi^2)}\cos\varphi \\y &= L\sqrt{(\eta^2 - 1)(1 - \xi^2)}\sin\varphi \\z &= L\eta\xi\end{aligned}$$

όπου

$$L = \sqrt{h^2 - b^2}$$

και h είναι το ύψος του ημιελλειψοειδούς ενώ b είναι η ακτίνα της βάσης του. Σημειώνεται ότι στο σύστημα συντεταγμένων αυτό, σταθεροποιώντας ένα $\eta = \eta_0$ αντιστοιχεί σε μια ελλειψοειδή επιφάνεια και πάνω σε μια τέτοια θεωρούμε ότι κείται η ακίδα. Η λύση λοιπόν της εξίσωσης Laplace για το εν λόγω σύστημα δίνεται από [51, 57]:

$$V(\eta, \xi) = \eta \xi \left[LE_0 + D \left(\frac{1}{2} \ln \frac{\eta + 1}{\eta - 1} - \frac{1}{\eta} \right) \right]$$

όπου

$$D \equiv -LE_0 \left(\frac{1}{2} \ln \frac{\eta_0 + 1}{\eta_0 - 1} - \frac{1}{\eta_0} \right)^{-1}$$

Προκειμένου να συσχετιστεί το παραπάνω δυναμικό με το συντελεστή ενίσχυσης πεδίου πρέπει να βρεθεί η εγκάρσια παράγωγός (normal derivative) του στην επιφάνεια η_0 του εκπομπού. Αυτή, σύμφωνα με τη θεωρία ορθογώνιων καμπυλόγραμμων συντεταγμένων [55], δίνεται από την ποσότητα:

$$E_{local} = -\hat{\eta} \left(\frac{1}{h_\eta} \frac{\partial V}{\partial \eta} \right)_{\eta=\eta_0}$$

όπου $\hat{\eta}$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα στη διεύθυνση η και ο συντελεστής κλίμακος (scale factor) του συστήματος στη διεύθυνση αυτή ισούται με

$$h_\eta = \sqrt{\frac{L^2}{\eta_0^2 - 1} (\eta_0^2 - \xi^2)}$$

Έτσι το μέτρο του πεδίου στη μεταλλική επιφάνεια δίνεται από:

$$E_{local}(\xi) = -\frac{\xi}{h_\eta} \left[LE_0 + \frac{D}{2} \ln \frac{\eta_0 + 1}{\eta_0 - 1} - \frac{D\eta_0}{\eta_0^2 - 1} \right]$$

Υπενθυμίζεται ότι στο σύστημα αυτό και στην κορυφή της ακίδας είναι $\xi=1$. Έτσι:

$$\frac{\gamma(\eta_0, \xi)}{\gamma_\kappa} = \frac{\xi \sqrt{\eta_0^2 - 1}}{\sqrt{\eta_0^2 - \xi^2}}$$

Με μετατροπή σε κυλινδρικές συντεταγμένες z και ρ πάνω στην επιφάνεια η_0 , λαμβάνοντας υπόψιν ότι $\xi=z/\eta_0 L$, $z^2/h^2 + \rho^2/b^2 = 1$ και ότι η ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή ισούται με $R=b^2/h$, προκύπτει:

$$\gamma(\eta_0, z, \rho) = \gamma_\kappa \frac{z/h}{\sqrt{(z/h)^2 - (\rho/R)^2}}$$

Θέτοντας $z'=z/h$ και $\rho'=\rho/R$, ορίζουμε:

$$\cos \theta' \equiv \frac{z'}{\sqrt{(z')^2 - (\rho')^2}}$$

συνεπώς

$$\gamma(\eta_0, \theta') = \gamma_\kappa \cos \theta'$$

Στην ειδική περίπτωση που $h=R$, δηλαδή το ημιελλειψοειδές εκπίπτει σε ημισφαίριο, προκύπτει $\theta'=\theta$ και ο παραπάνω τύπος δίνει, όπως οφείλει, την προαναφερθείσα εξάρτηση από τη γωνία θ . Ο γενικευμένος αυτός τύπος εξάρτησης του γ από το θ' στην περιοχή της αιχμής ισχύει για οποιαδήποτε τοπικά καμπυλωμένη μεταλλική επιφάνεια [54], όπως είναι όλες οι ακίδες που χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές εκπομπής

ηλεκτρονίων. Τέτοιες επιφάνειες περιγράφονται τοπικά στην αιχμή τους από μια μαθηματική έκφραση της μορφής $z \sim h - (1/R)\rho^2$, με τα σύμβολα να έχουν τη συνήθη τους σημασία και τα h και R να είναι πειραματικώς προσδιορίσιμες παράμετροι. Οι Biswas et al. επιβεβαίωσαν τα παραπάνω αναλυτικά αποτελέσματα με ακριβείς αριθμητικούς υπολογισμούς του ηλεκτρικού πεδίου γύρω από ακίδες διαφόρων σχημάτων χρησιμοποιώντας κατάλληλες γραμμικές κατανομές φορτίων (line charge densities) για να «παραγάγουν» την εκάστοτε επιθυμητό ηλεκτροστατικό σύστημα προς προσομοίωση.

1.5 Ηλεκτρονική Μικροσκοπία

Πολλές από τις σύγχρονες τεχνολογίες βασίζονται σε δέσμες ηλεκτρονίων για τη λειτουργία τους. Μία από τις κυρίαρχες τεχνικές δημιουργίας τέτοιων δεσμών είναι η εκπομπή πεδίου, χάρη σε πλεονεκτήματα όπως μικρά μεγέθη πηγών ηλεκτρονίων, μεγάλη φωτεινότητα (brightness: πυκνότητα ρεύματος που προσπίπτει στην οθόνη ανίχνευσης) και ενεργειακό φάσμα εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων συγκεντρωμένο σε ένα στενό εύρος γύρω από τη στάθμη Fermi του υλικού. Χάρη σε αυτά τα πλεονεκτήματα η πεδιακή εκπομπή βρίσκει πολλές εφαρμογές σε πολλές τεχνολογίες, μία από τις οποίες είναι και η Ηλεκτρονική Μικροσκοπία. Υπάρχουν διάφορες κατηγορίες μικροσκοπιών που στηρίζουν τη λειτουργία τους με ποικίλους τρόπους στη φυσική των ηλεκτρονίων λόγω του μικρού τους μήκους κύματος σε σχέση με το φως στο οποίο στηρίζονται τα πιο παραδοσιακά οπτικά μικροσκόπια των οποίων όμως η ευκρίνεια περιορίζεται από το όριο περίθλασης (diffraction limit). Κατηγορίες ηλεκτρονικών μικροσκοπιών περιλαμβάνουν: FEM (Mueller, 1937) [64], TEM (Knoll-Ruska, 1932) [65], SEM (Von Ardenne, 1937) [66] και STM (Binnig-Rohrer, Nobel 1982) [67]. Μια πρωτότυπη υποκατηγορία SEM αποτελεί το NFESM το οποίο αναπτύχθηκε το 2009 στο ETH της Ελβετίας [3] ως μια εξελιγμένη και σύγχρονη μορφή του Topographiner (Young-Ward-Scire, 1972) [68].

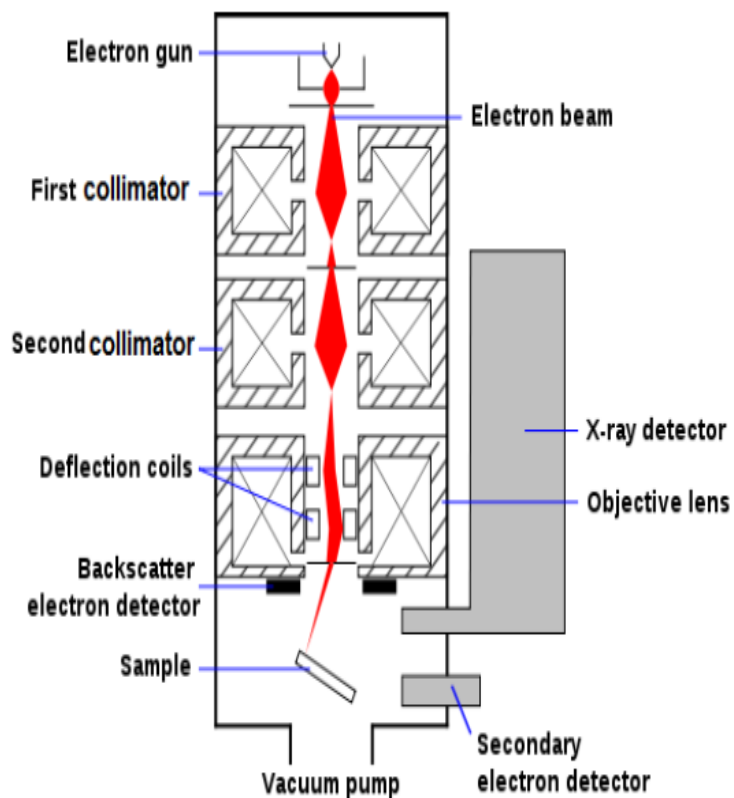
Παρά το γεγονός ότι κάθε είδος μικροσκοπίου παρουσιάζει τα δικά του ιδιαίτερα κατασκευαστικά και λειτουργικά χαρακτηριστικά, όλα τα προαναφερθέντα ηλεκτρονικά μικροσκόπια μοιράζονται κοινές βασικές αρχές λειτουργίας. Πιο συγκεκριμένα, περιλαμβάνουν: μια πηγή ηλεκτρονίων (εκπομπός ή κάθοδος, source), όπου λαμβάνει χώρα η εκπομπή ηλεκτρονίων υπό την επίδραση εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου προκύπτοντος από εφαρμοζόμενη ηλεκτρική τάση V , ένα δείγμα (άνοδος ή οθόνη), όπου συμβαίνει η αλληλεπίδραση της προσπίπτουσας δέσμης με την ύλη (interaction with matter) και από την οποία εξάγονται τα χρήσιμα συμπεράσματα του εκάστοτε πειράματος, και, τέλος, ένα σύστημα ανιχνευτών (αισθητήρων) (detection stage) για την καταμέτρηση και το διαχωρισμό των διαφόρων ειδών ηλεκτρονίων και ακτινοβολιών (ανακλώμενων-backscattered, δευτερευόντων-secondary, Auger, X-rays κλπ.) που φέρουν και τις διαφορετικές χρήσιμες πληροφορίες για το υπό μελέτη δείγμα (ή τον ίδιο τον εκπομπό) (μορφολογικά χαρακτηριστικά, χημική σύνθεση, μαγνητικές και ηλεκτρικές ιδιότητες, κ.α.). Πιο συγκεκριμένα, για

παράδειγμα, χαρακτηριστική εφαρμογή του FEM αποτελεί η χρήση του για εργαστηριακή ανίχνευση έργων εξόδου, ακαθαρσιών και γεωμετρίας (συντελεστής τοπικής ενίσχυσης πεδίου) διάφορων εκπομπών.

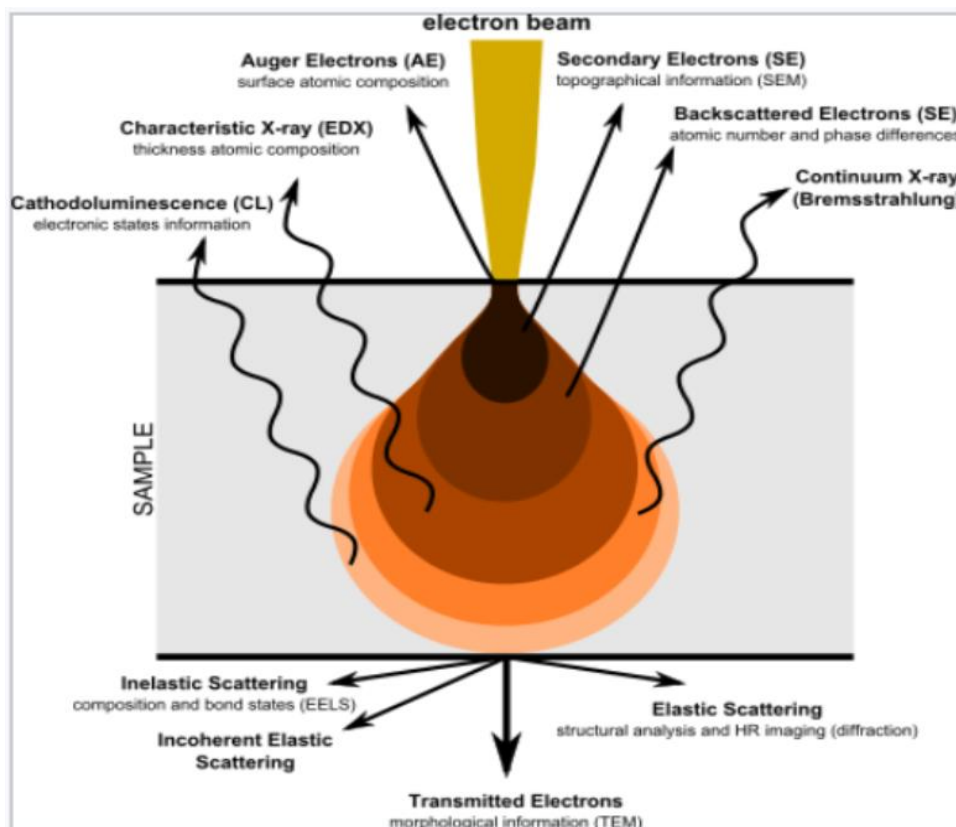
Παραδοσιακά, τα ηλεκτρονικά μικροσκόπια φέρουν σύστημα ηλεκτροοπτικής εστίασης (electromagnetic lensing system) με σκοπό τη συγκέντρωση της δέσμης σε όσο το δυνατόν μικρότερη περιοχή στο δείγμα, όπου γίνεται η αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με αυτό, με σκοπό την αύξηση της ανάλυσης (ακρίβειας, ευκρίνειας, resolution, precision, spot size) του οργάνου. Σάρωση της επιφάνειας του δείγματος κατά μήκος αξόνων δίνει μια πλήρη εικόνα των χαρακτηριστικών του.

Σε κάποιες από τις σύγχρονες μορφές ηλεκτρονικής μικροσκοπίας παρατηρείται η απουσία τέτοιων ηλεκτρομαγνητικών φακών, κάνοντας τα πιο απλά σε σχεδίαση, κατασκευή και λειτουργία, πιο μικρά σε μέγεθος και, φυσικά, πιο οικονομικά στην υλοποίηση. Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι το STM στο οποίο η ακίδα σάρωσης είναι σχεδόν σε «επαφή» με το υπό μελέτη δείγμα και το οποίο επιτυγχάνει βέλτιστη ευκρίνεια σε κλίμακα Angstrom (0.1 nm) απεικονίζοντας μεμονωμένα άτομα! Οι ακρίβειες των SEM και TEM φτάνουν στην καλύτερη περίπτωση μέχρι τα 5 Angstrom.

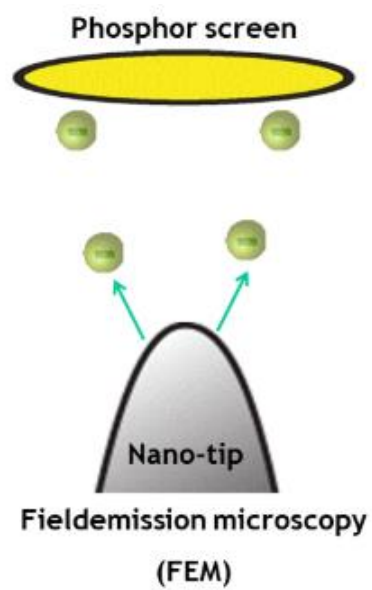
Στο NFESSEM, το οποίο αποτελεί υβρίδιο δανειζόμενο χαρακτηριστικά τόσο από SEM όσο και από STM, η ακίδα φέρεται σε κάποια, μικρή σχετικά, απόσταση d (της τάξης των 5 - 25 nm) από την άνοδο. Η ανάλυση του νέου οργάνου καθορίζεται, πλέον, αποκλειστικά από τη διατομή της εκπεμπόμενης ηλεκτρονικής δέσμης η οποία, με τη σειρά της, εξαρτάται μόνο (*self-focusing* [69]) από γεωμετρικές, κυρίως, παραμέτρους της διάταξης όπως τα d , R , V , πέραν από το έργο εξόδου του υλικού από το οποίο είναι κατασκευασμένος ο εκπομπός, βεβαίως. Εμπειρικά έχει προσδιοριστεί ότι η δέσμη ηλεκτρονίων «απλώνεται» σύμφωνα με το νόμο $\sim d/R$ και επιτυγχάνονται μεγεθύνσεις της τάξεως του 10^6 . Η καλύτερη ακρίβεια του οργάνου αυτή έχει παρατηρηθεί γύρω στα 1-2nm.



Σχήμα 1-10. Σχηματικό διάγραμμα παραδοσιακού ηλεκτρονικού μικροσκοπίου SEM



Σχήμα 1-11. Αλληλεπίδραση δέσμης ηλεκτρονίων με την ύλη (δείγμα)



Σχήμα 1-12. Σχηματικό διάγραμμα μικροσκοπίου πεδιακής εκπομπής

1.6 Βιβλιογραφικές Αναφορές Κεφαλαίου

- [1] Cutler PH, He J, Miskovsky NM, Sullivan TE, Weiss B. 1993 Theory of electron emission in high fields from atomically sharp emitters: validity of the Fowler–Nordheim equation. *J. Vac. Sci. Technol. B*. **11**, 387–391.
- [2] Kyritsakis A, Xanthakis JP. 2015 Derivation of a generalized Fowler–Nordheim equation for nanoscopic field-emitters. *Proc. R. Soc. A* **471**: 20140811.
- [3] T. L. Kirk, U. Ramsperger and D. Pescia, "Near field emission scanning electron microscopy," *J. Vac. Sci. Technol. B*, 2009.
- [4] J. H. Winckler, Gedanken von den Eigenschaften, Wirkungen und Ursachen der Electricität nebst Beschreibung zweiner electrischer Maschinen, Leipzig: Breitkopf, 1744.
- [5] J. J. Thomson, "Cathode Rays," *Philos. Mag.*, 1897.
- [6] J. E. Lilienfeld, A new instrument for measuring X-radiation, *Am. J. Roentgenology*, 1922
- [7] R. A. Millikan and C. C. Lauritsen, "Relations of field-currents to thermionic-currents," *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1928.
- [8] J. R. Oppenheimer, "Three notes on the quantum theory of aperiodic effects," *Phys. Rev.*, 1928.
- [9] Fowler RH, Nordheim L. 1928 Electron emission in intense electric fields. *Proc. R. Soc. A* **119**, 173-181
- [10] A. Sommerfeld, "Zur Elektronentheorie der Metalle," *Naturwiss*, 1927.
- [11] E. Fermi, "Sulla quantizzazione del gas perfetto monoatomico," *Rendiconti Lincei*, 1926.
- [12] P. A. M. Dirac, "On the Theory of Quantum Mechanics," *Proc. R. Soc. A*, 1926.
- [13] L. W. Nordheim, "The Effect of the Image Force on the Emission and Reflexion of Electrons by Metals," *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1928.
- [14] H. Jeffreys, "On certain approximate solutions of linear differential equations of the second order," *Proceedings of the London Mathematical Society*, 1924.
- [15] G. Wentzel, "Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik," *Zeitschrift für Physik*, 1926.
- [16] H. A. Kramers, "Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung," *Zeitschrift für Physik*, 1926.

- [17] L. Brillouin, "La mécanique ondulatoire de Schrödinger: une méthode générale de resolution par approximations successives," *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences*, 1926.
- [18] Kapur P.L. and Peirls, 1937. Penetration into potential barriers in several dimensions. *Proc R. Soc. London Ser. A* 163, 606
- [19] E. L. Murphy and R. H. Good, "Thermionic emission, field emission, and the transition region.," *Phys. Rev.*, 1956.
- [20] GN Fursey and DV Glazanov. Deviations from the Fowler-Nordheim theory and peculiarities of _eld electron emission from small-scale objects. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 1998.
- [21] Jun He, PH Cutler, and NM Miskovsky. Generalization of Fowler-Nordheim field emission theory for nonplanar metal emitters. *Applied Physics Letters*, 1991.
- [22] JD Zuber, Kevin L Jensen, and TE Sullivan. An analytical solution for microtip field emission current and effective emission area. *Journal of Applied Physics*, 2002.
- [23] Edgcombe CJ. 2005 Development of Fowler–Nordheim theory for a spherical field emitter. *Phys. Rev. B* 72, 045420.
- [24] Richard G Forbes. Thin-slab model for field electron emission. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*, 2010.
- [25] Xi-Zhou Qin, Wie-Liang Wang, Ning-Sheng Xu, Zhi-Bing Li, and Richard G Forbes. Analytical treatment of cold field electron emission from a nanowall emitter, including quantum confinement effects. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2011.
- [26] Chatziafratis A, Fikioris G and Xanthakis JP, “Exact eigenstates of a nanometric paraboloidal emitter”, *Proceedings of the Royal Society A* (2018).
- [27] Chatziafratis A and Xanthakis JP, “Field emission from a nanometric paraboloidal emitter”, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* (2019).
- [28] W Schottky. Influence of structure-action especially the Thomson constructive force, on the electron emission of metals. *Phys. Z*, 1914.
- [29] Richard G Forbes. Simple good approximations for the special elliptic functions in standard Fowler-Nordheim tunneling theory for a Schottky-Nordheim barrier. *Applied Physics Letters*, 2006
- [30] R.G. Forbes, *Solid State Electron.* 45/6 (2001) 779.
- [31] R.V. Latham, *High Voltage Vacuum Insulation: The Physical Basis*, Academic Press, London, 1981.

- [32] R.V. Latham (Ed.), High Voltage Vacuum Insulation: Basic Concepts and Technological Practice, Academic Press, London, 1995.
- [33] W.P. Dyke, W.W. Dolan, Adv. Electron. Electron Phys. 8 (1956) 90.
- [34] C.J. Edgcombe, U. Valdre, Solid State Electron. 45/6 (2001) 857.
- [35] C.J. Edgcombe, U. Valdre. Microscopy and computational modelling to elucidate the enhancement factor for field electron emitters. J. Microsc. 203 (2001) 188.
- [36] J.H. Jeans, The Mathematical Theory of Electricity and Magnetism, 4th Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1920, p.194.
- [37] D.J. Rose, J. Appl. Phys. 27 (1964) 215.
- [38] G.E. Vibrans, Technical Report 353, Lincoln Laboratory, MIT, 1964.
- [39] G.E. Vibrans, Vacuum voltage breakdown as a thermal instability of the emitting protrusion. J. Appl. Phys. 35 (1964) 2855.
- [40] F. Rohrbach, CERN Report 71-5/TC-L, 1971.
- [41] H.D. Beckey, Principles of Field Ionization and Field Desorption Mass Spectrometry, 1st Edition, Pergamon Press, Oxford, 1977, p.84.
- [42] T. Utsumi, Vacuum microelectronics: what's new and exciting. IEEE Trans. Electron. Dev. ED-38 (1991) 2276.
- [43] D. Nicolaescu, Physical basis for applying the Fowler-Nordheim relationship to experimental data. J. Vac. Sci. Technol. B 11 (1993) 392.
- [44] N.S. Xu, The Physical Origin of Pre-Electron Breakdown Pinholes, in: R.V. Latham (Ed.), High Voltage Vacuum Insulation: Basic Concepts and Technological Practice, Academic Press, London, 1995.
- [45] M.K. Miller, A. Cerezo, M.G. Heatherington, G.D.W. Smith, Atom Probe Field Ion Microscopy, Clarendon, Oxford, 1996, p.50, and references therein.
- [46] G. Kokkorakis, A. Modinos, J.P. Xanthakis, 47th International Field Emission Symposium, Berlin, 2001; G. Kokkorakis, A. Modinos, J.P. Xanthakis, J. Appl. Phys. 91 (2001) 4580.
- [47] P.M. Morse, H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, McGraw Hill, New York, 1953.
- [48] H.C. Miller, Change in field intensification factor of an electrode projection at short gap lengths. J. Appl. Phys. 38 (1967) 4501.
- [49] S. Podenok, M. Sveningsson, K. Hansen, E.E.B. Campbell. Electric field enhancement factors around metallic end-capped cylinder. Nano 1 (2006) 87.
- [50] F.H. Read, N.J. Bowring, Nucl. Ins. Meth. Phys. Res. 519 (2004) 305.

- [51] H.G. Kosmahl, Analytic evaluation of field emission enhancement factors for ellipsoidal cones and elliptic cross-section wedges. *IEEE Trans. Electron Devices* 38 (1991) 1534.
- [52] C.A. Spindt, I. Brodie, L. Humphrey, E.R. Westerberg, Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones. *J. Appl. Phys.* 47 (1976) 5248.
- [53] N. Li, B. Zeng, in: 25th International Vacuum Nanoelectronics Conference, Jeju, 2012, pp. 1–2, doi: 10.1109/IVNC.2012.6316885.
- [54] D. Biswas, R. Kumar. Calculating field emission current in nanodiodes: a multi-group formalism with space charge and exchange-correlation effects. *J. App. Phys.* 115 (2014) 114302.
- [55] D.J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, Third Ed., Prentice Hall of India, New Delhi, 1998.
- [56] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*, Elsevier, Oxford, 1984.
- [57] D. Biswas, G. Singh, R. Kumar. Modelling field emitter arrays using nonlinear line charge distribution. *J. App. Phys.* 120 (2016) 124307.
- [58] Richard G Forbes. *Physics of generalized Fowler-Nordheim-type equations*. Journal of Vacuum Science & Technology B, 2008.
- [59] Lev Davidovitch Landau and Evgueni Mikhailovitch Lifshitz. *Course of Theoretical Physics. Volume 3: Quantum Mechanics*, 1965
- [60] Richard G Forbes. On the need for a tunneling pre-factor in Fowler-Nordheim tunneling theory. *Journal of Applied Physics*, 2008
- [61] Robert Stratton. Theory of field emission from semiconductors. *Physical Review*, 1962
- [62] Beverly A Politzer and PH Cutler. Theory of electron tunneling from d bands in solids I. Application to field emission. *Materials Research Bulletin*, 1970
- [63] John William Gadzuk and EW Plummer. Field emission energy distribution. *Reviews of Modern Physics*, 1973
- [64] E. W. Mueller, "Elektronenmikroskopische Beobachtungen von Feldkathoden," *Z. Phys.*, 1937.
- [65] M. Knoll and E. Ruska, "Das Elektronenmikroskop," *Z. Phys.*, 1932.
- [66] M. von Ardenne, "Das Elektronen-Rastermikroskop. Theoretische Grundlagen," *Z. Phys.*, 1938.
- [67] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber and E. Weibel, "Surface studies by scanning tunneling microscopy," *Phys. Rev. Lett.*, 1982.

- [68] R. Young, J. Ward and F. Scire, "The Topographiner, an instrument for measuring surface micrography," *Rev. Sci. Instrum.*, 1972.
- [69] JP Xanthakis, TL Kirk, D Pescia. Self focusing of field emitted electrons at an ellipsoidal tip. *Applied Physics Letters*, 2010
- [70] Richard G Forbes, CJ Edgcombe, and U Valdre. Some comments on models for field enhancement. *Ultramicroscopy*, 2003.
- [71] D. Biswas , G. Singh , S.G. Sarkar, R. Kumar. *Ultramicroscopy* 185, 2018.
- [72] A. Chatziafratis and J.P. Xanthakis. 2020 "Correction factors for field emission from a nanoscopic emitter based on ab initio calculation of the electron eigenstates". *Proceedings of the International Vacuum Nanoelectronics Conference 2020, IEEE Xplore Digital Library*
- [73] Zanin DA, Cabrera H, De Pietro LG, Pikulski M, Goldmann M, Ramsperger U, Pescia D, Xanthakis JP. 2012 Fundamental aspects of near-field emission scanning electron microscopy. *Advances in Imaging and Electron Physics*. **170**, 227–258.
- [74] Gomer R, 1993 Field Emission and Field Ionization, *American Institute of Physics*, ch.2.

*One of the basic rules of the Universe is that nothing is perfect; Without imperfection,
neither i nor you would exist*

-Stephen Hawking

*Αν δε στηρίζεις το ένα σου πόδι έξω απ'τη Γη, ποτέ σου δεν θα μπορέσεις να σταθείς
επάνω της*

-Οδυσσέας Ελύτης

2^ο Κεφάλαιο

2.1 Η μέθοδος WKB

Η μέθοδος αυτή είναι μια διαδικασία εύρεσης προσεγγιστικών λύσεων σε γραμμικές διαφορικές εξισώσεις με μεταβλητούς συντελεστές, όπου η μεγιστοβάθμια παράγωγος πολλαπλασιάζεται με μία σχετικά «μικρή» φυσική ποσότητα. Στα πλαίσια, λοιπόν, της ημικλασικής προσέγγισης, που μας αγορά στο πρόβλημα της ηλεκτρονιακής εκπομπής, εφαρμόζουμε τη μέθοδο, συγκεκριμένα, στην εξίσωση Schroedinger. Στόχος μας, με τον τρόπο αυτό, είναι ο προσδιορισμός ιδιοκαταστάσεων, δηλαδή ενεργειακών ιδιοτιμών και κυματοσυναρτήσεων, καθώς επίσης και του συντελεστή διέλευσης μέσα από το φράγμα δυναμικού που έχουμε στο πρόβλημα. Το τελευταίο είναι ιδιαίτερα χρήσιμο για προβλήματα πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων, γενικώς, όπου ο συντελεστής διάδοσης είναι απαραίτητος για τον υπολογισμό του εκπεμπόμενου ρεύματος.

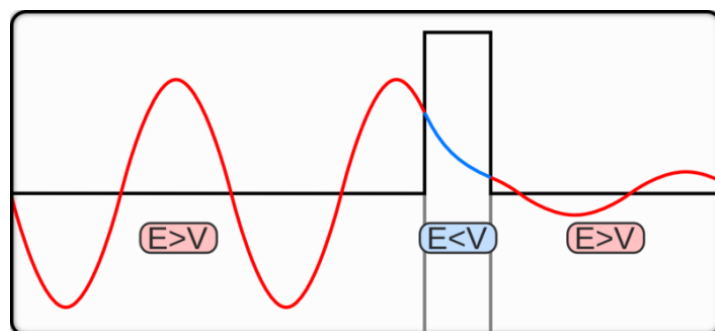
Μία εγγενής δυσκολία που εμφανίζει η μέθοδος είναι η απόκλιση της προσεγγιστικής λύσης από την ακριβή κοντά στα κλασικά σημεία καμπής (turning points). Αυτό δυσκολεύει τη σύνδεση των επιμέρους εκφράσεων της λύσης στις διάφορες περιοχές του χώρου όπου εκτείνεται το δυναμικό η οποία είναι απαραίτητη για την εύρεση του συντελεστή διέλευσης. Αυτό έχει αντιμετωπιστεί επιτυχώς με τοπική επίλυση της εξίσωσης και χρήση των ειδικών συναρτήσεων Airy, οδηγώντας στις λεγόμενες συνδετικές σχέσεις (connection formulae). Εν γένει πάντως, η ακρίβεια των λύσεων, που προσφέρει η προσέγγιση WKB, αυξάνει όσο πιο αργά μεταβάλλεται ο όρος που αντιπροσωπεύει το δυναμικό στην εξίσωση Schroedinger αλλά και όσο πιο μακριά βρισκόμαστε από τα σημεία καμπής.

Η ανάλυση της μονοδιάστατης μεθόδου παρουσιάζεται αναλυτικά στο κλασικό εγχειρίδιο των Landau-Lifshitz, στην εργασία των Cocolichio-Viggiano [1] καθώς και στη διδακτορική διατριβή Kyritsakis [2]. Περιληπτικά, η εφαρμογή της μεθόδου ξεκινά υποθέτοντας μία συγκεκριμένη συναρτησιακή μορφή (ansatz) για τη λύση: τη μιγαδική πολική έκφραση, η οποία βέβαια είναι ικανή να αναπαραστήσει, για κατάλληλες συναρτήσεις μέτρου και φάσης, οποιαδήποτε αρκετά «ομαλή» συνάρτηση που αφορά ένα φυσικό πρόβλημα. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση, προκύπτει μια μη γραμμική διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης για τη μιγαδική φάση. Αναπτύσσουμε διαταρακτικά ως προς τη σταθερά Planck $\hbar$ και ταυτίζουμε «όμοιους» όρους μέχρι τάξης που υπαγορεύεται από την επιθυμητή ακρίβεια των εκφράσεων που θα λάβουμε σε σχέση με τη θεωρητική λύση. Προκύπτουν, έτσι, οι προσεγγιστικές λύσεις για κάθε περιοχή του χώρου που ορίζεται από τα σημεία καμπής.

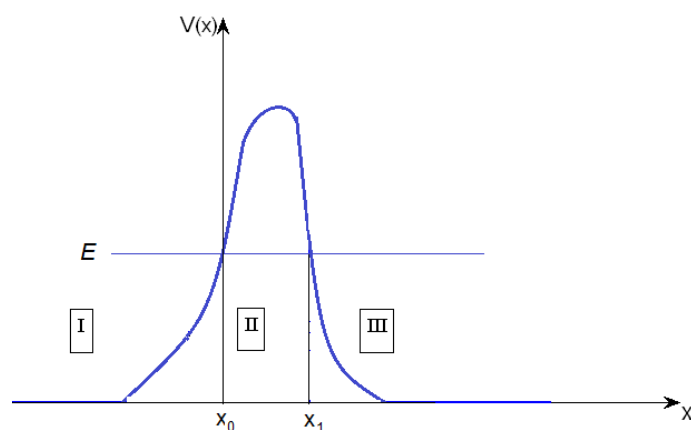
Οι εκφράσεις αυτές αποτυγχάνουν, δηλαδή απειρίζονται (become unbounded), καθώς πλησιάζουμε τα «ανώμαλα» (εκφυλισμένα, singular, degenerate) αυτά σημεία. Για να επιβληθούν - και να αξιοποιηθούν - οι φυσικές απαιτήσεις επί της λύσης, δηλαδή η ομαλότητα και η φραγμότητα (finiteness, boundedness), επιλύουμε *ακριβώς* την αρχική εξίσωση *τοπικά* σε κάθε ένα σημείο καμπής ξεχωριστά, χρησιμοποιώντας για το δυναμικό το αντίστοιχο τοπικό ανάπτυγμα κατά Taylor, οδηγούμενοι έτσι στις συναρτήσεις του Airy. Χρήση των ασυμπτωτικών αναπαραστάσεών τους στις

διάφορες περιοχές εκατέρωθεν των σημείων καμπής μας επιτρέπει τη σύνδεση, αφενός, των ταλαντούμενων (oscillatory) με τις, αφετέρου, εκθετικά μειούμενες (evanescent) WKB εκφράσεις. (ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ II)

Έχοντας, τέλος, πλήρως προσδιορισμένες εκφράσεις για τις κυματοσυναρτήσεις αριστερά και δεξιά του δυναμικού φράγματος (potential hill), προσδιορίζουμε το συντελεστή διέλευσης χρησιμοποιώντας τον κβαντομηχανικό ορισμό του για προβλήματα φαινομένου σήραγγος.



Σχήμα 2-1. Ορθογώνιο φράγμα δυναμικού. Επιλύσιμο αναλυτικά.



Σχήμα 2-2. [2] Αυθαίρετο φράγμα δυναμικού. Η μέθοδος WKB δίνει το συντελεστή διάδοσης προσεγγιστικά.

2.1.1 Τρισδιάστατη WKB θεωρία σήραγγος των Das-Mahanty

Άλλες μελέτες που έχουν ασχοληθεί με τη μοντελοποίηση της ηλεκτρονιακής εκπομπής από αιχμηρές γεωμετρίες ακολούθησαν μια άλλη μέθοδο προσέγγισης του ζητήματος, εγκαταλείποντας τη μονοδιάστατη θεωρία FN, γενικώς. Σε αντίθεση με την περίπτωση επίπεδου ηλεκτροδίου, σε διατάξεις που φέρουν καμπύλες επιφάνειες οι ισοδυναμικές επιφάνειες κοντά στην εκπέμπουσα ακίδα δεν είναι παράλληλες προς αυτή. Επομένως, το φράγμα δυναμικού που βλέπουν τα ηλεκτρόνια του μετάλλου έχει διαφορετικό σχήμα, εύρος και ύψος, ενώ συγχρόνως το τοπικό πεδίο έχει διαφορετική

ένταση σε κάθε σημείο της επιφάνειας που καμπυλώνει απότομα. Κατά συνέπεια, το ηλεκτρικό πεδίο ασκεί στα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια δυνάμεις που τα αναγκάζουν να κινούνται προς διάφορες κατευθύνσεις στον τρισδιάστατο χώρο οδηγώντας σε μια σύζευξη των συνιστωσών (p_x , p_y , p_z) της ορμής.

Κατ'αυτόν τον τρόπο, το φαινόμενο σήραγγος και εκπομπής δεν είναι «διαχωρίσιμο» (separable) ώστε να μπορεί να διασπαστεί σε τρία ανεξάρτητα μονοδιάστατα προβλήματα σε κάθε μια από τις συντεταγμένες του συστήματος αναφοράς και, φυσικά, απαιτεί μια πολυδιάστατη μελέτη και αντιμετώπιση. Πιο συγκεκριμένα, σε μια διάσταση τα σημεία εισόδου και εξόδου των ηλεκτρονίων στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή καθώς και διαδρομή που ακολουθείται μεταξύ των σημείων αυτών είναι προφανώς μοναδικά καθορισμένα. Στις τρεις διαστάσεις, ωστόσο, υπάρχουν υπεραριθμήσιμες εκδοχές διαδρομών μεταξύ δυο δοθέντων σημείων του χώρου και επίσης υπεραριθμήσιμες επιλογές ζευγών σημείων! Κάθε ένας συνδυασμός τέτοιων επιλογών συνοδεύεται από μια πεπερασμένη, μη μηδενική, πιθανότητα «υλοποίησης». Επομένως, μια ακριβής αντιμετώπιση του εν λόγω προβλήματος απαιτεί να ληφθούν υπόψη όλες αυτές οι επιλογές ζευγών σημείων εισόδου-εξόδου στην απαγορευμένη περιοχή του φράγματος καθώς και οι επιλογές τροχιών και, κατόπιν, να αθροιστούν οι πιθανότητες για να προκύψει η συνολική πιθανότητα διέλευσης και εκπομπής. Αυτή είναι η βασική ιδέα που βρίσκεται ουσιαστικά πίσω από τη μέθοδο του *επικαμπύλιου ολοκληρώματος* (path integral method) του Feynman στην κβαντομηχανική [3]. Η πολυπλοκότητα αυτών των υπολογισμών μπορεί να μειωθεί δραματικά αν ληφθεί υπόψιν μόνο ένα ή μερικά από τα ηλεκτρονικά μονοπάτια, εκείνο ή εκείνα, δηλαδή, που έχουν τη μεγαλύτερη συνεισφορά στην πιθανότητα διέλευσης. Αυτή η ιδέα είναι ο πυλώνας και εναρκτήριο σημείο της ημικλασικής μεθόδου. Η πιο ενδεδειγμένη ημικλασική λύση στην πολυδιάστατη εξίσωση Schroedinger έχει δοθεί από τους Huang et al. [4] που ακολούθησαν την αρχική προσπάθεια των Karur και Peierls. Και οι δυο αυτές μελέτες έχουν αρκετές τεχνικές δυσκολίες. Μια σημαντικά απλοποιημένη αλλά και επαρκής θεωρία είναι εκείνη των Das και Mahanty [5] που περιορίζουν τα «αποδεκτά» μονοπάτια μόνο σε εκείνα που είναι κάθετα στην επιφάνεια του εκπομπού. Υπό αυτήν την παραδοχή και σε πρώτης τάξης προσέγγιση, οι κυματοσυναρτήσεις μέσα κι έξω από την απαγορευμένη περιοχή είναι:

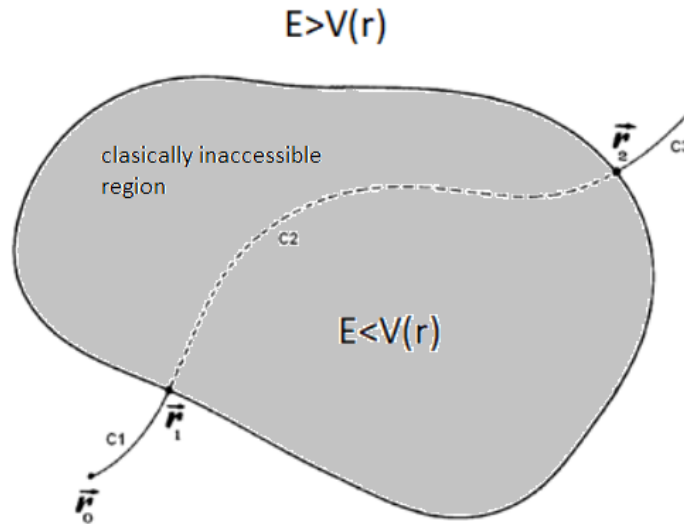
$$\Psi_{in} \sim \exp \left[i \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{h^2}} \int_{s_1}^{s_2} \sqrt{E - V(\mathbf{r})} ds \right]$$

$$\Psi_{out} \sim \exp \left[- \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{h^2}} \int_{s_1}^{s_2} \sqrt{E - V(\mathbf{r})} ds \right]$$

όπου η s -διαδρομή του ηλεκτρονίου προσδιορίζεται από τους νόμους της κλασικής μηχανικής με την αντικατάσταση $E \rightarrow -E$, $V(\mathbf{r}) \rightarrow -V(\mathbf{r})$ ή, ισοδύναμα, $t \rightarrow it$ (μεταφορά του χρόνου στο φανταστικό άξονα). Τότε ο συντελεστής διάδοσης μέσα από το φράγμα προκύπτει από το λόγο της εξερχόμενης πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας προς την εισερχόμενη:

$$T(E, s_1, s_2) = \sqrt{\frac{\left(\frac{dV}{ds}\right)_{s_2}}{\left(\frac{dV}{ds}\right)_{s_1}}} \exp\left\{-\frac{2\pi}{h} \int_{s_1}^{s_2} \sqrt{2m[V(\mathbf{r}) - E]} ds\right\}$$

Άλλες μελέτες βασιζόμενες στην ημικλασική προσέγγιση και εστιαζόμενες σε ηλεκτρονική μικροσκοπία είναι οι [6,7].



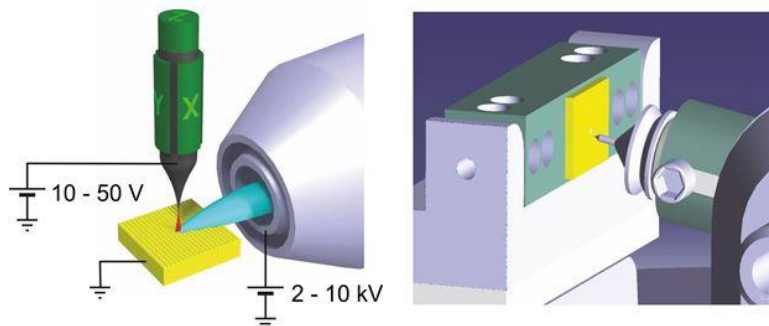
Σχήμα 2-3. [5] Τρισδιάστατο φράγμα δυναμικού

2.2 Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο εκπομπής κοντινού πεδίου - NFESEM

Στην παραδοσιακή ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης (SEM) μια εικόνα δημιουργείται με δειγματοληψία ηλεκτρονίων που εκπέμπονται από την επιφάνεια του υπό μελέτη δείγματος ως αποτέλεσμα της πρόσπτωσης μιας πολύ καλά εστιασμένης ηλεκτρονικής δέσμης που σαρώνει το δείγμα [8]. Τα πρωτεύοντα ηλεκτρόνια (primary electrons) προκαλούν δευτερεύοντα ηλεκτρόνια (secondary electrons) στο σημείο όπου προσπίπτει η δέσμη ρεύματος και τα οποία ανιχνεύονται από κατάλληλα όργανα. Η δημιουργία της πρωτεύουσας δέσμης και ο μηχανισμός σάρωσης τυπικά απαιτούν μια πολύπλοκη σειρά από ηλεκτρομαγνητικές συσκευές που προσδίδουν στη στήλη της δέσμης του SEM μακροσκοπικές διαστάσεις, συνήθως ενός περίπου μέτρου σε μήκος.

Ο κύριος στόχος του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου εγγύς πεδίου (NFESEM) [9] είναι η διενέργεια ενός είδους χαρτογράφησης της τοπολογίας της επιφάνειας του δείγματος μέσω σάρωση της πρωτεύουσας δέσμης πάνω στην εν λόγω επιφάνεια. Για λόγους ευκρίνειας της τελικής εικόνας, η δέσμη αυτή πρέπει να είναι εξαιρετικά καλά εστιασμένη και περιορισμένη σε χωρική έκταση της τάξης των μερικών νανομέτρων. Για το σκοπό αυτό, η πηγή ηλεκτρονίων, δηλαδή μια ακίδα εκπομπής ηλεκτρονίων, τοποθετείται σε απόσταση μερικών δεκάδων nm από την επιφάνεια ενδιαφέροντος με τη βοήθεια κατάλληλης πιεζοηλεκτρικής συσκευής που ελέγχεται από εφαρμογή

συγκεκριμένων ηλεκτρικών τάσεων. Η δημιουργία της επιθυμητής χαρτογράφησης στηρίζεται στη μέτρηση δύο ξεχωριστών, αλλά άμεσα συνδεδεμένων, σημάτων: του ρεύματος πεδιακής εκπομπής και του ρεύματος των δευτερευόντων ηλεκτρονίων που εξέρχονται του δείγματος.



Σχήμα 2-4. [9] Σχηματική αναπαράσταση του πρόσφατου SEM κοντινού πεδίου

Κατ' αρχήν, όπως έχουμε πει, η διαδικασία της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων βασίζεται στο κβαντομηχανικό φαινόμενο σήραγγος κατά το οποίο ηλεκτρόνια του μετάλλου διέρχονται μέσα από ένα κλασικά απαγορευμένο φράγμα δυναμικού και καταλήγουν στο κενό. Τα ηλεκτρόνια είναι γενικώς περιορισμένα μέσα στη μεταλλική ακίδα εξαιτίας του έργου εξόδου του μετάλλου που διαχωρίζει τη στάθμη Fermi από τη στάθμη κενού, απουσία κάθε εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου. Αν εφαρμοστεί ένα τέτοιο πεδίο, η στάθμη κενού χαμηλώνει και, εφόσον το πεδίο είναι αρκετά ισχυρό, το φράγμα δυναμικού καταλήγει να βρίσκεται κάτω από τη στάθμη Fermi σε ατομικές αποστάσεις από τη μεταλλική επιφάνεια. Τότε, υπάρχει μια μικρή, πλην όμως πεπερασμένη, πιθανότητα εκπομπής για τα ηλεκτρόνια που ευρίσκονται κοντά στη στάθμη αυτή, χάρη στην «ουρά» των κυματοσυναρτήσεών τους (στα πλαίσια της κυματικής περιγραφής τους). Αναγνωρίζοντας ότι αυτή η ουρά διεισδύει σε μια τυπική απόσταση των $\sim 4\text{nm}$ μέσα στο πεπερασμένο δυναμικό «τείχος» και ένα έργο εξόδου της τάξης των 4eV , το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο που απαιτείται για να κατεβάσει τη στάθμη κενού σε κατάλληλα επίπεδα και σε πολύ μικρές αποστάσεις από την επιφάνεια του μετάλλου είναι της τάξης των 10V/nm . Παρ' ότι αυτό είναι ένα πολύ ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο, μπορεί εύκολα να υλοποιηθεί εφαρμόζοντας τάση μόνο μερικών δεκάδων Volt μεταξύ μιας απλής επίπεδης ανόδου και μιας αιχμηρής καθόδου, χάρη στην ιδιόμορφη συμπεριφορά των ηλεκτροστατικών πεδίων σε έντονες γεωμετρικές αιχμές [10].

Τα διάφορα μοντέλα πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων από μέταλλα, που λαμβάνουν υπόψιν τους είτε την ακριβή γεωμετρία του εκπομπού -και συνεπώς το ακριβές προφίλ του φράγματος δυναμικού στην περιοχή της αιχμής απ' όπου προέρχεται η εκπομπή- είτε λεπτομερώς την ηλεκτρονική δομή του υλικού του εκπομπού, καταλήγουν σε ελαφρώς διαφορετικές μαθηματικές εκφράσεις για την εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος, δηλαδή σε παρουσία κατάλληλων συντελεστών διόρθωσης. Γενικώς όμως και παρά το γεγονός ότι το φαινόμενο της εκπομπής είναι ουσιαστικά κβαντομηχανικό,

πρακτικά υπάρχει συνήθως μια σχετικά απλή, σχεδόν αναλογική σχέση μεταξύ του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου F και του εκπεμπόμενου ρεύματος I_{FE} :

$$I_{FE} \sim \exp(-C/F)$$

όπου C είναι μια σταθερά που χαρακτηρίζει το υλικό και περιέχει ποσότητες όπως το ύψος του φράγματος που βλέπουν τα ηλεκτρόνια των διάφορων ενεργειακών επιπέδων πριν εκπεμφθούν στο κενό και λεπτομέρειες της χωρικής κατανομής του δυναμικού φράγματος και της διαδικασίας σήραγγος. Χρησιμοποιώντας το έργο εξόδου του πολύκρυσταλλικού βολφράμιου που είναι περίπου $4,5\text{eV}$ το C παίρνει περίπου την τιμή 65 V/nm . Προφανώς η εκπομπή συμβαίνει σε ένα πολύ μικρό μεν αλλά πεπερασμένο τμήμα της αιχμηρής μεταλλικής επιφάνειας. Έτσι η ποσότητα F στην παραπάνω εξίσωση είναι μια «φαινομενολογική» τιμή της τοπικής έντασης του πεδίου η οποία αντιπροσωπεύει μια «μέση» τιμή κατά μήκος της επιφάνειας απ' όπου προέρχεται το περισσότερο ρεύμα.

Πειραματικά, εκείνο που ρυθμίζεται εξωτερικά είναι το μακροσκοπικό πεδίο F_m μεταξύ ολόκληρου του εκπομπού και της ανόδου κι όχι το τοπικό πεδίο F . Για να συγκριθούν πειραματικά δεδομένα τάσης-ρεύματος και θεωρητικές τιμές από την πιο πάνω εξίσωση πρέπει πρώτα να συσχετιστεί το F με την εφαρμοζόμενη ηλεκτρική τάση V . Αυτό γίνεται μέσω της σχέσης:

$$F = \beta V$$

όπου το β είναι ένας παράγοντας μετατροπής από εφαρμοζόμενη τάση σε τοπικό πεδίο.

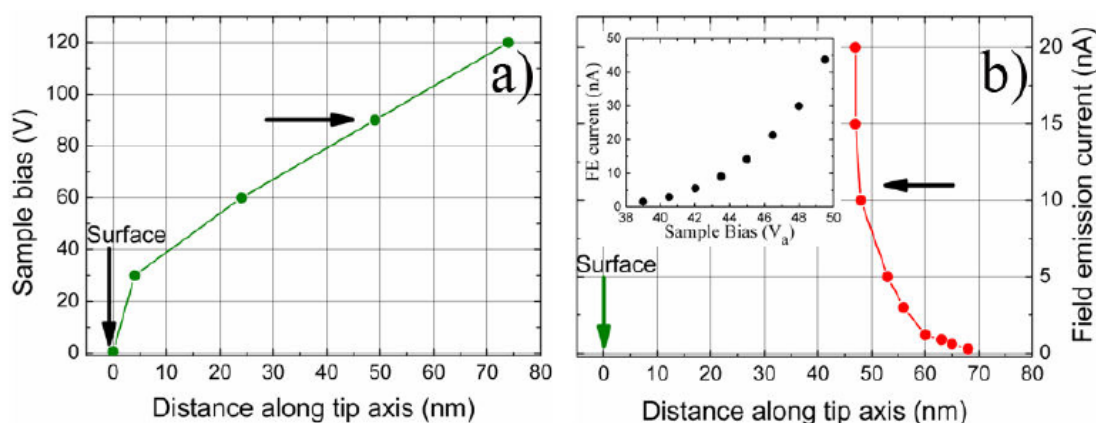
Ο συντελεστής β έχει μελετηθεί μέσω ηλεκτροστατικής ανάλυσης διαφόρων γεωμετριών συστήματος. Δύο οριακές μορφές είναι χαρακτηριστικές: σε διάταξη παράλληλων πλακών σε απόσταση d το β παίρνει την τιμή $1/d$. Αυτή η τιμή είναι μια αποδεκτή προσέγγιση και όταν η ακτίνα καμπυλότητας R της ακίδας είναι μεγαλύτερη από το d [11], διότι σε αυτήν την περίπτωση η επιφάνεια εκπομπής είναι κατ' ουσίαν σχεδόν επίπεδη. Αντιθέτως, αν $R \ll d$ τότε εμπειρικά και πρακτικά $\beta \sim 1/R$. Γενικότερα, για να αντιμετωπιστούν όλες οι ενδιάμεσες περιπτώσεις σχετικών μηκών, έχει εισαχθεί στη σχετική βιβλιογραφία η φαινομενολογική σχέση:

$$\beta = 1/(kR)$$

όπου το k ορίζεται ως ένας γεωμετρικός παράγοντας σχήματος (shape factor) ή παράγοντας μείωσης πεδίου (field reduction factor). Εμπειρικά, όταν ο εκπομπός είναι απομακρυσμένος από άλλα εξαρτήματα της διάταξης, το k υποτίθεται ότι παίρνει τιμές στο διάστημα 5-8 [12]. Το εύρος αυτό τιμών έχει προέλευση από το ακριβές αποτέλεσμα $k = (1/2)\log(4d/R)$ που αντιστοιχεί σε υπερβολοειδή γεωμετρία [11, 13] για $d \gg R$. Μια πολύ χρήσιμη μελέτη για την ενδιάμεση περιοχή τιμών όπου d και R είναι της ίδιας τάξης μεγέθους δόθηκε από τους Saenz et al [14] οι οποίοι δίνουν σε διαγραμματική μορφή τη μεταβολή του k για διάφορες τιμές του λόγου d/R . Ωστόσο, στην πραγματικότητα ο ακριβής τρόπος με τον οποίο μεταβάλλεται το k με τα R και d εξαρτάται από τη συγκεκριμένη γεωμετρία της εκάστοτε διάταξης και είναι συνήθως άγνωστος. Κατά συνέπεια, τις περισσότερες φορές ο προσδιορισμός της σχέσης ανάμεσα σε F και V στηρίζεται σε πειραματικές μετρήσεις.

Στο σχήμα 5 [8] δείχνονται χαρακτηριστικές μεταβολές της τάσης (a) και του ρεύματος (b) με την απόσταση d υπό σταθερό ρεύμα και σταθερή τάση αντίστοιχα. Σημειώνεται ότι σταθερό ρεύμα I_{FE} ουσιαστικά σημαίνει σταθερό πεδίο F . Από την πράσινη καμπύλη προκύπτει ότι κατά τη λειτουργία του NFESEM όπου το d είναι δεκάδες nm απαιτείται V που μεταβάλλεται σχεδόν γραμμικά με το d προκειμένου να διατηρηθεί το F πρακτικά σταθερό. Έτσι, στην περιοχή αυτή τιμών του d ισχύει $F \sim aV/d$ με τον αδιάστατο συντελεστή a να είναι μια σταθερά αναλογίας. Η σχέση αυτή κατ' επέκταση σημαίνει ότι $I_{FE} \sim \exp[-Cd/(aV)]$ και το a μπορεί να προσδιοριστεί από μια κλασική χαρακτηριστική ρεύματος-τάσης ($I_{FE} - V$) για μια συγκεκριμένη τιμή του d , όπως π.χ. το μικρό ενσωματωμένο διάγραμμα στο σχ. 5(b). Η τελευταία σχέση συνεπάγεται ότι το ρεύμα μεταβάλλεται εκθετικά με το d για σταθερό V , όπως πράγματι φαίνεται στις μετρήσεις του σχ. 5(b).

Εναλλακτικά και ισοδύναμα, μπορούν μετρηθούν πρώτα οι τιμές του ρεύματος καθώς το d μεταβάλλεται σε λειτουργία σταθερής τάσης, οπότε και προκύπτει το κόκκινο γράφημα, στο οποίο φαίνεται η απότομη πτώση του ρεύματος καθώς απομακρύνεται η πηγή ηλεκτρονίων από την άνοδο υπό σταθερή όμως διαφορά δυναμικού μεταξύ τους, όπως άλλωστε αναφέραμε και πιο πάνω.



Σχήμα 2-5. [8] Χαρακτηριστικές a) τάσης (υπό σταθερό ρεύμα) και b) ρεύματος (υπό σταθερή τάση) συναρτήσεων της απόστασης της πηγής ηλεκτρονίων από την άνοδο.

Η εξάρτηση του F από το d είναι καθοριστικής σημασίας για τις δυνατότητες εγκάρσιας ανάλυσης (vertical resolution) του NFESEM. Από την προηγούμενη συζήτηση προκύπτει ότι μια ικανοποιητική εκτίμηση για τις μεταβολές του I_{FE} δίνεται από:

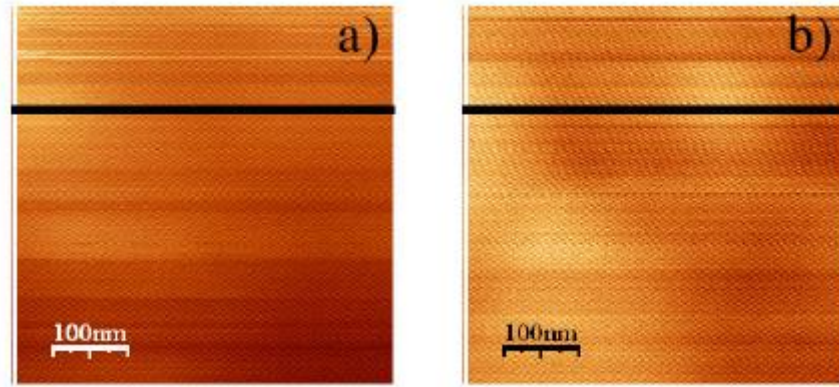
$$\frac{\Delta I_{FE}}{I_{FE}} = \frac{C}{F} \frac{\Delta d}{d}$$

που σχετίζει τις αλλαγές στο μετρούμενο ρεύμα εκπομπής με τις αντίστοιχες μεταβολές στην απόσταση d . Η εξίσωση αυτή ορίζει ουσιαστικά την εγκάρσια ανάλυση του οργάνου που είναι -ποιοτικά- ακριβώς η δυνατότητά μας να προσδιορίζουμε μεταβολές ΔI_{FE} με τις αλλαγές Δd . Πρακτικά, ένα ρεύμα της τάξης των nA μπορεί να μετρηθεί με τη μοντέρνα τεχνολογία με ακρίβεια τουλάχιστον 1% που ισοδυναμεί με μια

ονομαστική κατακόρυφη ευκρίνεια της διάταξης εκπομπής σε λειτουργία κοντινού πεδίου (near-field mode) περίπου της τάξης του 0,1nm για $d \sim 10\text{nm}$. Τα παραπάνω χαρακτηριστικά του NFESEM ήταν η κινητήριος δύναμη και το κίνητρο που οδήγησαν σε προσδοκίες για την κατακόρυφη ανάλυση ότι θα μπορούσε π.χ. να επιτρέψει μέχρι και την εργαστηριακή παρατήρηση μονοατομικών σκαλοπατιών (mono-atomic steps) σε μεταλλικές επιφάνειες, όπως και έχει ήδη γίνει [8, 15].

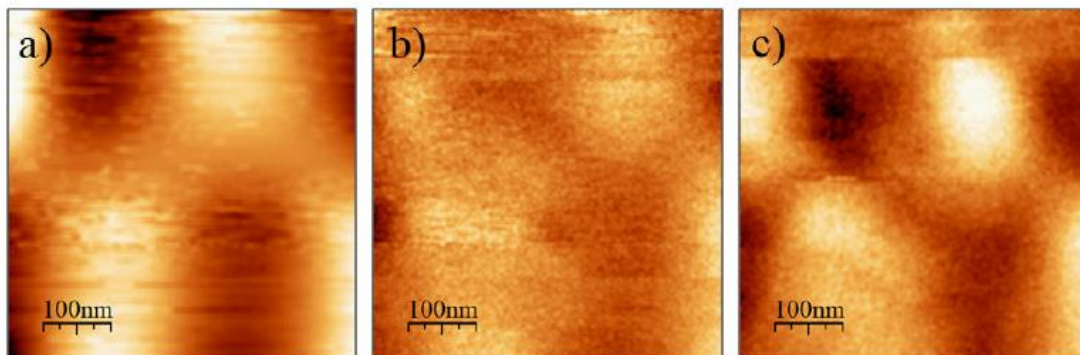
Στο NFESEM, η εφαρμοζόμενη τάση χρησιμοποιείται για να εξάγει ηλεκτρόνια από το μέταλλο προς το κενό -μέσα από το δυναμικό φράγμα- και στη συνέχεια να επιταχύνει τα εκπεμπόμενα αυτά ηλεκτρόνια προς το υπό μελέτη δείγμα που βρίσκεται σε δυναμικό υψηλότερο από το ηλεκτρονικό πυροβόλο. Αυτό συμβαίνει για τάσεις V πολύ μεγαλύτερες από το έργο εξόδου της ακίδας. Επιπλέον, η ενέργεια των ηλεκτρονίων πρέπει να είναι τουλάχιστον τόση ώστε αυτά να προκαλέσουν -κατόπιν ελαστικών και ανελαστικών συγκρούσεων με τα «επιφανειακά» ηλεκτρόνια και άτομα του υλικού- την έξοδο δευτερευόντων ηλεκτρονίων από τα ανώτερα στρώματα του δείγματος τα οποία στη συνέχεια θα συλλέξει κατάλληλος ανιχνευτής που βρίσκεται κοντά στο δείγμα. Κατάλληλες συνθήκες πολύ υψηλού κενού (UHV) είναι επίσης απαραίτητες στην πειραματική διάταξη για να εξασφαλιστεί καλή σταθερότητα της πρωτεύουσας δέσμης ηλεκτρονίων καθώς και για να περιοριστεί όσο το δυνατόν περισσότερο η επιφανειακή «μόλυνση» (surface contamination) του δείγματος που επηρεάζει σημαντικά το δευτερεύον ρεύμα. Να σημειωθεί ότι μεγαλύτερα ρεύματα εκπομπής αυξάνουν εν γένει την εγκάρσια ανάλυση της διάταξης αλλά συγχρόνως μπορεί να μολύνουν εντονότερα την επιφάνεια του δείγματος. Εν γένει, όσο μικρότερη είναι η ακτίνα του εκπομπού και η ενεργός επιφάνεια εκπομπής τόσο καλύτερη είναι η εγκάρσια και η πλευρική ανάλυση του οργάνου. Ωστόσο, ένα μειονέκτημα των εξαιρετικά αιχμηρών ακίδων είναι η μηχανική και θερμική αστάθειά τους σε πολύ ισχυρά ηλεκτρικά πεδία και ρεύματα.

Όπως έχουμε αναφέρει, η πιο σημαντική παράμετρος στο NFESEM είναι το ρεύμα εκπομπής. Κοιτάζοντας την κόκκινη καμπύλη του σχ. 5(b) συμπεραίνουμε ότι η υψηλότερη ευαισθησία ΔI_{FE} σε κατακόρυφες μετατοπίσεις Δd της ακίδας επιτυγχάνεται στην περιοχή του άξονα d όπου η καμπύλη αυτή είναι πιο απότομη, δηλαδή σε υψηλότερα ρεύματα I_{FE} . Στην περιοχή αυτή του διαγράμματος, μια μικρή αλλαγή στην απόσταση που παράγεται από μια προεξοχή στο ανάγλυφο της επιφάνειας του εξεταζόμενου δείγματος προξενεί μια μεγάλη μεταβολή στο μετρούμενο ρεύμα. Στο σχήμα 6 [2, 17, 18] φαίνεται το αποτέλεσμα σκαναρίσματος μιας ορισμένης οριζόντιας περιοχής του δείγματος με διαφορετικά ρεύματα. Στο σχ. 6(α), που αντιστοιχεί σε μικρότερο ρεύμα το σωματίδιο χρυσού στην πάνω δεξιά πλευρά σχεδόν δεν φαίνεται ενώ στο (b) όπου το ρεύμα έχει αυξηθεί φαίνεται πολύ πιο ευδιάκριτα. Με άλλα λόγια το ρεύμα εκπομπής είναι ο βασικός μηχανισμός αντίθεσης (contrast mechanism).



Σχήμα 2-6. Σάρωση περιοχής δείγματος με διαφορετικά ρεύματα. Παρατηρούμε αλλαγή στην ευκρίνεια (contrast mechanism).

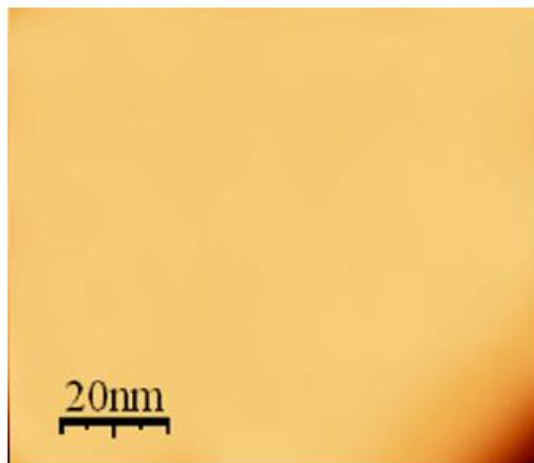
Ανάλογα, στο σχήμα 7 [2, 17, 18] βλέπουμε μετρήσεις ρευμάτων (σε $d \sim 100\text{nm}$) από δείγμα που φέρει σφαιρικά σωματίδια χρυσού. Το (a) έχει προκύψει από μέτρηση πρωτεύοντος και το (b) από μέτρηση δευτερεύοντος ρεύματος. Διαφαίνεται μια σχετική αναλογία μεταξύ των δύο μεγεθών, όπως αναφέρθηκε νωρίτερα. Το (c) αντιστοιχεί σε μεγαλύτερο ρεύμα εκπομπής που, όπως αναμέναμε, δίνει καλύτερη τοπογραφική αντίθεση.



Σχήμα 2-7. Εικόνες που προκύπτουν από μετρήσεις πρωτεύοντος και δευτερεύοντος ρεύματος.

Μια πολύ σημαντική παράμετρος του οργάνου είναι και η πλευρική του ανάλυση (lateral resolution). Αυτή εκτιμήθηκε θεωρητικά και αναλυτικά από τον Saenz [16] ο οποίος βασίστηκε σε γεωμετρικά επιχειρήματα και τη θεωρία πεδιακής εκπομπής. Έδειξε ότι αυτή είναι της τάξης του d και δίδεται από μια έκφραση της μορφής $\Delta x \sim [(R+d)d]^{1/2}$. Η σχέση αυτή επιβεβαιώθηκε ποιοτικά τουλάχιστον και πειραματικά [2, 17, 18]: Στο σχήμα 8 παρουσιάζεται εικόνα από το ίδιο δείγμα με το σχ. 7 με τη διαφορά ότι αυτή το φορά $d \sim 50\text{nm}$, δηλαδή η ακίδα τοποθετήθηκε στη μισή απόσταση από την άνοδο. Μια γραμμική σάρωση κοντά στην «άκρη» του σωματιδίου χρυσού αποκαλύπτει μια μεταβατική περιοχή (transition region) περίπου 20nm ανάμεσα στην εντελώς σκούρα και την πολύ φωτεινή περιοχή. Συμπεραίνουμε λοιπόν από αυτήν την

σχετικά πολύ απότομη (χωρικά) αλλαγή στη φωτεινότητα (ανάλογη της ανιχνευόμενης τοπικής έντασης ρεύματος) ότι πράγματι η πλευρική ανάλυση του NFESM βελτιώθηκε σημαντικά στη μισή απόσταση. Σημειώνεται ότι το μεγαλύτερο μέρος της εικόνας αυτής είναι πολύ φωτεινό λόγω κορεσμού του ανιχνευτή ρεύματος.



Σχήμα 2-8: Πειραματική εκτίμηση της πλευρικής ανάλυσης του NFESM στην άκρη ενός σωματιδίου χρυσού πάνω στο υπόστρωμα του δείγματος.

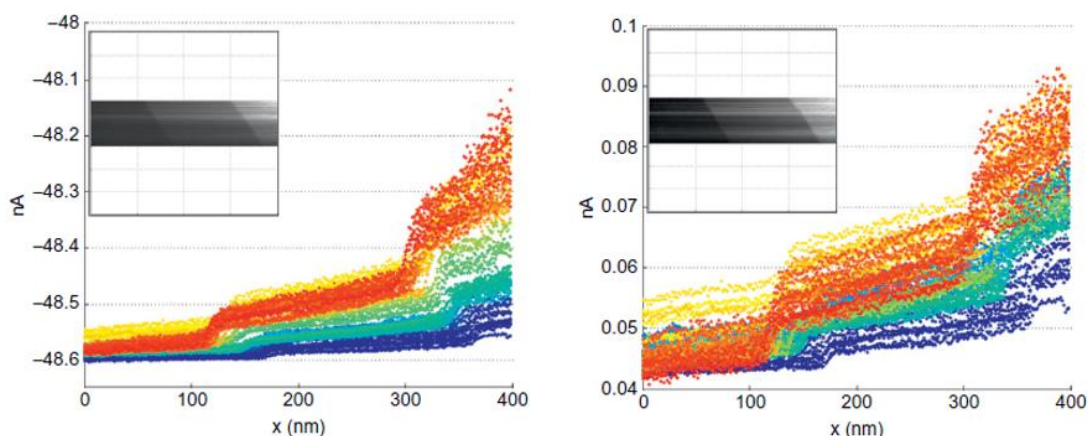
Από τα παραπάνω γίνεται φανερό ότι το ανιχνευόμενο σήμα I_{SE} δευτερευόντων ηλεκτρονίων (SE yield) εξαρτάται έντονα από την απόσταση d καθώς οι αντίστοιχες μεταβολές στο πρωτεύον ρεύμα εκπομπής προκαλούν τις προαναφερθείσες αλλαγές στο I_{SE} . Πρέπει να αναφερθεί ότι η πλευρική ανάλυση του νέου οργάνου που είναι έκδηλη στις παραπάνω πειραματικές εικόνες ξεπερνά τις προσδοκίες που απορρέουν από τον προαναφερθέντα τύπο του Saenz. Αρκετοί παράγοντες μπορεί να ευθύνονται για αυτήν την υψηλή ανάλυση όπως η ακριβής μορφολογία της ακίδα, η τοπολογία του δείγματος, η θέση του ανιχνευτή στην πειραματική διάταξη καθώς και οι χημικές ιδιότητες των χρησιμοποιούμενων υλικών για την ακίδα και το δείγμα. Για παράδειγμα, οι απότομες αιχμές που εμφανίζονται γύρω από την περιοχή μονοατομικών σκαλοπατιών του δείγματος είναι κατάλληλες για την «προσγείωση» των από την τάση επιταχυνόμενων και προερχόμενων από την ακίδα μέσω του κενού ηλεκτρονίων καθώς εκεί το τοπικό πεδίο γίνεται πολύ ισχυρό. Θεωρητικές προσπάθειες να κατανοηθεί και να ερμηνευθεί περεταίρω αυτή η πλευρική ανάλυση είναι σε εξέλιξη και σε αυτήν την επιστημονική ερευνητική προσπάθεια ελπίζουμε ότι συμβάλλει και τούτη η διατριβή.

Εν κατακλείδι, το NFESM δεν είναι ούτε SEM ούτε STM, απλώς συνδυάζει χαρακτηριστικά και των δύο. Έχει το σημαντικό πλεονέκτημα ότι κατά βάσει μπορεί να χρησιμοποιηθεί, αντί για SEM ή STM, σε οποιαδήποτε σχεδόν περίπτωση πειράματος μελέτης νανοδομών πάνω σε αγωγίμες επιφάνειες. Επιπλέον, είναι φθηνότερο και μικρότερο από τα συμβατικά SEM. Έχει εν δυνάμει πολλές εφαρμογές σε διάφορους τομείς όπως π.χ. ηλεκτρονική λιθογραφία, μέσα μαγνητικής εγγραφής, βιοτεχνολογία, μαγνητικούς αισθητήρες, ιατρικές μελέτες, τεχνολογίες επιφανειακών επικαλύψεων (coatings), νανοηλεκτρονικές διατάξεις κλπ.

2.2.1 Εύρος δέσμης και πλευρική ανάλυση του NFESEM

Σε όλα τα είδη ηλεκτρονικών μικροσκοπίων σάρωσης (SEM) το εύρος της δέσμης ηλεκτρονίων είναι καθοριστικό για την πλευρική ανάλυση (lateral resolution) του εκάστοτε συγκεκριμένου οργάνου: αν η διάμετρος του ίχνους -στο δείγμα- της δέσμης (beam spot diameter) που παράγει το μικροσκόπιο και που σαρώνει μια επιφάνεια είναι μεγαλύτερη από κάποιο επιφανειακό χαρακτηριστικό, τότε το τελευταίο δεν μπορεί να είναι ευδιάκριτο στην παραγόμενη εικόνα. Στο πρόσφατα ανεπτυγμένο NFESEM [9], όπως έχουμε πει, ένας αιχμηρός εκπομπός τοποθετείται σε απόσταση $d \sim 10\text{-}50\text{nm}$ μακριά από το δείγμα το οποίο είναι σε υψηλότερο δυναμικό από αυτόν ενώ δεν χρησιμοποιείται ηλεκτρομαγνητικό σύστημα φακών για να εστιάσει την εκπεμπόμενη δέσμη. Κάποια από τα ηλεκτρόνια της εν λόγω δέσμης συλλέγονται-δεσμεύονται από την άνοδο (δείγμα) ενώ τα υπόλοιπα ανακλώνται ή επανεκπέμπονται ως δευτερεύοντα ηλεκτρόνια και στη συνέχεια συλλέγονται από έναν ανιχνευτή που βρίσκεται σε ακόμη μεγαλύτερο δυναμικό. Το εύρος, λοιπόν, της δέσμης στην άνοδο είναι σε καλή, πρώτη προσέγγιση ίσο με την πλευρική ανάλυση του ανιχνευτή. Πειραματικά δεδομένα μετρήσεων υπό σταθερό ρεύμα που έγιναν από το γκρουπ στο ETH της Ζυρίχης [19] υποδεικνύουν ότι η πλευρική ανάλυση του ρεύματος στην άνοδο (δηλαδή του NFESEM) είναι -μέσα στα όρια πειραματικού σφάλματος- ίση με εκείνη του ανιχνευτή. Ανεξαρτήτως όμως της τελευταίας αυτής σχέσης, οι παράγοντες που επηρεάζουν το μέγεθος του ίχνους στο δείγμα αποτελούν πολύ σημαντική πηγή πληροφορίας για τον προσδιορισμό της βέλτιστης θέσης (απόστασης από την άνοδο) της ακίδας στο υπό συζήτηση όργανο που δε φέρει φακούς εστίασης.

Αν η θεωρία πεδιακής εκπομπής από σφαιρικές επιφάνειες [20] εφαρμοστεί σε αυτόν τον τύπο μικροσκοπίας τότε η στερεά γωνία εκπομπής προκύπτει θεωρητικά να είναι $1,44\text{sr}$ που αντιστοιχεί σε μια επίπεδη γωνία 39° [9]. Αυτό με τη σειρά του δίνει ένα εύρος στην άνοδο της τάξης του $1,65d$ που σημαίνει περίπου 41nm για $d=25\text{nm}$, τιμή που είναι πολύ μεγαλύτερη από την πειραματικά μετρούμενη (πιο κοντά στην πραγματικότητα) που είναι $6\text{-}7\text{nm}$ όπως προκύπτει από διαφόριση του «σκαλοπατιού» σήματος πρωτογενούς (field-emitted) και δευτερεύοντος (secondary-electron) ρεύματος στα πρωτογενή πειραματικά δεδομένα του παρακάτω σχήματος 9.



Σχήμα 2-9. Πειραματική εκτίμηση της πλευρικής ανάλυσης του NFESEM από μετρήσεις πρωτεύοντος και δευτερεύοντος ρεύματος σε «σκαλοπάτι» της επιφάνειας του δείγματος.

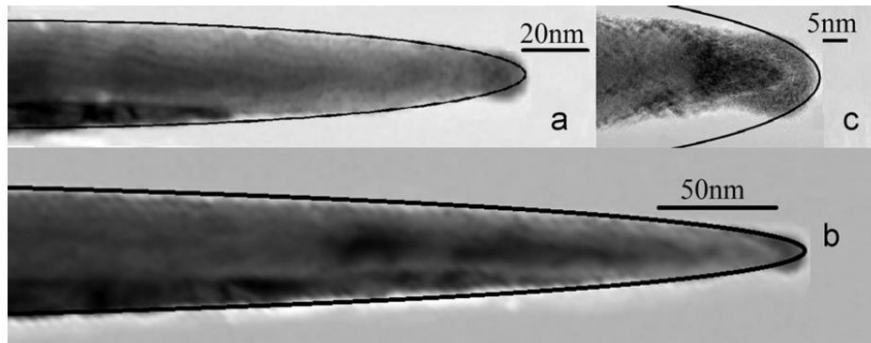
Μια πρώτη θεωρητική απάντηση για το ζήτημα αυτό της απόκλισης εκτιμώμενης και πειραματικής ευκρίνειας του μικροσκοπίου δόθηκε από τους Kyritsakis et al. [21] που

έδειξαν ότι εάν η ακίδα είναι αρκετά αιχμηρή (θα δούμε παρακάτω με ποια έννοια και πόσο) τότε λαμβάνει χώρα ένα φαινόμενο στένωσης της ηλεκτρονικής δέσμης (beam narrowing / electrons self-focusing effect) χάρη στη σύγκλιση των ταχυτήτων των ηλεκτρονίων προς τον άξονα συμμετρίας της ακίδας. Με άλλα λόγια συρρικνώνεται το εύρος της δέσμης κατά ένα παράγοντα της τάξης του 3 -σε μια απόσταση 10nm από την ακίδα- σε σχέση με την περίπτωση ευθύγραμμων ηλεκτρονικών τροχιών, κάθετων στην εκπέμπουσα επιφάνεια. Το αίτιο αυτό του φαινομένου είναι κατ' αρχήν τα έντονα χαρακτηριστικά της κατανομής του δυναμικού φράγματος γύρω από αιχμηρές ακίδες και κατ' επέκταση το ηλεκτροστατικό δυναμικό στο χώρο μεταξύ ανόδου και καθόδου. Οι ηλεκτρονικές διαδρομές που προκύπτουν είναι καμπυλωμένα και, συνεπώς, προφανώς απαιτείται μια τρισδιάστατη WKB-τύπου μεταχείριση, όπως και πράγματι έγινε [21]. Σημειώνεται ότι η καμπύλωση αυτή των μονοπατιών που ακολουθούν τα ηλεκτρόνια συμβαίνει τόσο στην περιοχή σήραγγος όσο και στη συνέχεια δηλαδή στο κενό προς την άνοδο.

Στην εργασία [21] οι υπολογισμοί έγιναν για παραδοσιακή SEM διάταξη δηλαδή για απόσταση ανόδου-καθόδου d πολύ μεγαλύτερη από το μήκος h της ακίδας. Σε συνθήκες λειτουργίας «εγγύς πεδίου», όμως, έχουμε, αντιθέτως, $d \ll h$. Η διαφορά στην κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου στις δύο περιπτώσεις δεν είναι τετριμμένη. Επιπλέον, οι παράμετροι που είναι σημαντικές στο NFESM είναι διαφορετικές από αυτές του SEM: στο πρώτο είναι κυρίως τα d και R ενώ στο δεύτερο τα R και h (με το d να είναι σχεδόν αδιάφορο). Ακόμη, η επίδραση του δυναμικού ειδώλου παραλείφθηκε στο [21] και το εύρος δέσμης υπολογίστηκε κοιτώντας μόνο το συντελεστή εκπομπής S ως συνάρτηση της γωνίας θ με τον άξονα συμμετρίας και όχι την ίδια την πυκνότητα ρεύματος.

Τα ευρήματα [7] που παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή αφορούν τον υπολογισμό του εύρους W της εκπεμπόμενης δέσμης συναρτήσει του d . Όπως στην αναφορά [21], επιλύεται η εξίσωση Laplace αναλυτικά αλλά, επιπλέον, εδώ χρησιμοποιείται ένα ρεαλιστικό σχήμα για την ακίδα το οποίο προέκυψε απευθείας από εικόνες μικροσκοπίας επί ακίδων που χρησιμοποιούνται στο NFESM. Επίσης, συμπεριλαμβάνεται μια κατάλληλη διόρθωση ειδώλου και λαμβάνεται υπόψη η πυκνότητα ρεύματος ως συνάρτηση της γωνίας θ με τον άξονα συμμετρίας. Τέλος, εξετάζεται η απόδοση των ακίδων συναρτήσει της αιχμηρότητάς τους και συγκρίνονται τα αποτελέσματα με την περίπτωση παραδοσιακού SEM.

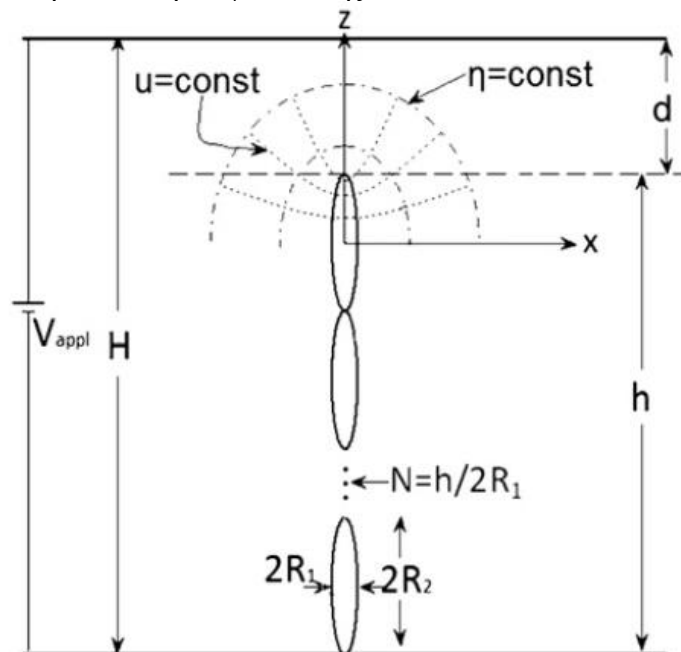
Όπως έχει γίνει φανερό, το σχήμα της ακίδας είναι πολύ σημαντικό καθώς προκαλεί την ενίσχυση πεδίου στην οποία αποδίδεται η εκπομπή των ηλεκτρονίων. Προκειμένου να γίνουν συγκεκριμένοι αλγεβρικοί και αριθμητικοί υπολογισμοί και λαμβάνοντας υπόψη πραγματικές εικόνες ακίδων (σχήμα 10), εδώ θα χρησιμοποιηθούν ελλειπτικές καμπύλες (διαφόρων τιμών μικρής και μεγάλης ακτίνας, αντίστοιχα, R_1 και R_2 , που προσφέρουν ποικιλία τιμών ακτίνας καμπυλότητας R στην κορυφή αλλά και του λόγου $S = R_1 / R_2$) για τη μοντελοποίηση των ακίδων και την προσομοίωση των χαρακτηριστικών εκπομπής.



Σχήμα 2-10. [21] Εικόνες TEM ακίδων που συνδέονται με τη μοντελοποίηση της παρούσας ενότητας.

Εδώ χρησιμοποιήθηκε μια στοίβα από ελλειψοειδή, όπως φαίνεται στο σχήμα 11, καθώς το μοντέλο αυτό προσφέρει μια πολύ καλή αναπαράσταση για μια εκτενή περιοχή της επιφάνειας της ακίδας κοντά στην αιχμή της (απ' όπου πηγάζει το εκπεμπόμενο ρεύμα) και συγχρόνως εξασφαλίζει αναλυτική επιλυσιμότητα της εξίσωσης Laplace.

Στα πλαίσια αυτά, είναι κατάλληλες οι σφαιροειδείς συντεταγμένες (η, u) στο σύστημα των οποίων το ηλεκτροστατικό δυναμικό Φ γράφεται ως άθροισμα συναρτήσεων Legendre πρώτου και δεύτερου είδους. Οι συναρτήσεις αυτές δίνουν εν γένει τη λύση της εξίσωσης Laplace όταν το σύστημα περιέχει ένα μόνο ελλειψοειδές μεταξύ ανόδου και καθόδου. Τώρα, από την αρχή της υπέρθεσης, το δυναμικό σε οποιοδήποτε σημείο θα δίνεται από το άθροισμα των επιμέρους γενικών λύσεων των μεμονωμένων ελλειψοειδών. Λόγω αξιμουθιακής συμμετρίας το δυναμικό προφανώς είναι ανεξάρτητο από την πολική γωνία ϕ ενώ περιέχει και το αντίστοιχο δυναμικό από το κατοπτρικό -ως προς την άνοδο- σύστημα που εξασφαλίζει το μηδενισμό του δυναμικού πάνω στην επίπεδη επιφάνεια της ανόδου.



Σχήμα 2-11. Στοίβα ελλειψοειδών που χρησιμοποιήθηκε στους υπολογισμούς.

Η αναλυτική έκφραση για το δυναμικό $\Phi(\eta, u)$ που αναπτύσσεται κατόπιν εφαρμογής τάσης V_{appl} μεταξύ ανόδου και καθόδου έχει σχετικά περίπλοκη έκφραση μέσω ενός

άπειρου αθροίσματος που εμπλέκει τις συναρτήσεις Legendre με τις συντεταγμένες να αλλάζουν «αρχή αξόνων» για κάθε όρο του αθροίσματος (κάθε φορά είναι το κέντρο του αντίστοιχου ν-οστού ελλειψοειδούς). Η έκφραση αυτή παραλείπεται εδώ και μπορεί να βρεθεί στην εργασία των Kyritsakis & Xanthakis [7]. Για να γίνουν αριθμητικοί υπολογισμοί στην πράξη διατηρήθηκαν μόνο 9 όροι από το άπειρο αυτό άθροισμα εφόσον ελέγχθηκε ότι αρκούν τόσοι για άριστη σύγκλιση. Οι σταθεροί συντελεστές υπέρθεσης του αθροίσματος προσδιορίστηκαν με μια μέθοδο «ταιριάσματος σημείων» (point-matching method) κατά την οποία επιλέγονται «στοχευμένα» ορισμένα σημεία -ισάριθμα με τις άγνωστες σταθερές- πάνω στην επιφάνεια της καθόδου. Απαιτώντας το δυναμικό στα σημεία αυτά να είναι όπως πρέπει ίσο με $-V_{appl}$ προκύπτει ένα σύστημα εξισώσεων που επιλύεται ως προς τους ζητούμενους αγνώστους.

Στο ηλεκτροστατικό δυναμικό πρέπει να προστεθεί ένα κατάλληλο δυναμικό ειδώλου το οποίο επελέγη να είναι το σφαιρικό μιας και ελέγχθηκε ότι έχει μόνο 5% σφάλμα από εκείνο που αντιστοιχεί θεωρητικά στο σχήμα της καθόδου. Έτσι το συνολικό δυναμικό δίνεται από την παράσταση:

$$U(\eta, u) = E_{vac} - eV_{appl} - e\Phi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{R}{r^2 - R^2}$$

όπου R η ακτίνα καμπυλότητας της ακίδας που ισούται με R_2^2/R_1 , E_{vac} η ενέργεια κενού και r η απόσταση του τυχόντος σημείου από τ κέντρο του εγγεγραμμένου κύκλου καμπυλότητας.

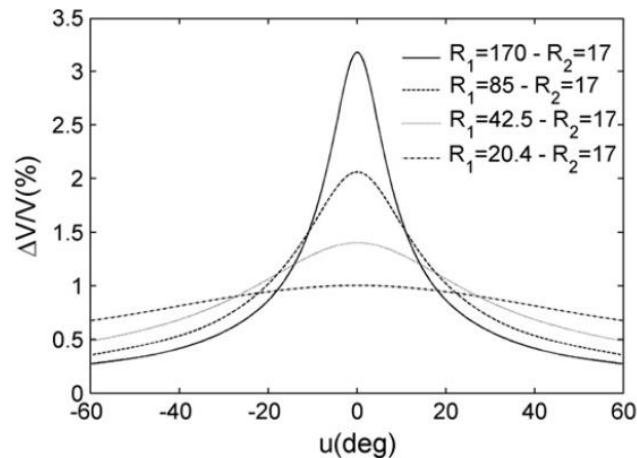
Έχοντας προσδιορίσει το δυναμικό, η πυκνότητα ρεύματος μπορεί να υπολογιστεί με βάση το συντελεστή εκπομπής και αθροίζοντας (ολοκληρώνοντας) πάνω σε ενέργειες παράλληλες και κάθετες ως προς το φράγμα δυναμικού από την πλευρά του εκπομπού. Σημειώνεται ότι για τον όγκο του μεταλλικού εκπομπού υποτίθεται το παραδοσιακό μοντέλο ελεύθερων ηλεκτρονίων που αντιστοιχεί σε καρτεσιανή γεωμετρία. Τονίζεται επίσης ότι η παραδοσιακή μονοδιάστατη WKB μέθοδος [22] που χρησιμοποιεί ευθύγραμμο ηλεκτρονικά μονοπάτια θα αποτύχει να προσδώσει το ζητούμενο καμπύλωμα στις τροχιές και να αναδείξει το φαινόμενο στένωσης της δέσμης. Αντ' αυτής χρησιμοποιήθηκε η τρισδιάστατη επέκταση των Kapur & Peierls [23] καθώς και η έκφραση των Das & Mahanty [5] για την εκπεμπόμενη τρισδιάστατη πυκνότητα ρεύματος η οποία βασίστηκε με τη σειρά της στην [6]. Σύμφωνα με τις δημοσιεύσεις αυτές, λοιπόν, πιο συγκεκριμένα, αν μια πυκνότητα ρεύματος $\mathbf{J}_{in}(\mathbf{r}_1)$ προσπίπτει στο φράγμα στο σημείο $\mathbf{r}_1$ και εξέρχεται αυτού στο σημείο $\mathbf{r}_2$ με ένταση $\mathbf{J}_{out}(\mathbf{r}_2)$ ακολουθώντας ένα μονοπάτι P, τότε ο συντελεστής διάδοσης είναι:

$$T(E) = \sqrt{\frac{|\nabla U|_{r=r_2}}{|\nabla U|_{r=r_1}}} \exp \left\{ -\frac{4\pi}{h} \int_{r_1(P)}^{r_2} \sqrt{2m[U(\mathbf{r}) - E]} d\mathbf{r} \right\}$$

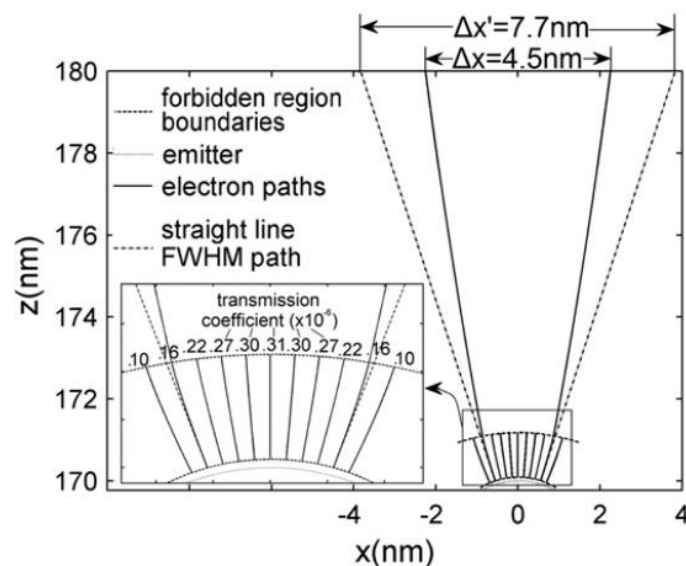
Το μονοπάτι P προσδιορίζεται ως εξής: το φράγμα U-E μετατρέπεται σε «κοιλάδα» (πηγάδι) E-U και λύνονται οι κλασικές εξισώσεις κίνησης για αυτό το πηγάδι δυναμικού βρίσκοντας μια διαδρομή. Αυτή η διαδρομή ικανοποιεί επίσης την αρχή ελάχιστης δράσης για τη διαδικασία σήραγγος [23]. Έτσι είναι το πιο πιθανό -με την κβαντομηχανική έννοια- μονοπάτι ενός ηλεκτρονίου στο χώρο κατά τη μετάβασή του από την κάθοδο στην άνοδο. Η επίλυση της εξίσωσης Newton έγινε αριθμητικά με μια μέθοδο Runge-Kutta. Η πυκνότητα ρεύματος υπολογίζεται ολοκληρώνοντας συνεισφορές από τις διάφορες ενεργειακές καταστάσεις [24] και τελικά το ρεύμα απαιτεί επιφανειακή ολοκλήρωση.

Στο παρακάτω σχήμα 12 παρουσιάζεται η ποσοστιαία μεταβολή του δυναμικού Φ συναρτήσει της σφαιροειδούς γωνίας u πάνω σε μια επιφάνεια που απέχει σταθερή

απόσταση 1Α από την εκπέμπουσα ισοδυναμική επιφάνεια για διάφορες τιμές της αιχμηρότητας $S=R_1/R_2$. Βλέπουμε ότι, καθώς το S αυξάνει, το τοπικό πεδίο στην κορυφή $u=0$ ενισχύεται όλο και πιο πολύ ενώ πέφτει πιο απότομα πλευρικά, εκατέρωθεν του άξονα συμμετρίας. Αυτό σημαίνει ότι ο συντελεστής διάδοσης γίνεται υψηλότερος γύρω από την αιχμή της ακίδας αλλά εξασθενεί πιο γρήγορα καθώς απομακρυνόμαστε από εκεί. Αυτό φαίνεται στο σχήμα 13 που παρουσιάζει τα ηλεκτρονικά μονοπάτια τόσο μέσα στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή όσο και έξω από αυτήν. Είναι φανερό ότι πράγματι προκύπτει καμπύλωση αυτών των διαδρομών των ηλεκτρονίων.



Σχήμα 2-12. Ποσοστιαία μεταβολή του δυναμικού Φ συναρτήσει της σφαιροειδούς γωνίας u πάνω σε μια επιφάνεια που απέχει σταθερή απόσταση 1Α από την εκπέμπουσα ισοδυναμική επιφάνεια για διάφορες τιμές της αιχμηρότητας $S=R_1/R_2$.

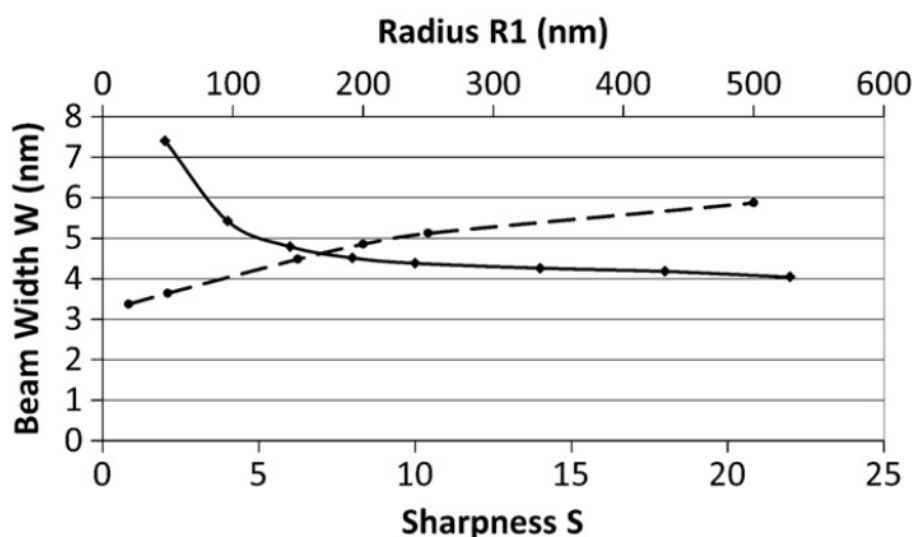


Σχήμα 2-13. Ηλεκτρονικά μονοπάτια τόσο μέσα στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή όσο και έξω από αυτήν. Προκύπτει καμπύλωση αυτών των διαδρομών.

Σε πρώτη φάση, ως μέτρο του εύρους δέσμης πάνω στην άνοδο λήφθηκε αυτό που αντιστοιχεί σε μονοπάτια στα οποία το T πέφτει στο μισό του μέγιστου (Full Width at Half Maximum) επί της επιφάνειας της καθόδου. Στους παρόντες υπολογισμούς επελέγη $d=10\text{nm}$. Προκύπτει από το παραπάνω σχήμα ότι $W\sim 4,5\text{nm}$, τιμή η οποία είναι

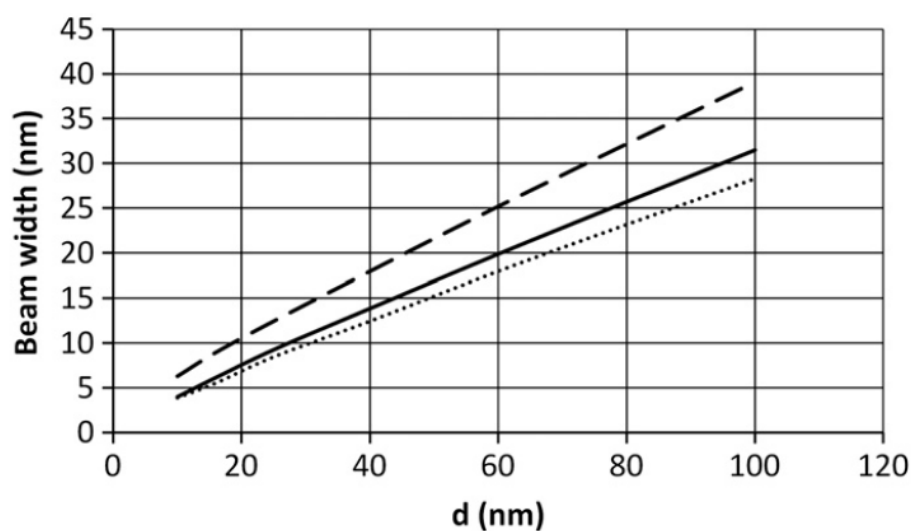
κατά 40% περίπου μικρότερη από εκείνη που θα έδινε η παραδοχή ευθύγραμμων διαδρομών που ξεκινούν κάθετα στην επιφάνεια της καθόδου στο εκάστοτε σημείο αφετηρίας. Επιπλέον, είναι περίπου 20% μικρότερη από το εύρος που προκύπτει σε διάταξη SEM [21].

Ας εξεταστεί τώρα η εξάρτηση του W από τις γεωμετρικές παραμέτρους. Για το σκοπό αυτό δεν είναι αρκετό να παρατηρήσουμε μόνο το $T(u)$ κατά μήκος της επιφάνειας της καθόδου. Πρέπει να βρεθεί η αντίστοιχη εξάρτηση του $J(u)$ για τις διάφορες τιμές του S . Το σχήμα 14 πιο κάτω παρουσιάζει τα αποτελέσματα για το $W(S)$. Πάλι το κριτήριο FWHM έχει χρησιμοποιηθεί για το J στην κάθοδο για να βρεθεί το W στην άνοδο. Στο ίδιο σχήμα βλέπουμε και την εξάρτηση του W από το R_1 υπό σταθερό S (δηλαδή αλλάζοντας αναλόγως και το R_2). Γενικά, παρατηρούμε ότι το εύρος της δέσμης συρρικνώνεται καθώς η ακίδα γίνεται πιο αιχμηρή, το οποίο σημαίνει ότι η ανάλυση του NFESM μικροσκοπίου βελτιώνεται αντίστοιχα. Ακόμη φαίνεται ότι από κάποια περιοχή τιμών S (και προς μεγαλύτερες τιμές) το W δε μεταβάλλεται απότομα, δηλαδή υπάρχει μια περιοχή «κορεσμού» όταν η ακίδα έχει επιμηκυνθεί εξαιρετικά (needle effect). Ο κορεσμός αντιστοιχεί σε ένα εύρος δέσμης της τάξης των 4nm.



Σχήμα 2-14. Εύρος δέσμης στο δείγμα συναρτήσει γεωμετρικών χαρακτηριστικών της ακίδας.

Τέλος ας δούμε πως εξαρτάται το W από το d . Εξετάστηκε η εξάρτηση αυτή στο εύρος τιμών $10 < d < 100 \text{ nm}$ σε σταθερό τοπικό πεδίο $F=5 \text{ V/nm}$, για τις παραπάνω τρεις ακίδες του σχ. 10 (διάφοροι συνδυασμοί τιμών R_1 και R_2). Τα αποτελέσματα φαίνονται στο σχήμα 15. Προκύπτει ότι η σχέση μεταξύ των υπό μελέτη μεγεθών είναι σχεδόν γραμμική σε όλες τις περιπτώσεις. Επίσης, γίνεται αντιληπτό ότι το W είναι σταθερά μικρότερο από το d .



Σχήμα 2-15. Εύρος δέσμης στο δείγμα συναρτήσει του d για τις τρεις ακίδες του σχ.10.

Συγκρίνοντας τα παρόντα αποτελέσματα εύρους δέσμης στην άνοδο με αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις για την ίδια τιμή d προκύπτει απόκλιση γύρω στα 25% ενώ προηγούμενες θεωρίες μπορεί να έδιναν πρόβλεψη που διέφερε μέχρι και ένα παράγοντα ίσο με 7 από την πραγματικότητα.

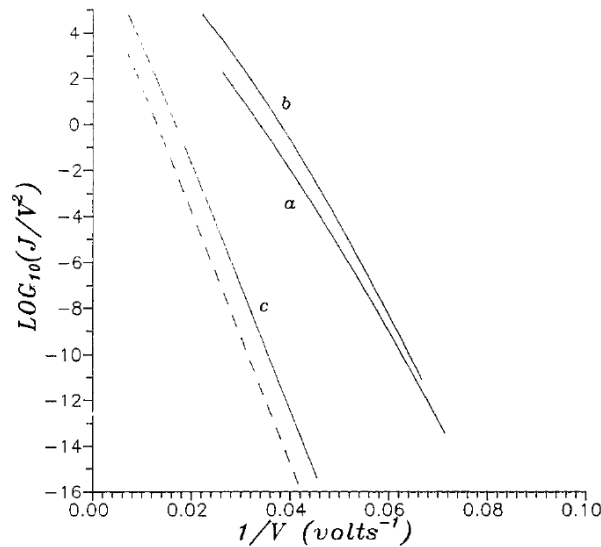
2.3 Απόκλιση της πεδιακής εκπομπής από νανομετρικές ακίδες από τη Fowler-Nordheim θεωρία

Στην ενότητα αυτή θα δούμε λίγο πιο αναλυτικά τα αποτελέσματα των He-Cutler-Miskovsky [25] αλλά και των Fursey & Glazanov [26] τα οποία μαρτυρούν ότι ήδη από τη δεκαετία 1990 υπήρχαν ενδείξεις ότι η εκπομπή ηλεκτρονίων από εξαιρετικά αιχμηρές μεταλλικές ακίδες δεν υπακούει στις προβλέψεις της παραδοσιακής θεωρίας που στηρίζεται στην αρχική εξίσωση ρεύματος των Fowler & Nordheim και σε τροποποιήσεις αυτής. Χρειάστηκαν περίπου 60 χρόνια από την πρωτότυπη θεωρία FN για να γίνει αντιληπτή αυτή η απόκλιση καθώς η τεχνολογική πρόοδος σταδιακά μόνο επέτρεπε την εργαστηριακή κατασκευή ηλεκτρονικών εκπομπών με ολοένα και μικρότερη ακτίνα καμπυλότητας.

Για παραδοσιακούς μεταλλικούς εκπομπούς με ακτίνα καμπυλότητας $R > 50\text{nm}$, όπως έχουμε πει, η θεωρία Fowler-Nordheim, που είναι βασισμένη σε ένα επίπεδο μοντέλο για τον εκπομπό μαζί με το κλασικό φορτίο ειδώλου, χρησιμοποιείται για να περιγράψει τις χαρακτηριστικές ρεύματος (I) – τάσης (V). Η θεωρία, για την ακρίβεια, προβλέπει τη σχέση εκπεμπόμενης πυκνότητας ρεύματος (J) και ηλεκτρικό πεδίου (F) στην εκπέμπουσα επιφάνεια: το διάγραμμα που έχει στο κατακόρυφο άξονα την ποσότητα $\log(J/F^2)$ και στον οριζόντιο το $1/F$ θα προκύψει σχεδόν ευθεία γραμμή [27]. Αυτό έχει επιβεβαιωθεί πειραματικά για $R > 50\text{nm}$. Διαισθητικά, ο λόγος που η επίπεδη θεωρία αποτελεί πολύ καλή προσέγγιση για αυτές τις τιμές της ακτίνας είναι το γεγονός ότι ένα ηλεκτρόνιο που υφίσταται φαινόμενο σήραγγος και εκπέμπεται ουσιαστικά βλέπει ένα «επίπεδο» φράγμα δυναμικού πάχους $\sim 1\text{nm} \ll R$. Σε αυτήν την απόσταση έχει πρακτικά μια μη αμελητέα επίδραση και το δυναμικό του κατοπτρικού φορτίου που αντιστοιχεί σε μια επίπεδη αγωγή επιφάνεια.

Ωστόσο, ηλεκτρονικοί εκπομποί που παρασκευάζονται πλέον με τις σύγχρονες τεχνικές είναι πολύ πιο αιχμηροί με ακτίνες της τάξης του nm ή ακόμα και του μεγέθους ενός ατόμου [28-32]. Μια σημαντική κατηγορία τέτοιων εκπομπών είναι οι λεγόμενες «κάθοδοι Spindt» που είναι συνήθως κωνικού σχήματος με ακτίνα $R < 50\text{nm}$ στην κορυφή τους. Για να διερευνήσουν την επίδραση του σχήματος και του μεγέθους στα χαρακτηριστικά της εκπομπής υπό ισχυρό πεδίο, οι He et al. [33] μελέτησαν την εξάρτηση των χαρακτηριστικών I - V από την τοπική γεωμετρία αιχμηρών ακίδων. Προσδιόρισαν αναλυτικά τις ακριβείς αλληλεπιδράσεις με τα φορτία ειδώλων (exchange-correlation effects) για επιφάνειες διάφορων σχημάτων όπως ο κώνο, το υπερβολοειδές και το παραβολοειδές εκ περιστροφής καθώς και η σφαίρα πάνω σε κώνο, σχήματα τα οποία πράγματι είναι κατάλληλα για να προσομοιώσουν πραγματικούς εκπομπούς [27,33]. Χρησιμοποιώντας την αναλυτική λύση για τα εφαρμοζόμενο ηλεκτροστατικό πεδίο που αντιστοιχεί σε κάθε γεωμετρία, προσδιόρισαν τα φράγματα σήραγγος και βρέθηκε μια δραματική αύξηση στο εκπεμπόμενο ρεύμα σε σχέση την πρόβλεψη της FN εξίσωσης για την ίδια εξωτερική τάση.

Ένα χαρακτηριστικό που συστηματικά παρατηρήθηκε για όλες τις γεωμετρίες αιχμηρών ακίδων ήταν η μη ευθύγραμμη μορφή του γραφήματος $\log(J/V^2) - 1/V$. Επίσης, οι πυκνότητες εκπεμπόμενου ρεύματος που υπολογίστηκαν είναι πολύ μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες που προβλέπει το επίπεδο FN μοντέλο για την ίδια κάθε φορά εξωτερική τάση. Στο σχήμα 16 παρουσιάζονται τέτοια διαγράμματα για υπερβολοειδή (α), κωνική (β) και επίπεδη (γ) γεωμετρία ακίδας. Οι υπολογισμοί έγιναν για απόσταση εκπομπού-συλλέκτη ίση με 20nm και με $R=10\text{nm}$ για τις μη επίπεδες ακίδες.

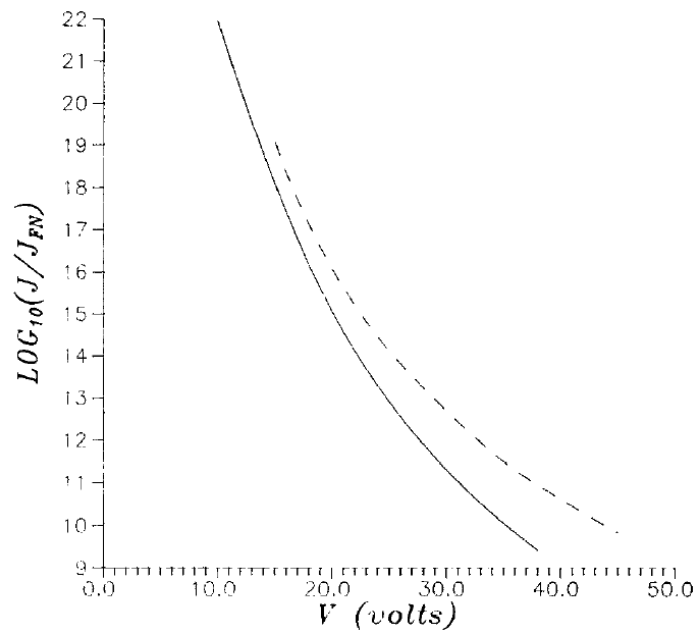


Σχήμα 2-16: [25] FN διαγράμματα για υπερβολοειδή (α), κωνική (β) και επίπεδη (γ) γεωμετρία ακίδας

Όπως προέκυψε, μια καλή συναρτησιακή (αριθμητική) προσαρμογή (fit) απαιτεί για το $J(V)$ μια συνάρτηση της μορφής:

$$J = aV^2 \exp(-b/V - c/V^2)$$

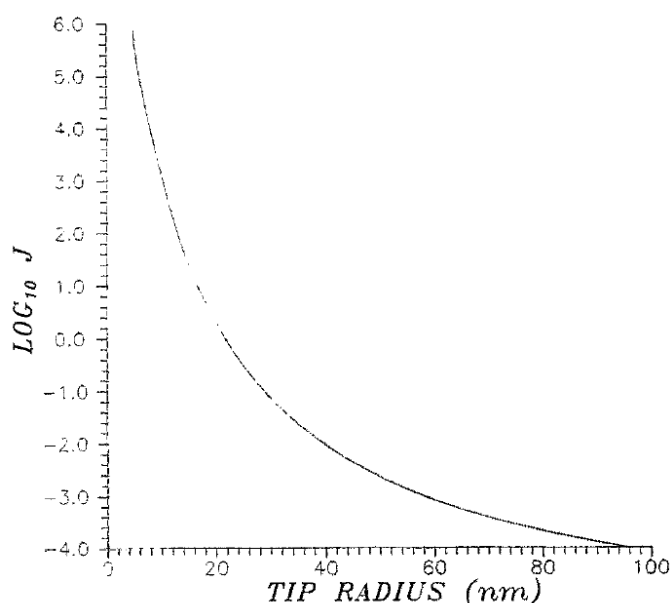
όπου a , b , c είναι προσδιοριστέες σταθερές προσαρμογής που θεωρητικά μεταβάλλονται με το υλικό και τη γεωμετρία. Η παρουσία του όρου $1/V^2$ στον εκθετικό παράγοντα είναι ειδοποιός διαφορά με τη θεωρία F-N. Μια άλλη παρατήρηση που έγινε είναι ότι η απόκλιση από την FN θεωρία είναι πιο έντονη σε μικρές τάσεις παρά σε μεγάλες, παρά το γεγονός ότι είναι υπαρκτή και σημαντική σε όλες τις περιπτώσεις. Αυτό φαίνεται στο σχήμα 17 όπου βλέπουμε το πηλίκο $J_{\text{non-planar}} / J_{\text{FN}}$ συναρτήσει του V για το υπερβολοειδές (συνεχής καμπύλη) και το κωνικό (διακεκομμένη) μοντέλο ακίδας.



Σχήμα 2-17. Το πηλίκο $J_{\text{non-planar}} / J_{\text{FN}}$ συναρτήσει του V για το υπερβολοειδές (συνεχής καμπύλη) και το κωνικό (διακεκομμένη) μοντέλο ακίδας.

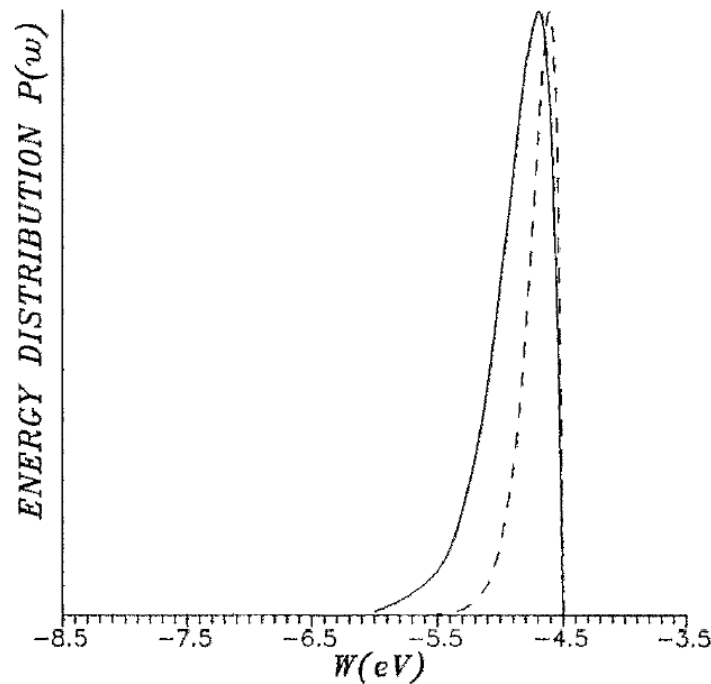
Με άλλα λόγια, το προαναφερθέν αποτέλεσμα υποδηλώνει ότι, για ορισμένη μη επίπεδη γεωμετρία, η επίδραση αυτής στην πεδιακή εκπομπή γίνεται όλο και λιγότερο σημαντική καθώς το ηλεκτρικό πεδίο μεταβάλλεται προς υψηλότερες εντάσεις. Να σημειωθεί βέβαια ότι αυτή η συμπεριφορά οφείλεται στο καθοριζόμενο από τη γεωμετρία μακροσκοπικό πεδίο κι όχι στη διαφορά των δυναμικών ειδώλων που αντιστοιχούν στις διάφορες γεωμετρίες. Σε κάθε περίπτωση, προκύπτει ότι για $R=10\text{nm}$ (διάσταση που ήδη ήταν εφικτή στην πράξη από το 1990) το $J_{\text{non-planar}}$ είναι κατά τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από το αντίστοιχο (στο ίδιο V) J_{FN} .

Στο παρακάτω σχήμα 18 βλέπουμε ότι η πυκνότητα ρεύματος (π.χ. για το υπερβολοειδές) αυξάνει δραματικά καθώς συρρικνώνεται η ακτίνα R , υπό σταθερή τιμή τάσης V . Αντίθετα, καθώς ο εκπομπός γίνεται λιγότερο καμπυλωμένος, το J μειώνεται και προσεγγίζει τελικά μια περιοχή τιμών που αντιστοιχούν σε σχεδόν επίπεδη γεωμετρία, όπως είναι άλλωστε αναμενόμενο. Παρόμοια συμπεριφορά παρουσίασε ποιοτικά και η κωνική γεωμετρία που επίσης εξετάστηκε.



Σχήμα 2.18. Η πυκνότητα ρεύματος (π.χ. για το υπερβολοειδές) αυξάνει δραματικά καθώς συρρικνώνεται η ακτίνα R , υπό σταθερή τιμή τάσης V .

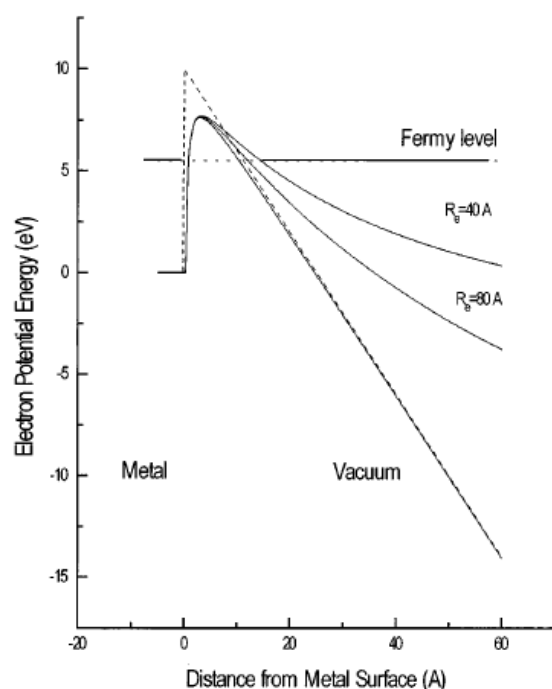
Τέλος, μελετήθηκε η επίδραση της γεωμετρίας / αιχμηρότητας στην ενεργειακή κατανομή των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων. Στο σχήμα 19 παρουσιάζονται η κανονικοποιημένη κατανομή αυτή για το επίπεδο (διακεκομμένη γραμμή) μοντέλο καθώς κι εκείνη που προέκυψε για το υπερβολοειδές (συνεχής) μοντέλο με $R=10\text{nm}$. Για τους υπολογισμούς χρησιμοποιήθηκε $d=20\text{ nm}$ και $V=50\text{ Volts}$.



Σχήμα 2-19. Κανονικοποιημένη κατανομή αυτή για το επίπεδο (διακεκομμένη γραμμή) μοντέλο καθώς κι εκείνη που προέκυψε για το υπερβολοειδές (συνεχής) μοντέλο με $R=10\text{nm}$.

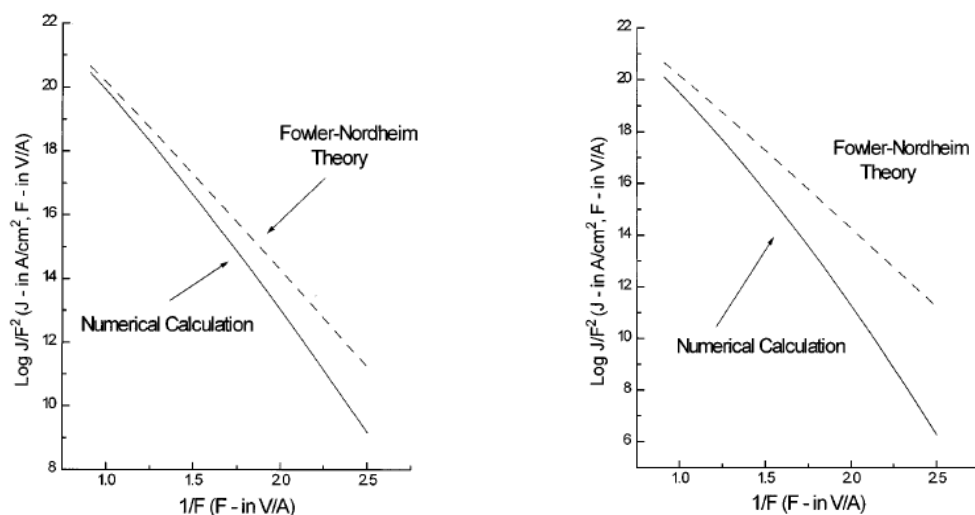
Βλέπουμε ότι στην περίπτωση επίπεδης γεωμετρίας η καμπύλη είναι πιο στενή που σημαίνει ότι μόνον ηλεκτρονικές καταστάσεις με ενέργειες πολύ κοντά στη στάθμη Fermi συνεισφέρουν ένα μετρήσιμο ρεύμα εκπομπής, ενώ στην υπερβολοειδή ακίδα (όπως και στην κωνική) αυτή η κατανομή διευρύνεται επεκτείνοντας τη μετρήσιμη συνεισφορά προς χαμηλότερες ενεργειακές καταστάσεις. Αυτή η ιδιότητα αποδίδεται στην επίδραση της αιχμηρότητας στο προφίλ του εκάστοτε φράγματος δυναμικού. Για τις εν λόγω μη επίπεδες γεωμετρίες που χρησιμοποιήθηκαν, τα αντίστοιχα φράγματα είναι πιο χαμηλά και στενά σε σχέση με το επίπεδο μοντέλο (για το ίδιο V) και, επομένως, τα λιγότερο ενεργειακά ηλεκτρόνια δύνανται με μεγαλύτερη πιθανότητα να διέλθουν μέσω του φράγματος που αντιλαμβάνονται. Αυτό είναι σε συμφωνία και με το σχ. 16 που μαρτυράει πολύ ισχυρότερο ρεύμα για καμπύλους εκπομπούς απ' ό,τι για επίπεδους, στην ίδια τάση. Τα ευρήματα αυτά υποδεικνύουν ότι, με προσεκτικά σχεδιασμένους αιχμηρούς εκπομπούς, μελέτες ενεργειακής κατανομής κατά την ηλεκτρονική εκπομπή πεδίου θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την πιο λεπτομερή ιχνηλάτηση (probing) της δομής ηλεκτρονικών ζωνών (electronic band structure) υλικών.

Αξίζει να σημειωθεί ότι η παραπάνω συζήτηση αφορά υπολογισμούς και συγκρίσεις υπό σταθερή εφαρμοζόμενη τάση V . Διατηρώντας, αντί αυτής, το τοπικό ενισχυμένο ηλεκτρικό πεδίο F στην επιφάνεια της εκάστοτε ακίδας σταθερό, προκύπτει κάπως διαφορετική εικόνα στα αποτελέσματα. Στο σχήμα 20 βλέπουμε τους κυρίαρχους όρους του συνολικού φράγματος συναρτήσει της απόστασης -επί του άξονα συμμετρίας- από τις κορυφές ακίδων με διαφορετικές ακτίνες (επίπεδη, 8nm , 4nm) υπό σταθερό F (μειώνοντας βαθμιαία το V , χάρη στην ενίσχυση λόγω αιχμηρότητας).



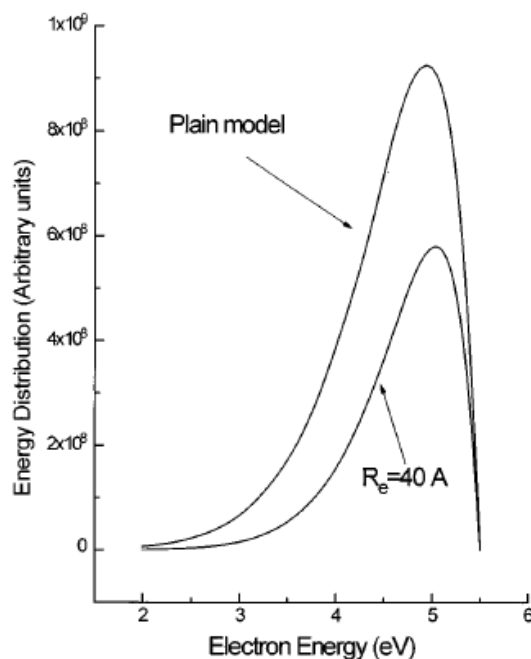
Σχήμα 2-20. Κυρίαρχοι όροι του συνολικού φράγματος συναρτήσει της απόστασης - επί του άξονα συμμετρίας- από τις κορυφές ακίδων με διαφορετικές ακτίνες (επίπεδη, 8nm, 4nm) υπό σταθερό F.

Βλέπουμε ότι τα φράγματα διευρύνονται καθώς μειώνεται το R. Αυτό έχει ως συνέπεια την όλο και μικρότερη κβαντομηχανική πιθανότητα εκπομπής και, επομένως, χαμηλότερη πυκνότητα ρεύματος. Αυτό επιβεβαιώνεται στο σχήμα 21 (a, b) όπου παρουσιάζονται τα διαγράμματα $\log(J/F^2) - 1/F$ για τα 8nm και τα 4nm, αντίστοιχα, και βλέπουμε την προς τα κάτω αυξανόμενη απόκλιση από την κλασική επίπεδη FN περίπτωση.



Σχήμα 2-21. Διαγράμματα $\log(J/F^2) - 1/F$ για τα 8nm και τα 4nm, αντίστοιχα, και βλέπουμε την προς τα κάτω αυξανόμενη απόκλιση από την κλασική επίπεδη FN περίπτωση.

Κατά συνέπεια των ανωτέρω, «αντιστρέφεται» η σχετική θέση των ενεργειακών κατανομών των ηλεκτρονίων που συνεισφέρουν στην εκπομπή επίπεδου εκπομπού και εκπομπού με μικρό R . Το αντίστοιχο του σχ. 19 για σταθερό F φαίνεται στο σχήμα 22 για $R=4\text{nm}$ και $R \gg 4\text{nm}$. Η εικόνα αυτή οφείλεται ακριβώς στο διευρυμένο φράγμα του σχ. 20 για $R=4\text{nm}$ που εμποδίζει τα ηλεκτρόνια χαμηλότερων ενεργειακών επιπέδων από τα να είναι διαθέσιμα για εκπομπή, πιθανοθεωρητικά.



Σχήμα 2-22. Το αντίστοιχο του σχ. 4 για σταθερό F .

Εν κατακλείδι, αναφέρουμε ότι η παραδοσιακή FN θεωρία στηρίζεται στις ακόλουθες παραδοχές:

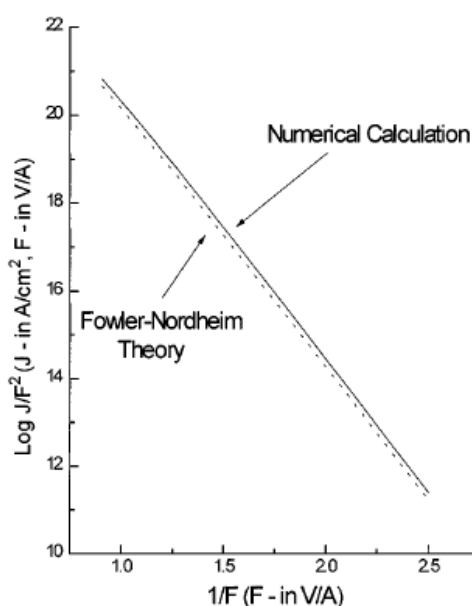
(1) Το φράγμα δυναμικού στο σύνορο μετάλλου – κενού υποτίθεται επίπεδο. Αυτή η προσέγγιση είναι έγκυρη αν το εύρος του φράγματος είναι σημαντικά μικρότερο από την ακτίνα καμπυλότητας της αιχμής της ακίδας. Τότε (α) μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι τιμές του εξωτερικά εφαρμοζόμενου πεδίου F είναι ίδιες σε κάθε σημείο του χώρου μεταξύ ανόδου και καθόδου, ότι δηλαδή το πεδίο είναι ομογενές, και, κυρίως, σταθερό πάνω στην εκπέμπουσα επιφάνεια, καθώς και (β) να υποθέσουμε ότι η αλληλεπίδραση ενός ηλεκτρονίου που εκπέμπεται με το κατοπτρικό είδωλο (και τα φορτία που μένουν πίσω στο μέταλλο και κοντά στην επιφάνειά του) περιγράφεται από την απλή, επίπεδη, μονοδιάστατη έκφραση. Τότε, γίνεται δυνατό να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της πιθανότητας ηλεκτρονικής σήραγγος το αποτέλεσμα της αυστηρής μαθηματικής επίλυσης του μονοδιάστατου κβαντομηχανικού προβλήματος (εξίσωση Schroedinger) ή της ασυμπτωτικής επίλυσης στα πλαίσια της ημικλασικής WKB μεθόδου.

(2) Η WKB προσέγγιση είναι, εν γένει, κατάλληλη για την εκτίμηση του συντελεστή διάδοσης μέσα από το φράγμα χωρίς την αναλυτική επίλυση της εξίσωσης Schroedinger αλλά δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα μόνο όταν οι πραγματική τιμή του συντελεστή αυτού είναι εξαιρετικά χαμηλή, ισοδύναμα, για τιμές ηλεκτρικών πεδίων που δεν είναι πολύ υψηλές. Υπενθυμίζεται ότι βασική παραδοχή για την εγκυρότητα των προβλέψεων της WKB μεθόδου σε ένα δεδομένο πρόβλημα σήραγγος είναι, ποιοτικά, να απέχει σημαντικά η κορυφή V_{max} του φράγματος από την ενέργεια E του ηλεκτρονίου και, γενικά, να βρισκόμαστε σε θέση του άξονα μακριά από τα

κλασικά σημεία καμπής (όπου $V(x)=E$), εκτός από την άλλη ποιοτική απαίτηση του να μην είναι πολύ στενό το φράγμα (δηλαδή να μην έχει πολύ μικρό εύρος).

(3) Το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων είναι αποδεκτό για την περιγραφή των ηλεκτρονικών καταστάσεων στον κύριο όγκο του μετάλλου και μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε με καθολική έκφραση για τη ροή ηλεκτρονίων (καρτεσιανή σταθερά παροχής Z_s) που προσπίπτει πάνω στο δυναμικό φράγμα από την πλευρά του μετάλλου, δεδομένου ότι δεν εμφανίζονται φαινόμενα κβαντικού περιορισμού (quantum confinement effects) στην περιοχή της μεταλλικής ακίδας κοντά στην αιχμή της.

Όπως έχουμε πει, τα παραπάνω δίνουν καλά αποτελέσματα για $R>50-100\text{nm}$, διότι τότε το εύρος του φράγματος είναι πολύ μικρότερο από το R και το πρόβλημα ανάγεται ουσιαστικά σε μονοδιάστατο με έγκυρες τις προαναφερθείσες παραδοχές. Ακόμη και η τραχύτητα ατομικής κλίμακας (atomic-scale roughness) της επιφάνειας του εκπομπού και η διακύμανση του έργου εξόδου ανάμεσα στα διάφορες κρυσταλλογραφικές πλευρές (crystallographic faces) δεν αποτελούν σημαντική παραβίαση των μονοδιάστατων υποθέσεων. Αξίζει να αναφερθεί ότι, ακόμα και στην επίπεδη γεωμετρία, η κλασική εξίσωση ρεύματος των F-N αποκλίνει -ελάχιστα βέβαια- από την πραγματική πυκνότητα ρεύματος, καθώς η πρώτη είναι μια πολύ καλή προσέγγιση της δεύτερης, δηλαδή του ολοκληρώματος, πάνω σε ενεργειακές καταστάσεις, του γινομένου της παροχής ηλεκτρονίων με την κατανομή Fermi-Dirac και το συντελεστή διάδοσης. Αυτή η πολύ μικρή διαφορά φαίνεται στο σχήμα 23 παρακάτω:



Σχήμα 2-23 Ακόμα και στην επίπεδη γεωμετρία, η κλασική εξίσωση ρεύματος των F-N αποκλίνει -ελάχιστα βέβαια- από την πραγματική πυκνότητα ρεύματος.

Συμπερασματικά, τα μοντέρνα συστήματα πεδιακής εκπομπής που φέρουν ακίδες με $R\sim 1-4\text{nm}$ (τιμή η οποία είναι συγκρίσιμη ή και μικρότερη, ενίοτε, από το πλάτος του φράγματος) καθιστούν το μονοδιάστατο, καρτεσιανό μοντέλο ακατάλληλο για προσομοίωση των χαρακτηριστικών εκπομπής και ερμηνείας ή πρόβλεψης πειραματικών ευρημάτων. Στις περιπτώσεις αυτές τέτοιων νανο-ακίδων, είναι απαραίτητη μια αναδιατύπωση της θεωρίας από τα θεμέλια. Συγκεκριμένα, πρέπει να προσδιοριστεί το ασύμμετρο δυναμικό στο χώρο (ως συνάρτηση της γωνίας από τον κατακόρυφο άξονα της ακίδας και της απόστασης από την επιφάνειά της) και να λυθεί η τρισδιάστατη εξίσωση Schroedinger με αυτό το δυναμικό. Αυτό είναι το πρόβλημα

είναι πρωτοφανούς δυσκολίας και μόνο ελάχιστες προσπάθειες έχουν γίνει προς αυτήν την κατεύθυνση, που όμως αποτελεί μονόδρομο. Σε αυτές τις προσπάθειες επιχειρεί να συνεισφέρει και η παρούσα διατριβή.

2.4 Θεωρία σφαιρικών εκπομπών

Καθώς είχε γίνει πλέον ευρέως αντιληπτό, χάρη τόσο σε πειραματικές όσο και σε θεωρητικές επιστημονικές δημοσιεύσεις της δεκαετίας του 1990, ότι η κλασική θεωρία FN αδυνατούσε να περιγράψει έγκυρα την πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από ακίδες αιχμηρότερες από 50nm, ο Edgcombe [20] δημοσίευσε το 2005 την εργασία του στην οποία ανέπτυξε μια θεωρία εκπομπής από σφαιρικούς και ημισφαιρικούς εκπομπούς και, κατ' επέκταση προσεγγιστικά, από ακίδες άλλων σχημάτων, με την παραδοχή ότι, τοπικά στην αιχμή τους, αυτές έχουν περίπου τέτοιο προφίλ. Η βασική ιδέα ήταν ότι εφαρμόσε τη μονοδιάστατη θεωρία JWKB σε κάθε στοιχειώδες κομμάτι της επιφάνειας του εκπέμποντος μετάλλου που βρίσκεται σε γωνία θ ως προς τον άξονα κυλινδρικής συμμετρίας, προσδιορίζοντας έτσι την πυκνότητα ρεύματος συναρτήσει της γωνίας αυτής. Χρησιμοποίησε το μοντέλο της σφαίρας πάνω σε κυλινδρικό ή κωνικό στέλεχος (hemisphere on a post / cone, σχ. 1-9c) για την εύρεση των ηλεκτροστατικών μεγεθών του προβλήματος ακολουθώντας το προγενέστερο πρότυπο των Dyke et al. [34]. Το κατοπτρικό δυναμικό για μια σφαιρική μεταλλική επιφάνεια είναι γνωστό και έχει σχετικά απλή έκφραση ενώ το συνολικό φράγμα που βλέπουν τα ηλεκτρόνια μπορεί να γραφεί με τη βοήθεια συναρτήσεων Legendre σε σφαιρικές συντεταγμένες. Εισάγοντας τη μαθηματική έκφραση του εν λόγω φράγματος στον εκθέτη Gamow της μεθόδου JWKB προκύπτουν ολοκληρώματα που δε μπορούν να προσδιοριστούν αναλυτικά. Έτσι ο Edgcombe κατέφυγε σε προσεγγιστικές τεχνικές πολυωνυμικής προσαρμογής και αριθμητικούς υπολογισμούς. Κατόπιν, χρησιμοποιήθηκαν οι εκφράσεις για το ρεύμα και την ενεργό επιφάνεια εκπομπής για να συνδεθούν διάφορες παράμετροι της διάταξης (όπως το έργο εξόδου του μετάλλου, ο συντελεστής ενίσχυσης τοπικού πεδίου σε σχέση με το μακροσκοπικό και η ακτίνα καμπυλότητας της ακίδας) και να προσδιοριστούν κάποιες από αυτές βάσει πειραματικών δεδομένων τάσης και ρεύματος. Γενικώς, η θεωρία αυτή του Edgcombe είναι μια γενίκευση της προηγούμενης απλούστερης θεωρίας FN και έχει χρησιμεύσει για να δώσει μια εκτίμηση του ανοίγματος της δέσμης από εκπομπούς συγκεκριμένου εύρους ακτίνων, ωστόσο αποτελεί μια περίπλοκη μέθοδο η οποία απαιτεί αριθμητικούς υπολογισμούς υπεισερχόμενων μεγεθών και που εισάγει σφάλματα τα οποία εντείνονται καθώς η αιχμηρότητα της ακίδας αυξάνει.

2.5 Ανεξαρτησία των I-V χαρακτηριστικών από την κλίμακα (scale invariance)

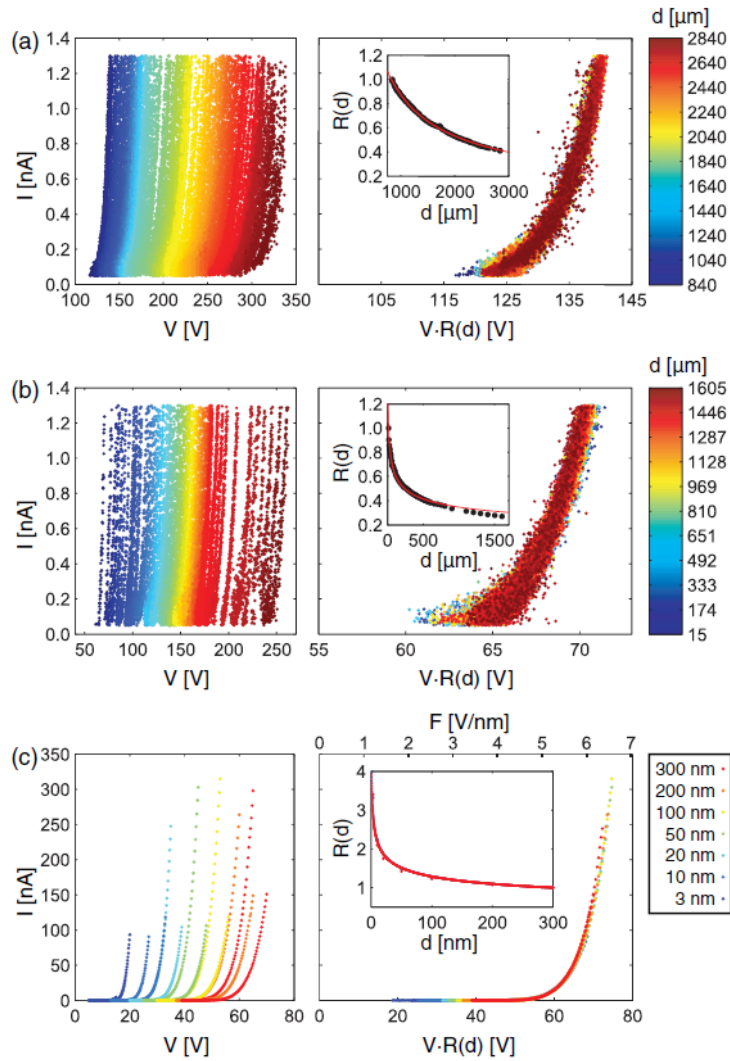
Στην παράγραφο αυτή θα παρουσιάσουμε μια πολύ σημαντική συστημική ιδιότητα των διατάξεων κενού που στηρίζονται στην πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων. Αυτή η χαρακτηριστική ιδιότητα αφορά την σχεδόν «ανεξαρτησία» της λειτουργίας της διάταξης από την απόσταση d του εκπομπού από το δείγμα/συλλέκτη ηλεκτρονίων (άνοδο). Πρόκειται για τη λεγόμενη «ιδιότητα κλιμάκωσης» (scale invariance / scaling property) που παρατηρήθηκε πρόσφατα πειραματικά [35] και κατόπιν ερμηνεύτηκε και θεωρητικά [36]. Η ύπαρξη τέτοιας συμπεριφοράς επιτρέπει ουσιαστικά τη μελέτη των χαρακτηριστικών εκπομπής τέτοιων διατάξεων σε συγκεκριμένες μόνο τιμές της παραμέτρου d , δεδομένου ότι γνωρίζουμε τη «σταθερά» κλιμάκωσης της εκάστοτε διάταξης. Το φαινόμενο αυτό έχει, λοιπόν, συνέπειες τόσο για την πειραματική και θεωρητική έρευνα όσο και για την τεχνολογία, διότι πρακτικά υποδεικνύει ότι η συμπεριφορά του οργάνου που φέρει τέτοιο σύστημα εκπομπής (π.χ. NFESM) δεν επηρεάζεται ριζικά από το μέγεθός του (ή την κλίμακά του), για ένα πολύ μεγάλο εύρος διαστάσεων, όπως θα δούμε.

Η φυσική διεργασία που οδηγεί στην εκπομπή ηλεκτρονίων από μια αιχμηρή μεταλλική ακίδα προφανώς εξαρτάται εν γένει από την απόσταση της από την άνοδο με την οποία βρίσκεται σε διαφορά δυναμικού. Στην εργασία [35] οι Cabrera et al. μέτρησαν συστηματικά τις χαρακτηριστικές ρεύματος-τάσης μιας διόδου σήραγγος (diodelike tunnel junction) σε λειτουργία πεδιακής εκπομπής όπου το d μεταβαλλόταν από μερικά mm μέχρι μερικά nm. Παρατήρησαν (σχ.24) ότι οι οικογένεια καμπυλών που περιγράφουν το ρεύμα I σε συνάρτηση της τάσης V και του d (ως παράμετρο) μπορεί να «καταρρεύσει» (collapse) σχεδόν σε μια μόνο καμπύλη όταν το I παρασταθεί συναρτήσει μιας μεταβλητής κλιμάκωσης της μορφής $VR(d)$, όπου $R(d)=d^{-\lambda}$ με το λ να είναι κάποια σταθερά που ενδεχομένως αλλάζει τιμή σε διαφορετικά εύρη τιμών του d και μπορεί να προσδιοριστεί πειραματικά αλλά και θεωρητικά. Με άλλα λόγια, το εν λόγω φαινόμενο της κλιμάκωσης σημαίνει ότι, πολλαπλασιάζοντας τον άξονα των τάσεων με τον εκάστοτε παράγοντα/συντελεστή κλιμάκωσης (scaling factor) $R(d)$, οι αρχικές καμπύλες I - V που ελήφθησαν πειραματικά για τα διάφορα d εκπίπτουν (ή εκφυλίζονται) σε μια παχιά δέσμη καμπυλών. Έτσι, οι χαρακτηριστικές I - V μιας διόδου σήραγγος παραμένουν αμετάβλητες ως προς την απόσταση d ανόδου-καθόδου υπό το μετασχηματισμό κλιμάκωσης (scaling transformation) της τάσης: $V \rightarrow VR(d)$.

Στο παρακάτω σχήμα 1(a-c) παρουσιάζονται τα διαγράμματα κλιμάκωσης για τρεις διαφορετικές περιοχές τιμών d . Σε κάθε περίπτωση περιέχεται η καμπύλη που περιγράφει τον αντίστοιχο συντελεστή $R(d)$, ο οποίος, υπογραμμίζεται δεν εξαρτάται από την τιμή του I . Στα πειράματα αυτά η σταθερά λ πέρασε από την προσεγγιστική τιμή (a) 0,71 (για $d=850-3000\mu\text{m}$) στην τιμή περίπου (b) 0,27 (για $d=15-1600\mu\text{m}$) και τελικά κατέληξε γύρω στο (c) 0,22 (για $d=3-300\text{nm}$).

Στο [35] σχολιάστηκε ότι, από θεωρητικής σκοπιάς, ο εκθέτης λ πηγάζει από τη λύση της εξίσωσης Laplace στην περιοχή ενός «ανώμαλου» σημείου (αιχμή της ακίδας, singular point) και υφίσταται αλλαγές στην τιμή του αναλόγως με το αν το d είναι συγκρίσιμο με το συνολικό μήκος L της ακίδας ή αν $d \ll L$ ή, τέλος, αν το d είναι συγκρίσιμο με την τιμή της ακτίνας καμπυλότητας R του εκπομπού.

Πολύ σύντομα μετά τα ανωτέρω πειραματικά ευρήματα, οι Kyritsakis-Xanthakis-Pescia προχώρησαν σε μια θεωρητική εργασία [36] όπου έδωσαν τη θεωρητική εξήγηση αυτού του φαινομένου. Μοντελοποιώντας το φράγμα δυναμικού ενός ρεαλιστικού εκπομπού αναπαρήγαγαν σε προσομοίωση τόσο τη συμπεριφορά κλιμάκωσης ποιοτικά όσο και τις μικρές αποκλίσεις από αυτήν για συγκεκριμένες περιοχές τιμών κάποιων παραμέτρων, δηλαδή όσα είχαν παρατηρηθεί λίγο νωρίτερα εργαστηριακά.



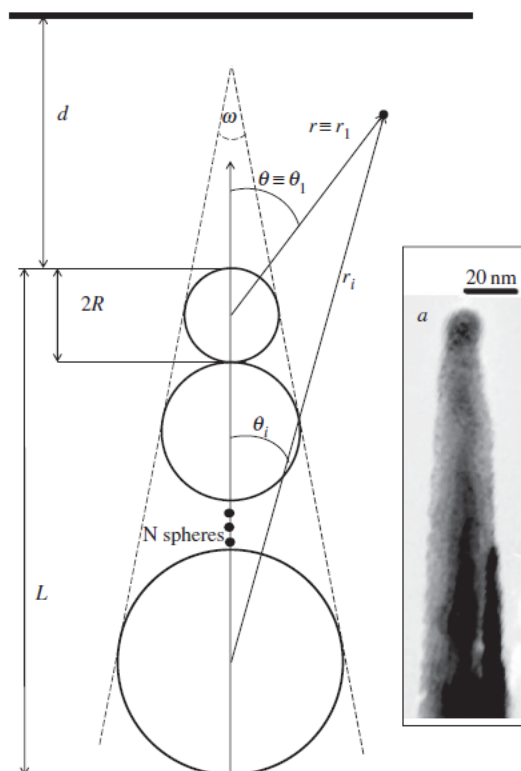
Σχήμα 2-24. [35] Πειραματικά διαγράμματα κλιμάκωσης για τρεις διαφορετικές περιοχές τιμών d .

Αρχικά, να σημειωθεί ότι αν η εκπέμπουσα επιφάνεια είναι σχεδόν επίπεδη (μεγάλο R) τότε περιγράφεται πιστά από την παραδοσιακή εξίσωση FN [37,38], όπως γνωρίζουμε. Αυτή η εξίσωση περιέχει μόνο μια φυσική μεταβλητή, το (τοπικό) ηλεκτρικό πεδίο F . Επομένως, κλιμακώνοντας την τάση ισοδυναμεί απλώς με κλιμάκωση του F . Με άλλα λόγια, εφόσον το φράγμα δυναμικού περιγράφεται επαρκώς από την απλή έκφραση $U(x) = \phi - Fx$ (ϕ είναι το έργο εξόδου του μετάλλου), αλλάζοντας κατάλληλα (γραμμικά, εδώ) το V με το d ώστε να παραμένει το F σταθερό είναι ακριβώς ό,τι χρειάζεται για να έχουμε το ίδιο περίπου I σε όλα αυτά τα d (και V).

Ωστόσο, τα παραπάνω πειραματικά αποτελέσματα διεξήχθησαν με ακίδες που είχαν $R \sim 4\text{-}6\text{nm}$ [35]. Σε αυτήν την περίπτωση, το δυναμικό απέχει πολύ από το να είναι γραμμικό με την απόσταση x από την κορυφή της ακίδας [25,26] και, επιπλέον, μεταβάλλεται έντονα με τη γωνία θ ως προς τον άξονα συμμετρίας. Εν ολίγοις, το φράγμα σήραγγος, είναι από τη φύση του τρισδιάστατο και η τιμή του εξαρτάται από το εκάστοτε σημείο, συνεπώς, εκ πρώτης τουλάχιστον όψεως, δεν υπάρχει βαθμωτή ποσότητα που να μπορεί να κλιμακώσει ολόκληρο το πεδίο σε σχέση με το d , κρατώντας έτσι το I σε σταθερά επίπεδα. Σημειώνεται ότι η πυκνότητα ρεύματος

σήραγγος (εκπομπής) J σε ένα δεδομένο σημείο είναι ένα συναρτησιακό (functional) του συνολικού δυναμικού. Παρακάτω θα δούμε πως, όταν $d \gg R$, πράγματι υπάρχει μια κατάλληλη παράμετρος κλιμάκωσης -όπως υποδεικνύει το πείραμα- χάρη στους αλγεβρικούς και αριθμητικούς υπολογισμούς των K-X-P.

Η πειραματική ακίδα που χρησιμοποιήθηκε στο [35] είχε μακροσκοπικά κωνικό προφίλ με σφαιρική αιχμή, όπως φαίνεται στην εικόνα μικροσκοπίου που έχει ενσωματωθεί στο σχήμα 25. Για τους σκοπούς της προσομοίωσης, το σχήμα αυτό μοντελοποιήθηκε με μια κατακόρυφη στοίβα από σφαίρες μειούμενης ακτίνας (από κάτω προς την κορυφή), όπως δείχνεται επίσης στο σχ. 25:



Σχήμα 2-25. [36] Στοίβα από σφαίρες μειούμενης ακτίνας που μοντελοποιούν την ακίδα της ένθετης εικόνας TEM.

Ωστόσο, τα αναλυτικά/αλγεβρικά επιχειρήματα που θα παρουσιαστούν αργότερα δεν απαιτούν κάποια συγκεκριμένη γεωμετρία, ενώ το παραπάνω σχήμα επιλέχθηκε απλώς για να γίνουν συγκεκριμένοι αριθμητικοί υπολογισμοί με βάσει τη θεωρία της παρούσας ενότητας, ως παράδειγμα «αναπαραγωγής του πειράματος».

Θέτοντας τις συνοριακές συνθήκες μηδενικού δυναμικού πάνω στην ακίδα και δυναμικού ίσου με την εφαρμοζόμενη τάση V στην άνοδο, το ηλεκτροστατικό δυναμικό Φ προσδιορίζεται ακριβώς -με αναλυτική επίλυση της εξίσωσης Laplace- ως ένα άπειρο άθροισμα όρων, το οποίο αποτελεί υπέρθεση των επιμέρους λύσεων -για κάθε σφαίρα της στοίβας χωριστά- συναρτήσεων των ειδικών πολωνύμων Legendre, εκφρασμένων σε σφαιρικές συντεταγμένες ως προς το κέντρο της κάθε σφαίρας, αντίστοιχα. Η εν λόγω επίλυση καθώς και η διαδικασία προσδιορισμού των συντελεστών του περικομμένου αθροίσματος (truncated sum) είναι παρόμοιες με εκείνες των [7,39].

Έτσι, με προσθήκη στο $\Phi(r, \theta)$ του έργου εξόδου και του δυναμικού ειδώλου σφαιρικής επιφάνειας, προκύπτει το συνολικό φράγμα σήραγγος που βλέπουν τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια:

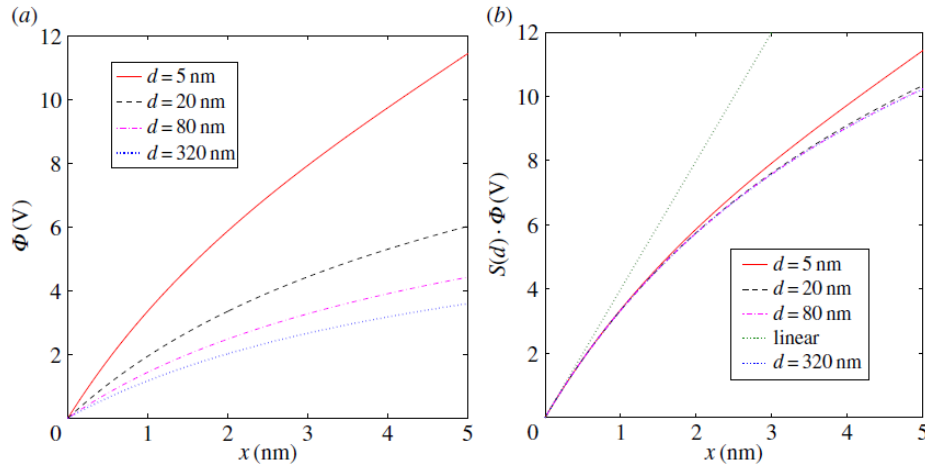
$$U(r, \theta) = \varphi - e\Phi(r, \theta) - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{R}{r^2 - R^2}$$

Στο σχήμα 26(α) παρουσιάζονται τα προφίλ της λύσης Φ -για διάφορες τιμές του d - συναρτήσει της απόστασης $x=r-R$ από την κορυφή του εκπομπού (για $\theta=0$) με $V=11,43$ volt, $R=4\text{nm}$, μήκος ακίδας $L=1,2456\mu\text{m}$ και πλήρη γωνία επίπεδης τομής του κώνου $\omega=7^\circ$. Η τιμή του V επιλέχθηκε ώστε για $d_0=5\text{nm}$ να προκύπτει $F(d_0)=4\text{V/nm}$. Τώρα εφαρμόζεται ο κανόνας κλιμάκωσης: πολλαπλασιάζουμε το V με έναν παράγοντα κλιμάκωσης $S(d)$ τέτοιον ώστε το ηλεκτρικό πεδίο στην κορυφή της ακίδας να είναι ίσο προς $F(d_0)$ για κάθε τιμή του d . Συνεπώς, ο μετασχηματισμός κλιμάκωσης εδώ είναι:

$$V'(d) = S(d)V = \frac{F(d_0)}{F(d)}V$$

όπου $F(d)$ είναι το υπολογισμένο ηλεκτρικό πεδίο στην κορυφή πριν από το μετασχηματισμό. Σημειώνεται ότι η ιδέα κανονικοποίησης της κατανομής του δυναμικού με βάση το (μέγιστο) πεδίο στην αιχμή έχει χρησιμοποιηθεί και παλιότερα [40]. Η σχέση του συντελεστή $S(d)$ με τον αντίστοιχο πειραματικό, $R(d)$, θα φανερωθεί πιο κάτω. Τα αποτελέσματα της κλιμάκωσης παρουσιάζονται το σχ. 26(b). Παρατηρούμε ότι όλα τα δυναμικά του (α) «πέφτουν» πάνω στην καμπύλη εκείνου που αντιστοιχεί σε $d=d_0=5\text{nm}$ σε μια περιοχή του x η οποία:

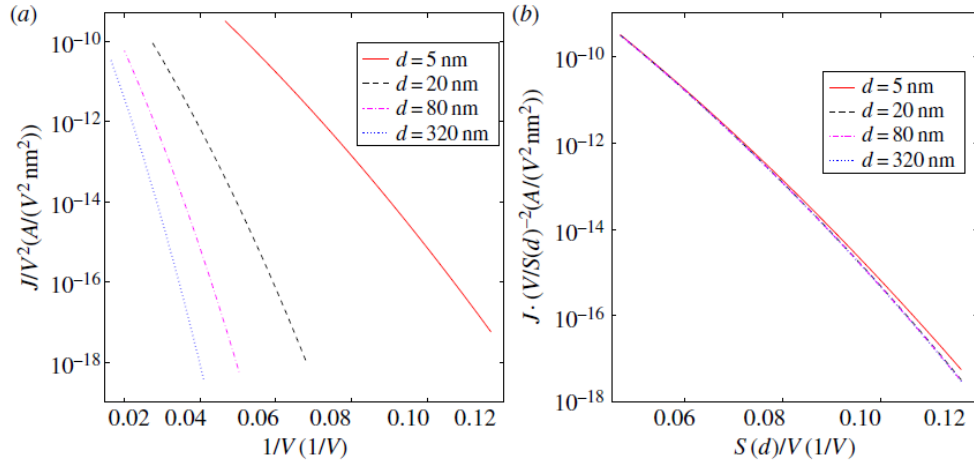
- (i) είναι σίγουρα ευρύτερη από την περιοχή γραμμικότητας του Φ
- (ii) είναι πολύ μεγαλύτερη από την απόσταση σήραγγος (συνήθως 1-1,5nm). Υπενθυμίζεται ότι όταν το R είναι αυτής της τάξης μεγέθους ($<20\text{nm}$) το δυναμικό μέσα στην περιοχή του φράγματος παύει να είναι γραμμικό με το x .
- (iii) Επιπλέον, βλέπουμε ότι η «κατάρρευση» είναι πολύ «καλή» για $d \gg R$ ενώ χειροτερεύει όταν το d μειώνεται, δηλαδή καθώς η ακίδα πλησιάζει την άνοδο. Πρέπει να τονιστεί ότι, παρ' όλο που η παραπάνω κλιμάκωση έγινε με $V=11,43$ volts, ισχύει για κάθε τιμή V , δηλαδή το $S(d)$ δεν εξαρτάται από το V .



Σχήμα 2-26. (α) Τα προφίλ της λύσης Φ -για διάφορες τιμές του d - συναρτήσει της απόστασης $x=r-R$ από την κορυφή του εκπομπού (για $\theta=0$) **(β)** Κλιμάκωση που προκύπτει από την προσομοίωση.

Εφόσον το δυναμικό F παραμένει αμετάβλητο (invariant) κατόπιν του κατάλληλου μετασχηματισμού, είναι αναμενόμενο, κατ' επέκταση, να παραμένει αμετάβλητη και η εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος J . Στο επόμενο σχήμα 27(α) βλέπουμε διάφορες καμπύλες τύπου FN για την πυκνότητα $J_0(V, d)$ στην κατεύθυνση $\theta=0$, σε τάση V και απόσταση d της ακίδας από την άνοδο. Οι υπολογισμοί βασίζονται σε μονοδιάστατη

WKB προσέγγιση. Στο σχ. 27(b) παρουσιάζονται οι αντίστοιχες καμπύλες συναρτήσεως της «κλιμακωμένης» ποσότητας $V/S(d)$. Πάλι παρατηρούμε το φαινόμενο κατάρρευσης για όλα τα d . Μια μικρή απόκλιση από την τέλεια κατάρρευση εμφανίζεται για μικρά d και πολύ μικρές τάσεις διότι τότε το ηλεκτρικό πεδίο γίνεται πολύ μικρό και η απαγορευμένη περιοχή εκτείνεται μέχρι σημεία όπου ο αντίστοιχος εκφυλισμός του δυναμικού δεν είναι απόλυτος, σύμφωνα με το σχ. 26.

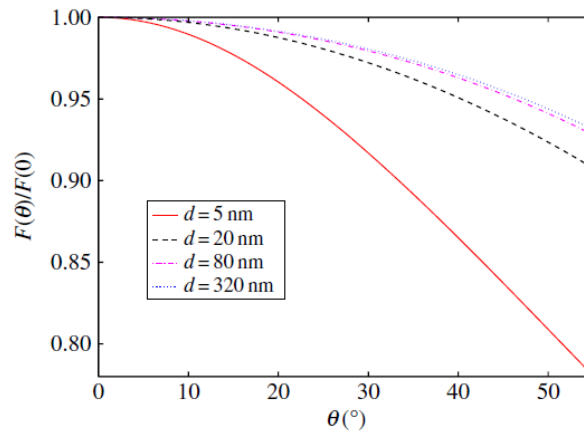


Σχήμα 2-27. (a) Διάφορες καμπύλες τύπου FN για την πυκνότητα $J_0(V,d)$ στην κατεύθυνση $\theta=0$. **(b)** Κλιμάκωση που προκύπτει από την προσομοίωση.

Μέχρι τώρα συζητήθηκε το J , συγκεκριμένα για $\theta=0$. Πως όμως θα περάσουμε στο I που είναι η πειραματικά μετρούμενη ποσότητα και καθορίζεται (ως ολοκλήρωμα) από το $J(\theta)$ σε διάφορες γωνίες γύρω από την κορυφή; Η μεταβολή του δυναμικού με την απόσταση από την επιφάνεια του εκπομπού κατά μήκος άλλων γωνιών θ ακολουθεί μια παρόμοια συμπεριφορά και, φυσικά, συμβαίνει πάλι κατάρρευση των διαφόρων καμπυλών, με τη διαφορά ότι, στη γενική περίπτωση, ο συντελεστής κλιμάκωσης έχει εξαρτάται από την εκάστοτε γωνία:

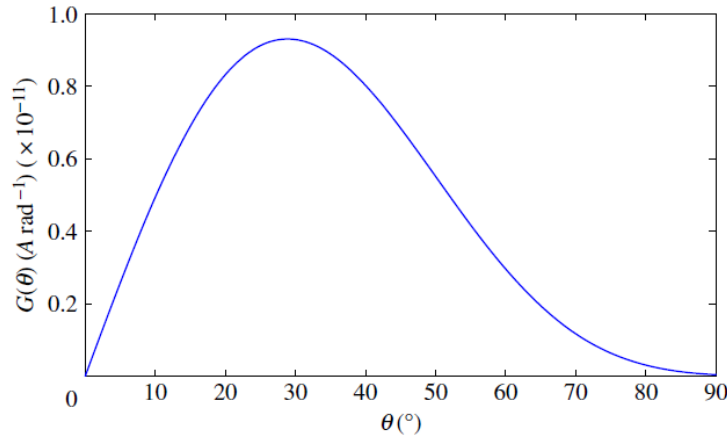
$$S_\theta(d) = \frac{F(\theta, d_0)}{F(\theta, d)}$$

όπου $F(\theta,d)$ είναι το ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια της ακίδας και σε γωνία θ με τον άξονά της όταν η απόσταση της κορυφής της από το συλλέκτη είναι d . Στο σχήμα 28 βλέπουμε το λόγο του $F(\theta)$ προς το αντίστοιχο μέγιστο $F(0)$ συναρτήσει του θ για διάφορα d :

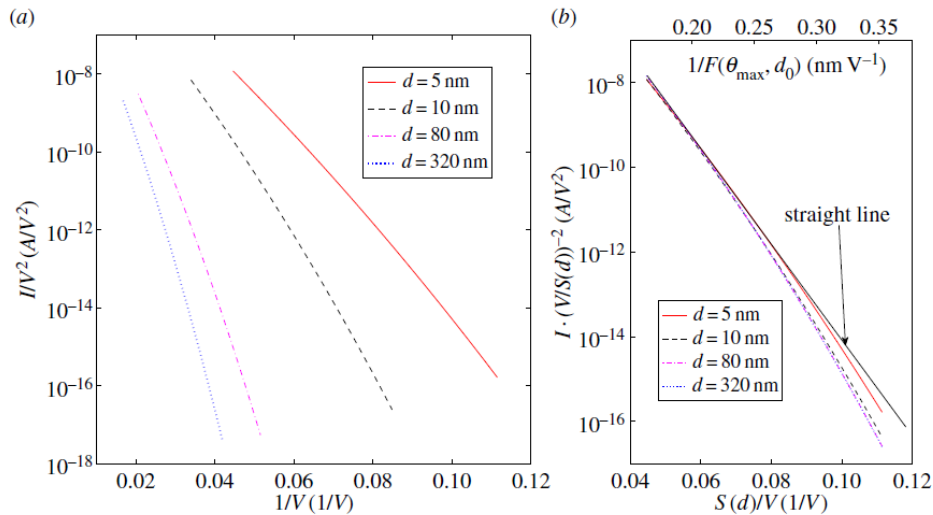


Σχήμα 2-28. Ο λόγος του $F(\theta)$ προς το αντίστοιχο μέγιστο $F(0)$ συναρτήσει του θ για διάφορα d .

Όπως περιγράφεται πιο αναλυτικά στο [36], μόνο ένα μικρό εύρος γωνιών συνεισφέρει κατά κύριο λόγο στον υπολογισμό του ρεύματος. Αυτό μαρτυρείται από το σχήμα 29 όπου βλέπουμε το *ρεύμα ανά μονάδα γωνίας*, G , συναρτήσει του θ . Το μέγεθος αυτό είναι ουσιαστικά η ολοκληρωτέα ποσότητα JdS στο ολοκλήρωμα που δίνει το I σε καμπυλόγραμμες συντεταγμένες, δηλαδή $G(\theta)=2\pi R^2 J(\theta)\sin\theta$, και παίρνει «μεγάλες» τιμές γύρω από μια συγκεκριμένη περιοχή γωνιών, όπως φαίνεται στο διάγραμμα. Με αυτό κατά νου, προκύπτει, τελικά, πράγματι, η κατάρρευση και των χαρακτηριστικών I - V με χρήση του μετασχηματισμού κλιμάκωσης ιδιαίτερα για $\theta=\theta_{\max}$ (περισσότερες λεπτομέρειες στο [36]), όπως παρουσιάζεται στο σχήμα 30 πιο κάτω.



Σχήμα 2-29. Ρεύμα ανά μονάδα γωνίας συναρτήσει του θ .



Σχήμα 2-30. Κατάρρευση και των χαρακτηριστικών I - V με χρήση του μετασχηματισμού κλιμάκωσης (ιδιαίτερα για $\theta=\theta_{\max}$).

Σημειώνεται ότι ο πειραματικός συντελεστής κλιμάκωσης συνδέεται με το θεωρητικό μέσω της σχέσης:

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

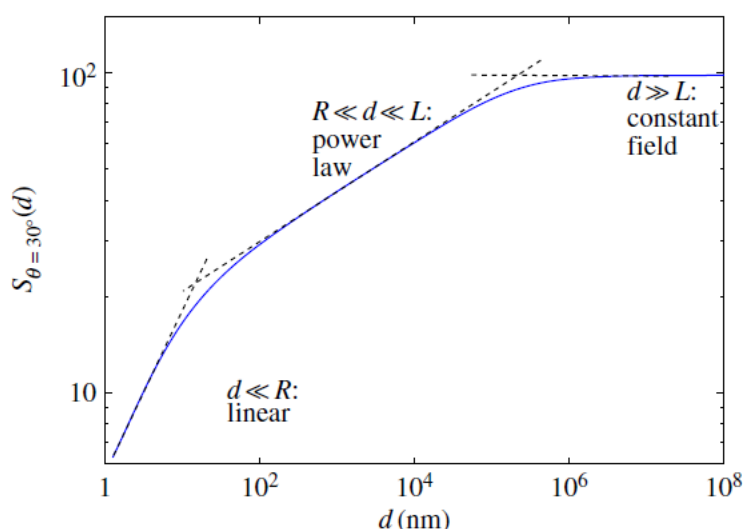
Όπως απέδειξαν οι K-X-P, οι εν λόγω συμπεριφορά κλιμάκωσης οφείλεται και καθορίζεται πρωτίστως από το μη γραμμικό όρο του δυναμικού Φ και δε σχετίζεται συγκεκριμένα με το γεωμετρικό σχήμα της ακίδας. Όπως έχει γίνει και σε προηγούμενη ενότητα όταν μιλούσαμε για τη γενίκευση της εξίσωσης FN για ακίδες με $R > 5\text{nm}$ από τους K-X, έτσι κι εδώ, το Φ αναπτύσσεται κατά Taylor γύρω από το $r=R$ (δηλαδή ως προς μικρά $x=r-R$, κοντά στην επιφάνεια της ακίδας), για αυθαίρετη γωνία θ_0 , μέχρι το μη γραμμικό (δεύτερο) όρο. Με χρήση της εξίσωσης Laplace σε οποιοδήποτε ορθογώνιο σύστημα καμπυλόγραμμων συντεταγμένων (u,v,φ) όπου ο εκπομπός αναπαρίσταται από μια επιφάνεια $u=u_0$ σταθερό και παρουσιάζει κυλινδρική (αξιμουθιακή) συμμετρία (δηλαδή μηδενίζονται οι παράγωγοι ως προς τη γωνία φ), προκύπτει ότι ο μη γραμμικός όρος του αναπτύγματος Taylor είναι ανάλογος του πρώτου και ο λόγος τους είναι ανεξάρτητος του d .

Πιο συγκεκριμένα, για παράδειγμα, σε σφαιρικές συντεταγμένες, παίρνουμε τη σχέση:

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

Αυτή η σχέση συνεπάγεται ότι, εάν κλιμακώσουμε το ηλεκτρικό πεδίο στην επιφάνεια της ακίδας σε ένα σημείο της με $\theta=\theta_0$, δηλαδή το $F(\theta_0)$ το οποίο ισούται με την πρώτη παράγωγο του Φ που εμφανίζεται στο δεξί μέλος, τότε αυτόματα κλιμακώνεται και ο μη γραμμικός όρος, δηλαδή η παράγωγος του αριστερού μέλους: ο καθένας από αυτούς τους όρους εξαρτάται, εν γένει, από το d αλλά το πηλίκό τους όχι. Κάτι αντίστοιχο δεν ισχύει και για τους επόμενους όρους Taylor, γεγονός που ευθύνεται για τις μικρές αποκλίσεις από την πλήρη κατάρρευση των καμπυλών σε μία, που βλέπουμε στα διάφορα σχήματα.

Όπως αναφέραμε στην αρχή της ενότητας, πειραματικά παρατηρήθηκε ένας «νόμος κλιμάκωσης» της μορφής $S(d)=ad^\lambda$, όπου a μια σταθερά αναλογίας και λ μια θετική ποσότητα, γύρω στο 0,2. Αυτή η παρατήρηση επιβεβαιώθηκε θεωρητικά για «ενδιάμεσες» τιμές του d . Στο σχήμα 31 παρουσιάζεται το αποτέλεσμα αριθμητικών υπολογισμών για μια κωνική στοίβα σφαιρών με την ακτίνα της μικρότερης $R=5\text{nm}$, κωνική γωνία $\omega=10^\circ$ και συνολικό μήκος ακίδας $L=326,4\mu\text{m}$. Το διάγραμμα αυτό αφορά το $S_{\theta=30^\circ}(d)$ δηλαδή στην τάση που απαιτείται στα διάφορα d προκειμένου να διατηρηθεί σταθερό το $F(\theta=30^\circ)$.



Σχήμα 2-31. Το αποτέλεσμα των παρόντων αριθμητικών υπολογισμών για το «νόμο κλιμάκωσης» σε διάφορες περιοχές τιμών του d .

Στο διάγραμμα αυτό, παρατηρούμε τρεις χαρακτηριστικές περιοχές για τον κανόνα κλιμάκωσης:

- (i) Σε πολύ μικρά $d \ll R$, το πεδίο ακολουθεί τον κανόνα πυκνωτή παράλληλων οπλισμών (parallel-plate capacitor law) $F=V/d$, δηλαδή υπάρχει γραμμική εξάρτηση του $S(d)$.
- (ii) Σε ενδιάμεσες τιμές του d ($R \ll d \ll L$), παρατηρείται εκθετικός νόμος με $\lambda=0,153$.
- (iii) Εν τέλει, σε πολύ μεγάλα $d \gg L$, η μεταβολή του d δεν επηρεάζει το ηλεκτρικό πεδίο στην ακίδα και ο μετασχηματισμός κλιμάκωσης είναι σταθερή συνάρτηση.

Παρόμοιοι υπολογισμοί έγιναν για διάφορες κωνικές γεωμετρίες και προέκυψε ότι το λ εξαρτάται πρακτικά μόνο από τη γωνία ανοίγματος του κώνου ω καθώς και ότι η συνάρτηση $\lambda(\omega)$ είναι σχεδόν γραμμική για το εύρος τιμών του ω που χρησιμοποιήθηκε στις πειραματικές μετρήσεις [35]. Τα αποτελέσματα των παρόντων αριθμητικών υπολογισμών είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειράματα του [35] αλλά και με τη θεωρητική ανάλυση που έγινε εκεί, η οποία βασίστηκε στην αναλυτική λύση της εξίσωσης Laplace για αιχμηρή κωνική γεωμετρία [41].

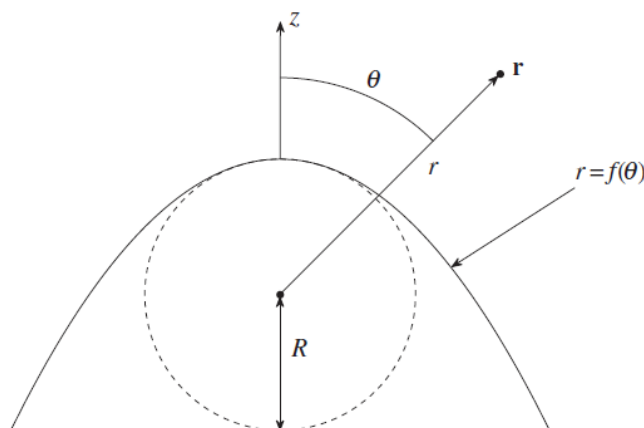
2.6 Γενικευμένη FN-τύπου θεωρία εκπομπής πεδίου

Οι Kyritsakis και Xanthakis, αναγνωρίζοντας την απουσία μιας εξίσωσης εκπομπής ρεύματος που να είναι εφαρμόσιμη σε μια αυθαίρετα αιχμηρή νανοσκοπική ακίδα ($R < 20\text{nm}$) σε λειτουργία τόσο κοντινού όσο και μακρινού πεδίου και η οποία να προκύπτει από αναλυτική, αλγεβρική διαδικασία από θεμελιώδεις αρχές (from first principles), προχώρησαν σε μια τέτοια θεωρητική γενικευμένη εξίσωση [42] τύπου FN η οποία (1) αφορά αυθαίρετες γεωμετρίες μεταλλικής επιφάνειας και κατανομές δυναμικών γύρω από τον εκπομπό και (2) περιέχει στους διορθωτικούς παράγοντές της (correction factors) μια καινούρια συνάρτηση μίας μόνο μεταβλητής, συγκεκριμένα της γνωστής μεταβλητής y της παραδοσιακής θεωρίας FN [37]. Αυτή η νέα συνάρτηση δόθηκε από τους Kyritsakis και Xanthakis μέσω μιας απλής αλλά αρκούντως ακριβής ασυμπτωτικής μαθηματικής έκφρασης που προσδίδει στην εν λόγω γενικευμένη εξίσωσή τους για το ρεύμα ευκολία και αμεσότητα στη χρήση. Επίσης, έδειξαν πως από τη εξίσωσή τους και έχοντας πειραματικά δεδομένα μπορούν να προσδιοριστούν το τοπικό πεδίο στην κορυφή της ακίδας καθώς και η ακτίνα καμπυλότητάς της.

Η κυρίαρχη ιδέα πίσω από την εξίσωση K-X ήταν ότι για εκπομπούς με αιχμηρότητα στη νανοκλίμακα μια ορθή γενίκευση του φράγματος δυναμικού θα έπρεπε να περιλάβει τον όρο δεύτερης τάξης του αναπτύγματος Taylor γύρω από την κορυφή της ακίδας μαζί με τον κλασικό γραμμικό όρο και το δυναμικό ειδώλου. Όπως προκύπτει, είναι δυνατό να βρεθεί μια έκφραση για το συντελεστή του όρου αυτού για μια αυθαίρετη «λεία» και περιστροφικά συμμετρική μεταλλική ακίδα και, στη συνέχεια, με χρήση του ολοκληρωτικού τύπου του Leibniz, μπορεί να προσδιοριστεί η πυκνότητα ρεύματος στον άξονα συμμετρίας της ακίδας.

Έστω ότι η ακίδα τίθεται σε δυναμικό 0 και η άνοδος σε V . Όπως είπαμε, υποτίθεται περιστροφική (αξιμουθιακή) συμμετρία στο πρόβλημα. Δεδομένου ότι η μεταλλική

επιφάνεια είναι ομαλή, ορίζεται η ακτίνα καμπυλότητάς της R στην κορυφή. Ο αντίστοιχος εγγεγραμμένος κύκλος (osculating/inscribed) έχει το κέντρο του πάνω στον άξονα συμμετρίας z . Θεωρούμε ένα σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων (r, θ, φ) με αρχή το κέντρο του κύκλου αυτού. Η επιφάνεια της ακίδας μπορεί να περιγραφεί από μια εξίσωση $r=f(\theta)$ όπου f είναι μια άρτια συνάρτηση της γωνίας θ . Αυτά φαίνονται στο παρακάτω σχήμα 32:



Σχήμα 2-32. [42] Γενική, ομαλή και συμμετρική επιφάνεια εκπομπού που υποτέθηκε.

Εφόσον η επιφάνεια του μετάλλου εμφανίζει άρτια συμμετρία, η σειρά McLaurin της f έχει μόνο άρτιας τάξης όρους και μάλιστα ο τετραγωνικό όρος απουσιάζει εξ ορισμού της ακτίνας καμπυλότητας και λόγω της ύπαρξης του αντίστοιχου εγγεγραμμένου κύκλου. Έτσι μπορούμε να γράψουμε $r=f(\theta)=R+O(\theta^4)$ για μικρές τιμές της γωνίας θ . Χρησιμοποιώντας την εξίσωση Laplace για το ηλεκτροστατικό δυναμικό $\Phi(r, \theta)$ σε σφαιρικές συντεταγμένες (παραλείποντας τις παραγώγους ως προς τη γωνία φ λόγω κυλινδρικής συμμετρίας) και αξιοποιώντας τη σταθερότητα του Φ πάνω σε όλη την έκταση της αγωγίμης ακίδας, αποδεικνύεται -κατόπιν κάποιων αναλυτικών χειρισμών- ότι

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

όπου F συμβολίζει, όπως συνήθως, το τοπικό ενισχυμένο πεδίο στην κορυφή του εκπομπού $r=R$ και $\theta=0$. Η σχέση αυτή υποδηλώνει ότι ο συντελεστής του δεύτερου όρου στο ανάπτυγμα Taylor του δυναμικού είναι ανάλογος εκείνου του πρώτου που ουσιαστικά είναι το ίδιο το F του γραμμικού όρου της παραδοσιακής θεωρίας. Είναι αξιοσημείωτο ότι η παραπάνω σχέση είναι γενική, δηλαδή ανεξάρτητη της συγκεκριμένης γεωμετρίας της ακίδας, γεγονός που την καθιστά εξαιρετικής σημασίας για τη γενικότητα της παρούσας θεωρίας.

Επιπλέον μπορεί ναδειχθεί ότι για μεγάλα R ισχύουν οι ασυμπτωτικές σχέσεις ($R \rightarrow \infty$):

$$\frac{\partial^3 \Phi}{\partial r^3} = O\left(\frac{1}{R^2}\right)$$

και

$$\frac{\partial^4 \Phi}{\partial r^4} = O\left(\frac{1}{R^3}\right)$$

Κ.Ο.Κ.

Εφόσον το εύρος της απαγορευμένης περιοχής είναι πάντα πολύ μικρό (1-2nm) σε συνθήκες πεδιακής εκπομπής, μπορούμε να αναπτύξουμε το Φ κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα ($\theta=0$) και γύρω από την αιχμή $r=R$ ή $z=r-R=0$, οπότε προκύπτει τελικά:

$$\Phi(z) = FR \left[\frac{z}{R} - \left(\frac{z}{R} \right)^2 + O\left(\left(\frac{z}{R} \right)^3 \right) \right]$$

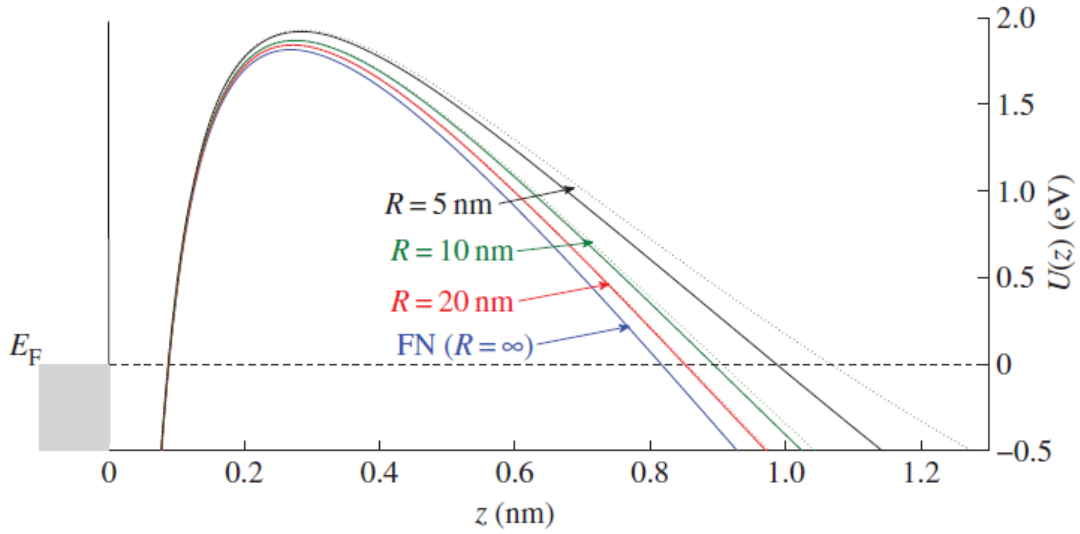
Η τελευταία σχέση είναι το κλειδί για την κατανόηση των προσεγγίσεων που γίνονται στη θεωρία της πεδιακής εκπομπής: το ρεύμα εκπομπής καθορίζεται κυρίως από το ηλεκτροστατικό πεδίο μέσα στην απαγορευμένη περιοχή του φράγματος δυναμικού που βλέπουν τα υποψήφια για εκπομπή ηλεκτρόνια. Για $R > 50\text{nm}$, λαμβάνοντας υπόψιν μόνο το γραμμικό όρο του παραπάνω αναπτύγματος -όπως έχει κάνει επί δεκαετίες η επιστημονική κοινότητα- είναι αρκετό για πολύ ικανοποιητική ακρίβεια στις εφαρμογές. Όταν όμως $R < 20\text{nm}$, παραλείποντας τον τετραγωνικό όρο οδηγεί σε περίπου 10% σφάλμα στο Φ το οποίο προξενεί ένα εκθετικό σφάλμα στον υπολογισμό του συντελεστή σήραγγος και άρα στο εκπεμπόμενο ρεύμα. Ακόμη χειρότερα, όταν $R < 5\text{nm}$ (ακίδες που είναι υλοποιήσιμες με τη μοντέρνα τεχνογνωσία), οι K-X βρήκαν υπολόγισαν ότι είναι απαραίτητος και ο κυβικός όρος. Επιπλέον, για πολύ μικρά R (1-2nm) τα ηλεκτρονικά μονοπάτια δεν είναι πλέον ευθύγραμμα στην περιοχή όπου συντελείται το φαινόμενο σήραγγος. Στην παρούσα ενότητα, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των K-X για $R > 5\text{nm}$ λαμβάνοντας μέχρι και τον τετραγωνικό όρο της σειράς Taylor του Φ .

Προσθέτοντας το έργο εξόδου ϕ της ακίδας και το δυναμικό ειδώλου (που αντιστοιχεί σε μια σφαιρική αγωγή επιφάνεια) στο ηλεκτροστατικό δυναμικό προκύπτει το ενεργειακό φράγμα που βλέπουν τα ηλεκτρόνια της στάθμης Fermi (δηλαδή ορίζεται $E_F=0$):

$$U(z) = \phi - eEz - \frac{C}{z(1 + \frac{z}{2R})} + \frac{eF}{R} z^2$$

όπου $C=e^2/16\pi\epsilon_0$.

Στο παρακάτω σχήμα 33 παρουσιάζεται η ακρίβεια του δυναμικού της μεθόδου K-X μέσω σύγκρισης του φράγματος που προκύπτει από την τελευταία εξίσωση με σχεδόν ακριβή φράγματα που προκύπτουν από λεπτομερή αριθμητικό υπολογισμό για έναν ελλειψοειδή εκπομπό [7] για $F=5\text{V/nm}$ και $\phi=4,5\text{eV}$. Όπως γίνεται φανερό, η λήψη του δεύτερου όρου του αναπτύγματος είναι αρκετή για R μέχρι πάνω από 5nm, ενώ, καθώς το R συρρικνώνεται περαιτέρω, περισσότεροι όροι είναι απαραίτητοι.



Σχήμα 2-33. Υπολογισμένα φράγματα δυναμικού κατά τον άξονα συμμετρίας για διάφορες ακτίνες καμπυλότητας.

Έχοντας συζητήσει για το δυναμικό έξω από την ακίδα γενικευμένου σχήματος, ας δούμε τώρα πως προσδιορίζεται ο συντελεστής διέλευσης μέσα από το φράγμα και κατ' επέκταση η πυκνότητα ρεύματος στην αιχμή του εκπομπού. Χρησιμοποιώντας τη γνωστή WKB έκφραση, παίρνουμε για τον εκθέτη Gamow:

$$G = \frac{2\pi\sqrt{8m}}{h} \int_{z_1}^{z_2} \left(-eEz - \frac{B}{z(1 + \frac{z}{2R})} + \frac{eF}{R} z^2 \right)^{1/2} dz$$

όπου τα είναι τα κλασικά σημεία καμπής (classical turning points) δηλαδή τα μηδενικά (ρίζες) της ολοκληρωτέας ποσότητας στην έκφραση του παράγοντα G. Για το ρεύμα χρησιμοποιήθηκε η σχέση [38]:

$$J = z_s \left[\frac{\partial G}{\partial \phi} \right]^{-2} \exp(-G)$$

όπου $z_s = 4\pi em/h^3$ είναι η κλασική σταθερά παροχής ηλεκτρονίων (Sommerfeld current constant) [45] της θεωρίας πεδιακής εκπομπής για επίπεδες γεωμετρίες. Τελικά, μετά από αναλυτικούς υπολογισμούς, προκύπτει η ζητούμενη μαθηματική έκφραση FN-τύπου των K-X για την πυκνότητα ρεύματος:

$$J_{KX} = [t(y) + \frac{\phi}{eFR} \psi(y)]^{-2} \frac{A}{\phi} F^2 \exp \left\{ -\frac{B}{F} [v(y) + \frac{\phi}{eFR} \omega(y)] \phi^{\frac{3}{2}} \right\}$$

όπου

$$y = 2\sqrt{BF}/\phi$$

$$B \equiv \frac{8\pi\sqrt{2m_0}}{3eh}$$

$$A \equiv \frac{e^3}{8\pi h}$$

$$v(y) \approx 1 - y^2 + \frac{1}{3}y^2 \log(y)$$

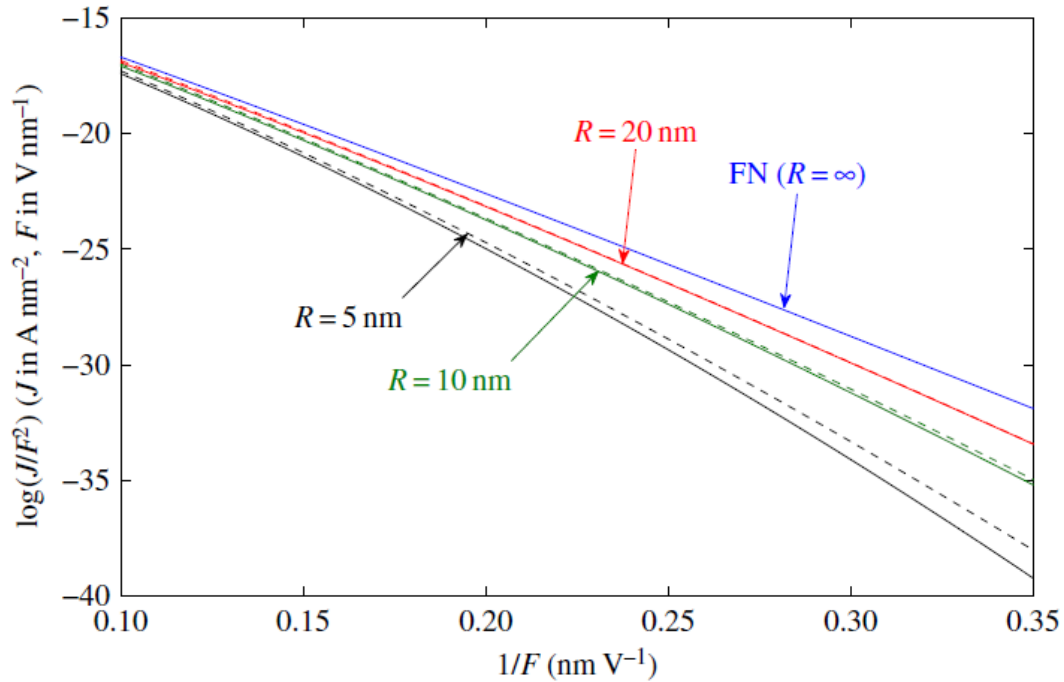
$$t(y) \approx 1 + \frac{1}{9}y^2 - \frac{1}{9}y^2 \log(y)$$

$$\omega(y) \approx \frac{4}{5} - \frac{7}{40}y^2 - \frac{1}{100}y^2 \log(y)$$

$$\psi(y) \approx \frac{5}{3}\omega(y) - \frac{2}{3}y \frac{d\omega}{dy} \approx \frac{4}{3} - \frac{1}{500}y^2 - \frac{1}{15}y^2 \log(y)$$

Οι σταθερές A και B είναι γνωστές στη βιβλιογραφία ως 1^η και 2^η σταθερά FN, αντίστοιχα ενώ όλες οι παραπάνω βοηθητικές συναρτήσεις της μεταβλητής y υπάρχουν σε εκτενείς πίνακες τιμών. Να σημειωθεί ότι για να προκύψει η ανωτέρω έκφραση των KX για το ρεύμα είναι αναγκαίοι αναλυτικοί χειρισμοί όπως π.χ. χρήση κατάλληλων αδιάστατων μεταβλητών για τροποποίηση του G, ασυμπτωτικό ανάπτυγμα για την προκύπτουσα τροποποιημένη έκφραση και ο κανόνας παραγωγίσης ολοκληρώματος με μεταβλητά όρια του Leibniz. Είναι επίσης σημαντικό να αναφέρουμε ότι στο όριο $\frac{\varphi}{eFR} \rightarrow 0$ (δηλαδή για «μεγάλα» R) το J_{KX} ανάγεται, όπως θα πρέπει ως γενίκευση, στο J_{MG} των Murphy και Good [37] το οποίο έχει κι αυτό μια έκφραση τύπου FN και αποτέλεσε μια βελτίωση επί της αρχικής θεωρίας των FN με ικανοποιητική εγκυρότητα για R>20nm.

Στο πιο κάτω σχήμα 34 αξιολογείται η εγκυρότητα της μεθόδου K-X συνολικά. Συγκεκριμένα, βλέπουμε διαγράμματα FN που αντιστοιχούν στο J_{KX} για διάφορες τιμές του R και για φ=4,5eV μαζί με τα αντίστοιχα ακριβή αποτελέσματα αριθμητικής επίλυσης με χρήση των φραγμάτων του σχ. 2 και της ολοκληρωτικής WKB έκφρασης. Η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε στο παράδειγμα αυτό είναι εκείνη ενός ελλειψοειδούς με εκκεντρότητα ε=0,99. Είναι άμεσα αντιληπτό ότι έχει επιτευχθεί άριστη συμφωνία για R>10nm ενώ η ακρίβεια της νέας μεθόδου είναι ικανοποιητική και στο εύρος τιμών 5nm<R<10nm. Για R<5nm το σφάλμα παίρνει μη ικανοποιητικές διαστάσεις, γεγονός που ήταν σημαντική κινητήριος δύναμη για ανάπτυξη μιας θεωρίας που να καλύπτει ακριβώς αυτό το κενό της βιβλιογραφίας και την οποία παρουσιάζουμε στη διατριβή αυτή.



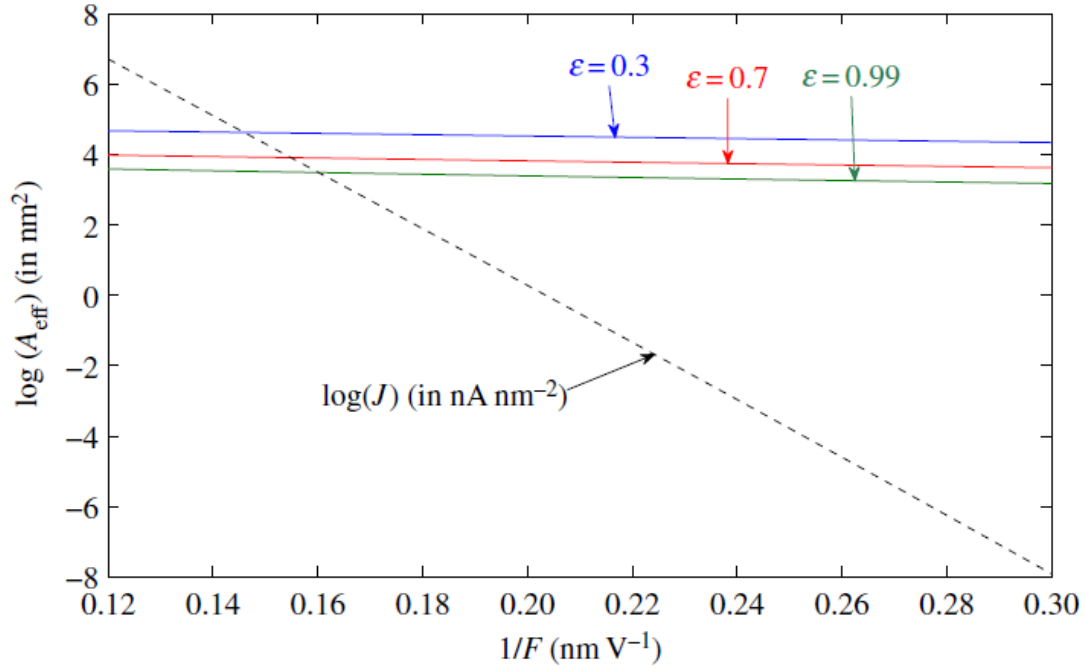
Σχήμα 2-34. Διαγράμματα FN που προκύπτουν από την πρόσφατη θεωρία των K-X.

Παρακάτω παρουσιάζεται η επιπλέον διασταύρωση της εγκυρότητας και χρησιμότητας της παρούσας γενικευμένης FN-θεωρίας μέσω σύγκρισης των θεωρητικών αποτελεσμάτων, που αυτή προβλέπει, με πειραματικά δεδομένα εργαστηριακών μετρήσεων αντίστοιχων μεγεθών. Πιο συγκεκριμένα, συμπεραίνονται μέσω επίσης εξίσωσης του J_{FN} οι τιμές των ακτίνων καμπυλότητας για επίσης ακίδες που έδωσαν δεδομένες πειραματικές μετρήσεις και συγκρίνονται οι τιμές αυτές με εικόνες SEM ή TEM των ίδιων ακίδων που μαρτυρούν την πραγματική τιμή επίσης ακτίνας επίσης και που είναι διαθέσιμες από επίσης πειραματικές ομάδες που διεξήγαγαν τα εν λόγω πειράματα.

Στα πειράματα πάντα η μετρούμενη ποσότητα είναι το ρεύμα η οποία συνδέεται με το ρεύμα πάνω στον άξονα επίσης ακίδας μέσω του ορισμού επίσης ενεργού επιφάνειας εκπομπής (effective emission area) [13,20]:

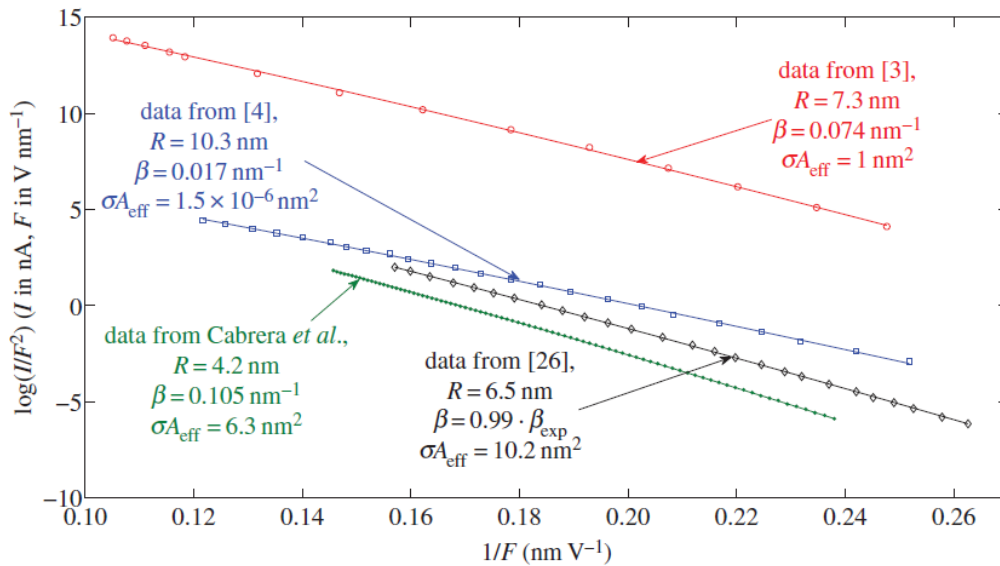
$$I = J_{KX} A_{eff}$$

Στο σχήμα 35 φαίνονται αποτελέσματα εκτενών αριθμητικών υπολογισμών που υποδηλώνουν ότι η ενεργός επιφάνεια είναι πρακτικά σταθερή -σχετικά πάντα με το ρυθμό μεταβολής επίσης πυκνότητας ρεύματος- σε όλο το εύρος τυπικών τιμών ηλεκτρικών πεδίων που χρησιμοποιούνται σε πειράματα πεδιακής εκπομπής. Αυτό σημαίνει ότι η ανάλυση επίσης διαγράμματος FN μπορεί να στηριχθεί αποκλειστικά στο J_{KX} το οποίο επίσης φαίνεται επίσης στο ίδιο σχ. 35.



Σχήμα 2-35. Ενεργός επιφάνεια εκπομπής. Αλλάζει πολύ αργά με το πεδίο.

Στο επόμενο σχήμα 36 παρουσιάζονται τα δεδομένα από τρεις διαφορετικές πειραματικές ομάδες [35, 43, 44] μαζί με τη θεωρητική προσαρμογή (fit) της εξίσωσης του J_{KX} . Η προσαρμογή αυτή είναι φανερά εξαιρετική χάρη στην εγκυρότητα της θεωρίας KX.



Σχήμα 2-36. Εφαρμογή της θεωρίας K-X σε πειραματικά δεδομένα.

Πιο λεπτομερής σύγκριση των δεδομένων και της θεωρίας [42] δείχνει ότι οι κλασικές παράμετροι που παραδοσιακά προσδιορίζονται από πειραματική ανάλυση FN γραφημάτων -όπως ο παράγοντας ενίσχυσης τοπικού πεδίου γ (ή ο συντελεστής

μετατροπής τάσης σε τοπικό πεδίο β καθώς και το γινόμενο του A_{eff} με το διορθωτικό παράγοντα ηλεκτρονικής παροχής του υλικού σ - μπορούν να βρεθούν με μεγαλύτερη ακρίβεια με χρήση της νέας θεωρίας απ' ό,τι με την παραδοσιακή εξίσωση FN. Ακόμη, η θεωρία KX επιτρέπει τον προσδιορισμό της ακτίνας του πειραματικού εκπομπού από τα εργαστηριακά δεδομένα.

2.7 Συμπεράσματα

Έχει καταγραφεί, λοιπόν, σε αρκετές μελέτες ότι η FN εξίσωση αποτυγχάνει να περιγράψει με αριθμητική (ή ακόμα και ποιοτική, σε ορισμένες περιστάσεις) ακρίβεια την εκπομπή ηλεκτρονίων, υπό την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου, από πολύ καμπύλους εκπομπούς. Κατ'αρχήν, από άποψη ηλεκτροστατικής, το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο στην αιχμή του εκπομπού, το οποίο είναι και υπεύθυνο για το φαινόμενο, έχει ενισχυμένη ένταση σε σχέση με το μακροσκοπικό (εκείνο δηλαδή που αναπτύσσεται στο χώρο μακριά από το εκπέμπον τμήμα της αγώγιμης επιφάνειας), το οποίο όμως είναι αυτό που εμφανίζεται στην FN έκφραση. Επομένως, η στοιχειώδης θεωρία συχνά δίνει πολύ χαμηλότερες τιμές εν σχέσει προς τις πειραματικώς μετρούμενες.

Από την άλλη μεριά, το μη τριγωνικό φράγμα οδηγεί σε μη γραμμική εξάρτηση της εκπεμπόμενης πυκνότητας ρεύματος (emitted current density) ECD από την ποσότητα $F^2 \exp(-1/F)$, γεγονός το οποίο προκαλεί καμπύλωση του FN γραφήματος, δηλαδή παύει αυτό να είναι ευθεία και αξιόπιστο εργαλείο για εξαγωγή τιμών για τις διάφορες άγνωστες παραμέτρους.

Για την αντιμετώπιση των μειονεκτημάτων αυτών της FN θεωρίας, υπάρχουν στη βιβλιογραφία οι εξής, εν γένει, τεχνικές: 1) ενσωμάτωση ενός παράγοντα ενίσχυσης του πεδίου, όπως αναφέρθηκε πιο πάνω, 2) η επέκταση της θεωρίας -εκτός του FN πνεύματος- σε μη επίπεδους εκπομπούς με βάση πολυδιάστατα μοντέλα σήραγγος, αντί για το μονοδιάστατο που είναι εγγενές στη FN θεωρία.

Ενώ, λοιπόν, η μέθοδος του συντελεστή ενίσχυσης της έντασης του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου για τη μελέτη μη επίπεδων εκπομπών έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς και έχει συμβάλει στο να μετριάσθαι το χάσμα ανάμεσα στα πειραματικώς μετρούμενα ρεύματα και τα πολύ χαμηλότερα, που προβλέπει η *standard* FN θεωρία, παρ'όλα αυτά, δε λύνει το πρόβλημα των μη-ευθύγραμμων FN γραφημάτων. Στην πραγματικότητα, ακόμη και ο συντελεστής ενίσχυσης εξαρτάται από το εφαρμοζόμενο πεδίο και τη γεωμετρία του συστήματος και, συνεπώς, η κλίση των FN διαγραμμάτων δεν είναι σταθερή [46,47]. Αυτή η «αποτυχία» της μεθόδου ενισχύεται επίσης από το γεγονός ότι το σχήμα του φράγματος εξαρτάται από το εφαρμοζόμενο πεδίο, την ακτίνα καμπυλότητας και την κατεύθυνση (γωνία) του κάθε άξονα εκπομπής σε σχέση με την κάθετο (0°) ή, αλλιώς, τον άξονα συμμετρίας.

Μέχρι τώρα, λοιπόν, κάθε μία από τις επεκτάσεις της FN θεωρίας φαίνεται ότι αντιμετωπίζει επιτυχώς μία μόνο κάθε φορά απόκλιση από τις αρχικές υποθέσεις (επίπεδος μεταλλικός αγωγός με μακροσκοπικό όγκο) της στοιχειώδους θεωρίας των Fowler και Nordheim και δεν υπάρχει ακόμη ένα ενοποιημένο μοντέλο που να

περιγράφει πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από αυθαίρετα μικρή ακτίνα καμπυλότητας. Αυτό που σίγουρα έχει παραμεληθεί ανάμεσα στα άλλα και που είναι απαραίτητο για τη μοντέρνα θεωρία είναι η ανάλυση των έντονων κβαντομηχανικών φαινομένων που συμβαίνουν στο *εσωτερικό* των σύγχρονων νανο-εκπομπών!

Αυτό επιχειρεί να πετύχει η παρούσα διατριβή με το αμέσως επόμενο «λογικό» βήμα προς την κατεύθυνση μιας πιο καθολικής θεωρίας: ένας υβριδικός συνδυασμός ακριβούς επίλυσης της εξίσωσης Schroedinger, για την εύρεση των ηλεκτρονιακών ιδιοκαταστάσεων της ακίδας, και κατάλληλης εφαρμογής μιας προσαρμοσμένης, στις απαιτήσεις του εγχειρήματος, τρισδιάστατης ημικλασικής θεωρίας ηλεκτρονικής σήραγγας.

Στην παρούσα εργασία, συνεπώς, παρουσιάζουμε μια πρωτότυπη, διαφορετική από τις παραπάνω, υβριδική, θα λέγαμε, τεχνική, η οποία περιλαμβάνει τρισδιάστατη θεώρηση του σύγχρονου προβλήματος, αναλυτική μελέτη των σχετικών φαινομένων, τόσο στο εσωτερικό της ακίδας όσο και στον εξωτερικό χώρο, και εξεύρεση των αντίστοιχων απαραίτητων μεγεθών.

2.8 Βιβλιογραφία κεφαλαίου

[1] D. Cocolocchio and M. Viggiano, "WKB approximation without divergencies," *Int. J. Theor. Phys.*, 1997

[2] Α. Κυριτσάκης. *Θεωρία ηλεκτρονικής μικροσκοπίας εγγύς πεδίου*. Διδακτορική διατριβή ΕΜΠ, 2014.

[3] Richard Phillips Feynman. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Reviews of Modern Physics*, 1948.

[4] ZH Huang, TE Feuchtwang, PH Cutler, and E Kazes. The Wentzel-Kramers-Brillouin method in multidimensional tunneling: Application to scanning tunneling microscopy. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 1990.

[5] Balaram Das and J Mahanty. Spatial distribution of tunnel current and application to scanning-tunneling microscopy: a semiclassical treatment. *Physical Review B*, 1987.

[6] Kyritsakis, JP Xanthakis, TL Kirk, and D Pescia. Lateral resolution of the NFESE microscopy and the existence of self focusing of electrons. In *Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC)*, 2011 24th International, pages 21-22. IEEE, 2011.

[7] Kyritsakis and JP Xanthakis. Beam spot diameter of the near-field scanning electron microscopy. *Ultramicroscopy*, 125:24-28, 2013.

[8] Kirk TL. *Near field emission scanning electron microscopy* in *Microscopy: Science, Technology, Applications and Education*, A. Méndez-Vilas and J. Díaz (Eds.), 2010.

- [9] Kirk TL. *Near field emission scanning electron microscopy*, Ph D thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich; 2010.
- [10] Jackson JD. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., New York; 1998.
- [11] Zuber JD, Jensen KL, Sullivan TE. An analytical solution for microtip field emission current and effective emission area, *J. Appl. Phys.* 2002; 91:9379-9384.
- [12] Sakurai T, Muller EW. Field Calibration Using the Energy Distribution of Field Ionization, *Phys. Rev. Lett.* 1973; 30:532-535 and Sakurai T, Muller EW. Field Calibration Using the Energy Distribution of Free-space Field Ionization, *J. Appl. Phys.* 1977; 48:2618-2625.
- [13] Eyring CF, Mackeown SS, Millikan RA. Fields currents from points, *Phys. Rev.* 1928; 31:900-909.
- [14] Mesa G, Saenz JJ, Garcia R. Current characteristics in near field emission scanning tunneling microscopes, *J. Vac. Sci. Technol. B* 1996; 14:2403-2406.
- [15] Kirk TL, Ramsperger U, Pescia D. Near field emission scanning electron microscopy, *J. Vac. Sci. Technol. B* 2009; 27:152-155.
- [16] Saenz JJ, Garcia R. Near field emission scanning tunneling microscopy, *Appl. Phys. Lett.* 1994; 65:3022-3024.
- [17] Kirk TL, De Pietro LG, Pescia D, Ramsperger U. Electron beam confinement and image contrast enhancement in near field emission scanning electron microscopy, *Ultramicroscopy* 2009; 109:463-466.
- [18] Kirk TL, Scholder O, De Pietro LG, Ramsperger U, Pescia D. Evidence of nonplanar field emission via secondary electron detection in near field emission scanning electron microscopy, *Appl. Phys. Lett.* 2009; 94:153502(1)-153502(3).
- [19] D.A.Zanin, H.Cabrera, L.G. De Pietro, M.Pikulski, M.Goldmann, D.A.Ramsperger, D.Pescia, John P. Xanthakis, *Advances in imaging and electron physics*, vol.170, Academic press, Elsevier, Amsterdam, 2012, pp. 227–257.
- [20] C.J.Edgcombe, Development of Fowler–Nordheim for a spherical field emitter, *Physical Review B* 73 (2005) 045420.
- [21] A. Kyritsakis, G.C. Kokkorakis, J.P. Xanthakis, T.L. Kirk, D. Pescia, Self focusing of field emitted electrons at an ellipsoidal tip, *Applied Physics Letters* 97 (2010) 023104.
- [22] S.C. Miller, R.H. Good, A WKB-type approximation to the Schroedinger equation, *Physical Review* 91 (1953) 174.

- [23] P.L. Kapur, R. Peierls, Penetration into potential barriers in several dimensions, Proceedings of the Royal Society of London Series A 163 (1937) 606.
- [24] R.G. Forbes, Use of energy-space diagrams in free-electron models of field electron emission, Surface and Interface Analysis 36 (2004) 395.
- [25] Cutler PH, He J, Miskovsky NM, Sullivan TE, Weiss B. 1993 Theory of electron emission in high fields from atomically sharp emitters: validity of the Fowler–Nordheim equation. *J. Vac. Sci. Technol. B* **11**, 387
- [26] GN Fursey and DV Glazanov. Deviations from the Fowler-Nordheim theory and peculiarities of _eld electron emission from small-scale objects. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena, 1998.
- [27] R, H. Good, Jr. and Erwin W. Muller, “Field Emission,” in Handbuch der Physik, edited by S. Flugge Springer, Berlin, 1956). Vol. XXI, p. 176.
- [28] C. A. Spindt, I. Brodie, L. Humphrey, and E. R. Westerberg. Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones. *J. Appl. Phys.* 47, 5248 (1976).
- [29] IEEE Trans. Electron Devices, Part II, Special Issue of Vacuum Microelectronic Devices, edited by H. E. Gray and C. A. Spindt (1989).
- [30] Proceedings 2nd International Conference on Vacuum Microelectronics, England. edited by R. E. Turner. British Institute of Physics (1989).
- [31] Hans-Werner Fink, Point source for ions and electrons. *Phys. Scripta.* 38, 260 (1988).
- [32] R, B. Marcus, T. S. Ravi, T. Gmitter, K. Chin, D. Liu. W. J. Orvis. D. R. Ciarlo, C. E. Hunt, and J. Trujillo, Formation of silicon tips with <1nm radius. *Appl. Phys. Lett.* 56, 236 (1990).
- [33] Jun He, P. H. Cutler, N. M. Miskovsky, T. E. Feuchtwang, T. E. Sullivan, and Moon Chung. Derivation of the image interaction for non-planar pointed emitter geometries: application to field emission I-V characteristics. *Surf. Sci.* 246, 348 (1991).
- [34] W.P. Dyke, W.W. Dolan. Field emission. *Adv. Electron. Electron Phys.* 8 (1956) 90
- [35] Cabrera H *et al.* 2013 Scale invariance of a diode-like tunnel junction. *Phys. Rev. B* **87**, 115436.
- [36] Kyritsakis A, Xanthakis JP, Pescia D. 2014 Scaling properties of a non-Fowler–Nordheim tunnelling junction. *Proc. R. Soc. A* **470**, 20130795

- [37] Murphy EL, Good RH. 1956 Thermionic emission, field emission, and the transition region. *Phys. Rev.* **102**, 1464–1473.
- [38] Forbes RG. 2003 Use of energy-space diagrams in free-electron models of field electron emission. *Surf. Interface Anal.* **36**, 395–401.
- [39] Xanthakis JP, Kokkorakis GC. 2007 Theoretical calculation of spatial variation of the transmission coefficient of closed carbon nanotubes. *Surf. Interface Anal.* **39**, 135–138.
- [40] Jensen KL. 2010 Space charge effects in field emission: three dimensional theory. *J. Appl. Phys.* **107**, 014905.
- [41] Jackson JD. 1999 *Classical electrodynamics*, 3rd edn. New York, NY: John Wiley and Sons.
- [42] Kyritsakis A, Xanthakis JP. 2015 Derivation of a generalized Fowler–Nordheim equation for nanoscopic field-emitters. *Proc. R. Soc. A* **471**: 20140811
- [43] Spindt C, Holland CE, Schwoebel PR. 2010 A reliable improved Spindt cathode design for high currents. *Proc. 2010 IVEC, Monterey, CA, 18–20 May*, pp. 201–202. New York, NY: IEEE.
- [44] Guerrero SA, Velásquez-García LF, Akinwande AI. 2012 Scaling of high-aspect-ratio current limiters for the individual ballasting of large arrays of field emitters. *IEEE Trans. Electron Devices* **59**, 2524–2530.
- [45] Sommerfeld A, Bethe H. 1933 In *Handbuch der Physik*, 24/2 (eds H Geiger, K Scheel), p. 333. Berlin, Germany: Springer.
- [46] Chatziafratis A and Xanthakis JP, “Field emission from a nanometric paraboloidal emitter”, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* (2019).
- [47] A. Chatziafratis and J.P. Xanthakis. 2020 “Correction factors for field emission from a nanoscopic emitter based on ab initio calculation of the electron eigenstates”. *Proceedings of the International Vacuum Nanoelectronics Conference 2020, IEEE Xplore Digital Library*

Don't you wonder sometimes, what might have happened if you tried

-Kazuo Ishiguro

*What indeed gives us the feeling of elegance in a solution is all that introduces order
and unity, all that permits us to see clearly and to comprehend at once both the
ensemble and the details*

-Henri Poincare

*A philosopher once said: "It is necessary for the very existence of science that the
same conditions always produce the same results".. Well, they don't!*

-Richard Feynman

3^ο Κεφάλαιο

Ηλεκτρονικές ιδιοκαταστάσεις νανοσκοπικών παραβολοειδών ακίδων

3.1 Εισαγωγή

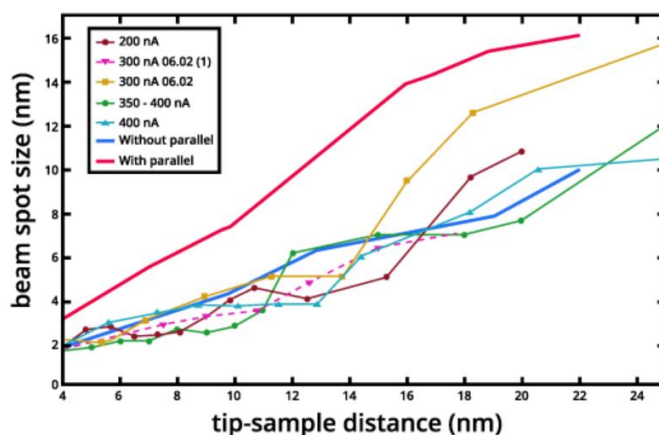
Το αντικείμενο της πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων από αιχμηρές νανομετρικές ακίδες έχει ιστορία τουλάχιστον 25 ετών. Ξεκίνησε από τον Cutler και τους συνεργάτες του [1] που έδειξαν ότι η θεωρία Fowler-Nordheim αποτυγχάνει για τέτοια μεγέθη εκπομπών παρατηρώντας ανάμεσα στα άλλα ότι το πειραματικά μετρούμενο ρεύμα μπορεί να είναι τάξεις μεγέθους διαφορετικό από αυτό που προβλέπει η στοιχειώδης, κατά βάση επίπεδη, θεωρία FN. Αυτή η απόκλιση είναι ακόμη πιο έντονη όταν η εκπομπή τελείται υπό συνθήκες κοντινού πεδίου (near-field mode) όπου η απόσταση μεταξύ ανόδου και καθόδου είναι μερικά νανόμετρα. Οι Saenz και Garcia [2] έχουν προσδιορίσει μαθηματικές εκφράσεις που αντιστοιχούν σε ακίδα υπερβολοειδούς σχήματος χρησιμοποιώντας αντίστοιχα το σφαιροειδές σύστημα συντεταγμένων (prolate spheroidal) αλλά οι εκφράσεις τους είναι έγκυρες μόνο στην περίπτωση όπου η άνοδος συμπίπτει με το εστιακό επίπεδο (focal plane) του υπερβολοειδούς που προσομοιώνει την εκπέμπουσα μεταλλική επιφάνεια. Ο Edgcombe και οι συνεργάτες του [3, 4] ανέλυσαν την ηλεκτρονική εκπομπή χρησιμοποιώντας το μοντέλο του ημισφαιρίου πάνω σε κωνικό ή κυλινδρικό στέλεχος (hemisphere on a post) και υπέδειξαν πως προσδιορίζεται σε αυτήν την περίπτωση το FN διάγραμμα το οποίο δεν είναι πλέον ευθεία γραμμή.

Ο Forbes [5] από την άλλη μεριά έχει προτείνει μια αναβαθμισμένη εκδοχή της FN εξίσωσης που βασίζεται σε φυσικά (φαινομενολογικά) επιχειρήματα ενώ ο Jensen [6] εισήγαγε τη μέθοδο του παράγοντα σχήματος (shape factor method) στην οποία ο όρος του ολοκληρώματος που αναπαριστά το φράγμα σήραγγος (tunneling barrier integral) εμφανίζεται ως συντελεστής στην εξίσωση του ρεύματος. Τέλος, οι Kyrtsakis και Xanthakis [7, 8] έχουν αποδείξει -ξεκινώντας από την αρχική WKB έκφραση- μια γενικευμένη FN-τύπου εξίσωση ρεύματος από εκπομπό με αυθαίρετο σχήμα και ακτίνα καμπυλότητας $R > 5\text{nm}$. Στην αναλυτική αυτή έκφραση, οι διορθώσεις επί της παραδοσιακής επίπεδης FN θεωρίας εμφανίζονται τόσο στον εκθετικό όρο Gamow όσο και στον προ-εκθετικό παράγοντα. Η ακρίβεια της εξίσωσης των Kyrtsakis-Xanthakis επιβεβαιώθηκε από εργαστηριακές μετρήσεις τριών ξεχωριστών πειραματικών ομάδων καθώς και από την πρόσφατη θεωρητική εργασία των Holgate και Coppins [9]. Επιπροσθέτως, από την καμπύλωση του διαγράμματος FN που προβλέπει η εξίσωσή τους μπορεί να προκύψει η τιμή του πειραματικού R , όπως ήταν δυνατό και με τη θεωρία των Edgcombe και Jonge [4] για λιγότερο αιχμηρές ακίδες.

Στις προαναφερθείσες μελέτες, η προσοχή επικεντρώθηκε ουσιαστικά στο συντελεστή διάδοσης στην WKB προσέγγιση δηλαδή στο σχηματισμό του φράγματος έξω από τον εκπομπό. Το ζήτημα της παροχής ηλεκτρονίων από το εσωτερικό του εκπομπού και οι επιπτώσεις του νανοσκοπικού μεγέθους είχαν εν πολλοίς αγνοηθεί. Υπάρχει περιορισμένος αριθμός δημοσιεύσεων [10, 11] που ασχολήθηκαν με αυτό το πρόβλημα αλλά μόνο σε σχήματα υψηλής συμμετρίας που απέχουν δραματικά από το τυπικό σχήμα των αιχμηρών ακίδων που είναι χαρακτηριστικό των περισσότερων εκπομπών. Στις περισσότερες εργασίες έγινε εμμέσως η παραδοχή ότι σε κάθε διαφορικό στοιχείο επιφάνειας ds πάνω στην επιφάνεια της ακίδας προσπίπτουν από το εσωτερικό του

μετάλλου τοπικά επίπεδα κύματα. Ωστόσο, είναι αμφίβολο το κατά πόσον αυτή η προσέγγιση είναι έγκυρη στο εύρος διαστάσεων $R \sim 1 - 5 \text{ nm}$. Τέτοιες τιμές R είναι εύκολα επιτεύξιμες στις μοντέρνες πειραματικές διατάξεις. Αν η παροχή ηλεκτρονίων δεν είναι σταθερή -όπως στην παραδοσιακή θεωρία FN- τα εξής δύο φαινόμενα είναι πιθανό να συμβούν: (α) μια εσωτερικά προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος που δεν είναι ομοιόμορφη ίσως αυξήσει ή μειώσει τη γωνία εκπομπής που συνήθως υπολογίζεται αποκλειστικά με βάση τη μεταβολή του συντελεστή διάδοσης με τη γωνία από τον άξονα συμμετρίας της ακίδας και (β) η ταχύτητα $v_{\parallel}$ η παράλληλη προς το εξωτερικό φράγμα δυναμικού, η οποία είναι καθοριστική παράμετρος για το σχηματισμό και το μέγεθος του ίχνους της ηλεκτρονικής δέσμης στην άνοδο, ενδέχεται να είναι πολύ διαφορετική από την καρτεσιανή έκφραση $hk_{\parallel}/4\pi m$ (τα σύμβολα έχουν την παραδοσιακή τους σημασία).

Ο τελευταίος αυτός παράγοντας είναι ιδιαίτερα σημαντικός στην περίπτωση εκπομπής σε συνθήκες κοντινού πεδίου και συνεπώς για το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο εγγύς πεδίου (NFESM) που πρόσφατα αναπτύχθηκε στο ETHZ [11, 12]. Πρόκειται για μικροσκόπιο που δε φέρει σύστημα ηλεκτρομαγνητικής εστίασης επομένως το εύρος του ίχνους της δέσμης καθορίζεται εξ ολοκλήρου από τις ιδιότητες της αιχμής της ακίδας και την απόστασή της d από την άνοδο. Σε προηγούμενη δημοσίευση [13], υπολογίστηκαν τα χαρακτηριστικά αυτά προσομοιώνοντας την κορυφή του εκπομπού μέσω ενός αιχμηρού ελλειψοειδούς και προσδιορίστηκε το εύρος της εκπεμπόμενης δέσμης ηλεκτρονίων στην άνοδο σε συνάρτηση της απόστασης d . Ο συντελεστής εκπομπής σε κάθε γωνία θ ως προς τον άξονα συμμετρίας υπολογίστηκε μέσω της τρισδιάστατης WKB μεθόδου. Τα ευρήματα (μπλε και κόκκινη γραμμή χωρίς κουκίδες) μαζί με τα πειραματικά δεδομένα (κουκίδες ενωμένες) της ομάδας στο ETH φαίνονται στο διάγραμμα 3-1.



Σχ. 3-1. Εύρος ίχνους δέσμης συναρτήσει της απόστασης ανόδου-καθόδου του μικροσκοπίου NFESM. Οι γραμμές με τις κουκίδες αντιστοιχούν σε πειραματικά δεδομένα ενώ οι συμπαγείς καμπύλες έχουν προκύψει από τρισδιάστατους αριθμητικούς υπολογισμούς αφενός χωρίς (μπλε) και αφετέρου με (κόκκινη) παράλληλη ταχύτητα όπως στο Gomer [16].

Σημειώνεται ότι στο διάγραμμα αυτό περισσότερα πειραματικά αποτελέσματα [15] και θεωρητικές τιμές έχουν συμπεριληφθεί. Τα θεωρητικά αποτελέσματα έχουν υπολογιστεί με βάση ακριβώς την ίδια διαδικασία που περιγράφεται στο [13]. Υπενθυμίζουμε στον αναγνώστη ότι -όπως σε προηγούμενες δημοσιεύσεις- μια

σταθερή παροχή ηλεκτρονίων (τύπου FN) έχει υποτεθεί και χρησιμοποιηθεί. Η χαμηλότερη συμπαγής γραμμή (χρώματος μπλε) αντιστοιχεί σε υπολογισμό των ηλεκτρονικών μονοπατιών με μηδενική παράλληλη ταχύτητα ηλεκτρονίων στην αιχμή της ακίδας: παρατηρούμε πολύ καλή συμφωνία με τις πειραματικές τιμές. Από την άλλη μεριά, αν περιληφθεί στους υπολογισμούς των τροχιών των ηλεκτρονίων και η κλασική αρχική παράλληλη ταχύτητα του FN πλαισίου που αναλύεται στο βιβλίο του Gomer [16] τότε το εύρος της δέσμης σχεδόν διπλασιάζεται (ανώτερη συμπαγής καμπύλη χρώματος κόκκινου) και η συμφωνία με το πείραμα γίνεται φτωχή. Η παραπάνω ταχύτητα βεβαίως αφορά επίπεδες εκπέμπουσες επιφάνειες ενώ στην περίπτωση ακίδων που χρησιμοποιούνται στο NFESM και την οποία θα μελετήσουμε οι ακτίνες καμπυλότητας είναι σαφώς κάτω από 5nm και άρα προφανώς πολύ δύσκολα μπορούν να θεωρηθούν επίπεδες.

Γίνεται λοιπόν σαφές ότι μια μοντέρνα θεωρία πεδιακής εκπομπής από νανομετρικές ακίδες που θα λαμβάνει υπόψιν το σχήμα της αιχμηρής επιφάνειας είναι απαραίτητη ώστε να αξιολογήσει εύστοχα τα χαρακτηριστικά της εκπεμπόμενης δέσμης. Μια τέτοια θεωρία πρέπει απαραίτητως να εκκινεί από τη μελέτη των ιδιοκαταστάσεων των ηλεκτρονίων μέσα στο μεταλλικό εκπομπό. Σε αυτό το κεφάλαιο, θα προσδιορίσουμε τις ιδιοκαταστάσεις αυτές και τις αντίστοιχες ηλεκτρονικές ροές (παράλληλη και εγκάρσια) ενός παραβολοειδούς εκπομπού. Από τη θεωρία μας [20] γίνεται ξεκάθαρο ότι η παράλληλη -προς το φράγμα- ηλεκτρονική ταχύτητα είναι μηδέν στην κορυφή της διάταξης και συνεπώς πράγματι η μπλε γραμμή δίνει μια ικανοποιητική ερμηνεία του πειράματος, δηλαδή της πραγματικότητας. Επιπλέον, δείχνουμε ότι σε πολύ χαμηλές τιμές του R ακραία κβαντικά φαινόμενα λαμβάνουν χώρα τόσο στις ιδιοτιμές όσο και στην προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος τα οποία, όπως αναμένεται, επηρεάζουν δραματικά την ηλεκτρονική εκπομπή. Πιο συγκεκριμένα, αντιμαχόμενα φαινόμενα παρατηρούνται καθώς το R συρρικνώνεται προς το 1nm: ενώ, κλασικά, το ενεργό τοπικό ηλεκτροστατικό πεδίο (σε σταθερή μακροσκοπική εφαρμοζόμενη τάση) αυξάνεται λόγω αιχμηρότητας, η παροχή ηλεκτρονίων -διαθέσιμων για εκπομπή- στην κορυφή της ακίδας μειώνεται, συνεπώς μια θεωρητικά βέλτιστη τιμή R ενδεχομένως υπάρχει, που θα σήμαινε ότι δεν έχει νόημα να επιδιώκουμε την κατασκευή ολοένα και αιχμηρότερων ακίδων πέραν κάποιου ορίου.

Το κεφάλαιο αυτό θέτει βεβαίως και τα θεμέλια για το επόμενο βήμα [21,22] που περιλαμβάνει το συντελεστή διέλευσης μέσα από τρισδιάστατα δυναμικά φράγματα για εκπομπούς με $R < 5$ nm. Για τις περιπτώσεις όπου $R > 5$ nm, οι υπάρχουσες θεωρίες είναι αρκετά ικανοποιητικές. Τέλος, κατά τη διάρκεια των ερευνών μας, βρήκαμε, ανάμεσα στα άλλα, ότι η προσεγγιστική WKB μέθοδος δίνει αποτελέσματα που αποκλίνουν από την ακριβή λύση όσον αφορά τον υπολογισμό των ιδιοκαταστάσεων του νανοεκπομπού. Σημειώνεται ότι η χρήση της μεθόδου αυτής για τέτοιους υπολογισμούς έχει πρόσφατα δημοσιευθεί [16]. Τα αποτελέσματα τα οποία θα δώσουμε εδώ είναι ακριβή και όχι προσεγγιστικά με την WKB ή άλλη έννοια.

3.2 Μεθοδολογία

Η πιο αντιπροσωπευτική, από φυσικής απόψεως, γεωμετρική μορφή ακίδων που χρησιμοποιούνται για πεδιακή εκπομπή είναι αυτή ενός παραβολοειδούς εκ

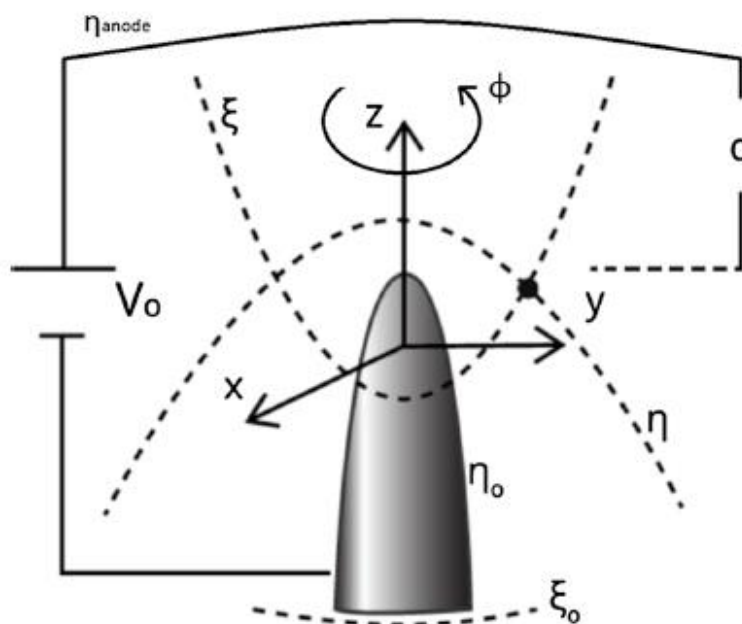
$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\eta\xi} \cos\varphi & (3.1a), \\ y &= \sqrt{\eta\xi} \sin\varphi & (3.1b), \\ z &= \frac{\eta-\xi}{2} & (3.1c) \end{aligned}$$

όπου $0 \leq \eta \leq \infty, 0 \leq \xi \leq \infty, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

$$y = \sqrt{\eta\xi} \sin\varphi \quad (3.1b),$$

$$Z = \frac{\eta - \xi}{2} \quad (3.1c)$$

όπου $0 \leq \eta \leq \infty, 0 \leq \xi \leq \infty, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$.



Σχ. 3-2. Μια τυπική διάταξη πεδιακής εκπομπής μαζί με τις παραβολικές συντεταγμένες αξιμουθιακής συμμετρίας που χρησιμοποιήθηκαν στην εργασία μας. Η καμπυλόγραμμη συντεταγμένη η_0 αναπαριστά την επιφάνεια του νανο-εκπομπού μας.

Προκειμένου να υπολογίσουμε την προσπίπτουσα -κάθετα- και την παράλληλη συνιστώσα της ηλεκτρονικής ροής, χρειάζεται να επιλύσουμε την εξίσωση του Schrodinger με την ακίδα ως ένα κλειστό κβαντικό κουτί (πηγάδι), με κυλινδρική συμμετρία, θέτοντας το δυναμικό ίσο με μηδέν στο εσωτερικό και το φράγμα άπειρο στο εξωτερικό. Δηλαδή σε αυτό το στάδιο δεν ασχολούμαστε ακόμα με κάποια άνοδο και δεν εφαρμόζουμε κάποια εξωτερική τάση. Να σημειώσουμε ότι, στο πλήρες ρεαλιστικό σύστημα, ένα εξωτερικά εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό πεδίο -το οποίο πάντα προσπίπτει κάθετα σε μεταλλική επιφάνεια- δύναται μόνο να αλλοιώσει την κάθετη προς το φράγμα ταχύτητα των ηλεκτρονίων, επομένως η παράλληλη ταχύτητα -που θα υπολογίσουμε παρακάτω- στο εσωτερικό της ακίδας θα είναι επίσης η πραγματική παράλληλη ταχύτητα κατά την έξοδο των ηλεκτρονίων από το φράγμα μόλις ολοκληρωθεί το φαινόμενο σήραγγας.

Για μια γενική συνάρτηση δυναμικού $V(\eta, \xi)$ με κυλινδρική συμμετρία (ανεξάρτητο της αζιμουθιακής γωνίας φ), η εξίσωση Schroedinger στο εν λόγω σύστημα συντεταγμένων γράφεται ως εξής:

$$\left\{ -\frac{4}{\eta + \xi} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \right] - \frac{1}{\eta \xi} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(\eta, \xi) \right\} \Psi = E \Psi \quad (3.2)$$

Στην αδιάστατη εξίσωση αυτή έχουμε διαιρέσει όλους τους όρους με $\hbar^2/2ma_0^2$, όπου όλα τα σύμβολα έχουν την κλασική τους έννοια. Δηλαδή η μονάδα ενέργειας στην (3.2) είναι το Rydberg και του μήκους η ακτίνα Bohr. Στα αποτελέσματα μας θα επανέλθουμε στις συνηθισμένες φυσικές μονάδες eV και nm, αντίστοιχα. Σημειώνεται ότι η (3.2) δεν είναι διαχωρίσιμη, εκτός αν η $V(\eta, \xi)$ πάρει συγκεκριμένες μορφές.

Ωστόσο, ιδιαιτέρως στην περίπτωση του κλειστού κβαντικού πηγαδιού η παραπάνω εξίσωση διαχωρίζεται με την αντικατάσταση

$$\Psi(\eta, \xi, \varphi) = B \Psi_\eta(\eta) \Psi_\xi(\xi) \Psi_\varphi(\varphi) \quad (3.3)$$

όπου B είναι σταθερά κανονικοποίησης. Τότε με χωρισμό μεταβλητών αρχικά παίρνουμε:

$$\Psi_\varphi'' + m^2 \Psi_\varphi = 0$$

και

$$-4 \frac{1}{\Psi_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \Psi_\eta - E\eta + \frac{m^2}{\eta} = 4 \frac{1}{\Psi_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \Psi_\xi + E\xi - \frac{m^2}{\xi} \equiv 4C$$

όπου C είναι πραγματική σταθερά διαχωρισμού.

Η τελευταία σχέση κατόπιν οδηγεί σε μονοδιάστατες συνήθεις διαφορικές εξισώσεις και έχουμε συνολικά:

$$\Psi_\eta'' + \frac{1}{\eta} \Psi_\eta' + \left[\frac{-m^2}{4\eta^2} + \frac{C}{\eta} + \frac{E}{4} \right] \Psi_\eta = 0 \quad (3.4a)$$

$$\Psi_\xi'' + \frac{1}{\xi} \Psi_\xi' + \left[\frac{-m^2}{4\xi^2} - \frac{C}{\xi} + \frac{E}{4} \right] \Psi_\xi = 0 \quad (3.4b)$$

$$\Psi_\varphi'' + m^2 \Psi_\varphi = 0 \quad (3.4c)$$

όπου m είναι ακέραιος, όπως θα δειχθεί. Από τις σχέσεις (3.4 a) ως (3.4 c) φαίνεται πως οι κβαντικοί αριθμοί του συστήματός μας είναι η τριάδα $(+C, -C, m)$ ως άμεση αντανάκλαση του γεγονότος ότι οι συντεταγμένες η και ξ είναι συμμετρικές. Από την (3.4 c) άμεσα προκύπτει

$$\Psi(\varphi) = A_0 e^{im\varphi} \quad (3.5)$$

Εξαιτίας της περιοδικότητας της κυματοσυνάρτησης Ψ ως προς φ , έχουμε ότι m πρέπει να είναι ακέραιος.

Οι εξισώσεις (3.4 a) και (3.4 b) μπορούν να μετατραπούν σε μια πιο οικεία μορφή με τις αλλαγές συναρτήσεων

$$\tilde{\Psi}_\eta = \sqrt{\eta} \Psi_\eta \quad \text{και} \quad \tilde{\Psi}_\xi = \sqrt{\xi} \Psi_\xi$$

Έτσι παίρνουμε

$$\tilde{\Psi}_\eta'' = -\left[\frac{1-m^2}{4\eta^2} + \frac{C}{\eta} + \frac{E}{4}\right] \tilde{\Psi}_\eta \quad (3.6a)$$

και

$$\tilde{\Psi}_\xi'' = -\left[\frac{1-m^2}{4\xi^2} - \frac{C}{\xi} + \frac{E}{4}\right] \tilde{\Psi}_\xi \quad (3.6b)$$

Οι εξισώσεις (3.6a) και (3.6b) είναι πλέον της γνωστής WKB μορφής $y'' + k^2 y = 0$ με τις ποσότητες

$$\kappa_\eta^2(\eta) = \frac{1-m^2}{4\eta^2} + \frac{C}{\eta} + \frac{E}{4} \quad (3.7a)$$

και

$$\kappa_\xi^2(\xi) = \frac{1-m^2}{4\xi^2} - \frac{C}{\xi} + \frac{E}{4} \quad (3.7b)$$

να παίζουν το ρόλο των κυματαριθμών (ή ορμών) στις αντίστοιχες κατευθύνσεις. Αν στις εξισώσεις (3.7a) και (3.7b) εφαρμοστεί -όπως είναι συνηθισμένο σε τέτοιου είδους προβλήματα- η WKB προσέγγιση τότε εσφαλμένες τιμές προκύπτουν για το C , γεγονός το οποίο θα σχολιαστεί λεπτομερώς στην επόμενη ενότητα. Με αυτό κατά νου, προχωρούμε να προσδιορίσουμε τις ακριβείς κυματοσυναρτήσεις χωρίς χρήση της μεθόδου αυτής.

Χρησιμοποιώντας επιπλέον τους μετασχηματισμούς ανεξάρτητων μεταβλητών

$$u = i\sqrt{E}\eta \quad (3.8a)$$

και

$$v = i\sqrt{E}\xi \quad (3.8b)$$

οι εξισώσεις (3.6a) και (3.6b) παίρνουν τη μορφή

$$\tilde{\Psi}_u''(u) + \left[\frac{1-m^2}{4u^2} - \frac{ic/\sqrt{E}}{u} - \frac{1}{4} \right] \tilde{\Psi}_u(u) = 0 \quad (3.9a)$$

και

$$\tilde{\Psi}_v''(v) + \left[\frac{1-m^2}{4v^2} + \frac{ic/\sqrt{E}}{v} - \frac{1}{4} \right] \tilde{\Psi}_v(v) = 0 \quad (3.9b)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις είναι στη μορφή της εξίσωσης Whittaker και οι λύσεις τους είναι οι ειδικές συναρτήσεις Whittaker πρώτου και δεύτερου είδους αντίστοιχα: $M_{-\frac{ic}{\sqrt{E}}, \frac{m}{2}}(u)$ και $W_{-\frac{ic}{\sqrt{E}}, \frac{m}{2}}(u)$. Με αντίστροφο μετασχηματισμό και επαναφορά στις αρχικές μεταβλητές, η γενική λύση για κάθε μία από τις (3.4a) και (3.4b), αντίστοιχα, είναι:

$$\Psi_\eta(\eta) = A_1 \frac{1}{\sqrt{\eta}} M_{-\frac{ic}{\sqrt{E}}, \frac{m}{2}}(i\sqrt{E}\eta) + A_2 \frac{1}{\sqrt{\eta}} W_{-\frac{ic}{\sqrt{E}}, \frac{m}{2}}(i\sqrt{E}\eta) \quad (3.10a)$$

και

$$\Psi_\xi(\xi) = A_3 \frac{1}{\sqrt{\xi}} M_{\frac{ic}{\sqrt{E}}, \frac{m}{2}}(i\sqrt{E}\xi) + A_4 \frac{1}{\sqrt{\xi}} W_{\frac{ic}{\sqrt{E}}, \frac{m}{2}}(i\sqrt{E}\xi) \quad (3.10b)$$

Πάνω στον άξονα του παραβολοειδούς έχουμε $\eta=0$ και $\xi=0$ τιμές για τις οποίες οι δεύτερου είδους λύσεις απειρίζονται [17], επομένως, πρέπει να απορριφθούν ($A_2 = A_4 = 0$) λόγω φυσικών απαιτήσεων επί της λύσης.

Αντιπροσωπευτικά γραφήματα των μονοδιάστατων λύσεων $|\Psi_\eta(\eta)|^2$ και $|\Psi_\xi(\xi)|^2$ για $m=0, 1, 2$ δίνονται στο σχήμα 3-3. Να σημειωθεί ότι μόνο η τιμή $m=0$ δίνει μη μηδενική τιμή στον άξονα συμμετρίας του εκπομπού. Η φυσική σημασία αυτού θα σχολιασθεί παρακάτω. Εδώ ολοκληρώνεται η ανάλυση των ιδιοκαταστάσεων του παραβολοειδούς. Ωστόσο θα αφιερώσουμε λίγο χώρο ακόμα για να εκφράσουμε τις λύσεις αυτές μέσω άλλων γνωστών ειδικών συναρτήσεων της μαθηματικής φυσικής ώστε να φανούν ξεκάθαρα τα πραγματικά και φανταστικά μέρη. Αυτό θα διευκολύνει παρακάτω και τους αριθμητικούς υπολογισμούς. Σύμφωνα με την ψηφιακή μαθηματική εγκυκλοπαίδεια NIST [17], οι συναρτήσεις Whittaker μπορούν να γραφούν με τη βοήθεια της υπεργεωμετρικής συνάρτησης (confluent hypergeometric function) ${}_1F_1(a, b, z)$ ως εξής:

$$\Psi_\eta(\eta) = \frac{1}{\sqrt{\eta}} e^{-i\sqrt{E}\eta/2} (i\sqrt{E}\eta)^{\frac{1+m}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1+m}{2} + \frac{iC}{\sqrt{E}}, 1+m, i\sqrt{E}\eta\right) \quad (3.11)$$

Μια παρόμοια έκφραση ισχύει αντίστοιχα και συμμετρικά για την ξ -συνιστώσα της λύσης. Η συγκεκριμένη μορφή των ορισμάτων των συναρτήσεων αυτών τις συσχετίζει άμεσα με τις λεγόμενες ειδικές συναρτήσεις Coulomb $F_L(\theta, x)$ σύμφωνα με τον τύπο:

$${}_1F_1(L+1-i\theta, 2L+2, 2ix) = \frac{e^{ix} F_L(\theta, x) x^{-L-1}}{K_L(\theta)}$$

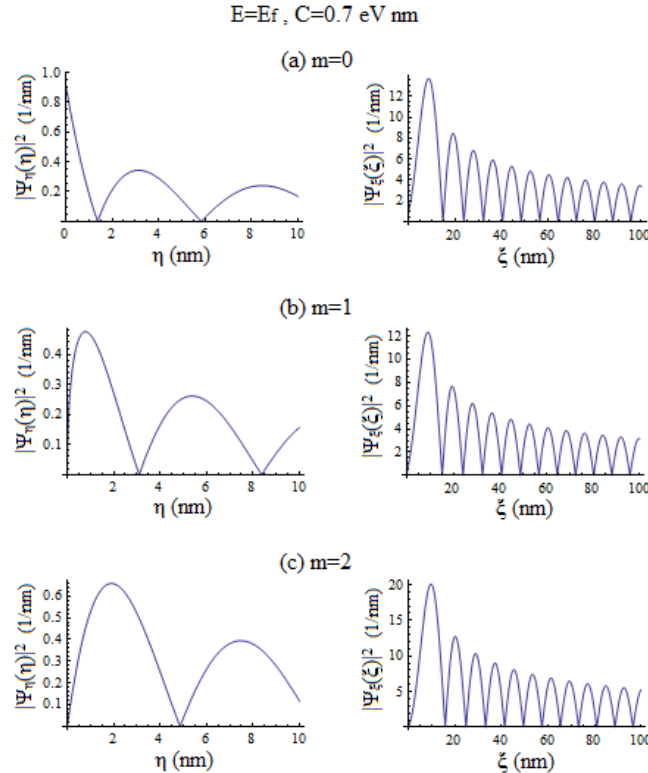
όπου $K_L(\theta)$ είναι συγκεκριμένοι συντελεστές [17] και

$$L \equiv \frac{m-1}{2}, \quad \theta \equiv \frac{-C}{\sqrt{E}}, \quad x \equiv \sqrt{E}\eta/2$$

Επομένως, τελικά έχουμε:

$$\Psi_{m,E,C}(\eta, \xi, \varphi) = B \left[\frac{1}{\sqrt{\eta}} (2i)^{\frac{1+m}{2}} \frac{F_{\frac{m-1}{2}}\left(-\frac{C}{\sqrt{E}}\frac{\sqrt{E}\eta}{2}\right)}{K_{\frac{m-1}{2}}\left(-\frac{C}{\sqrt{E}}\right)} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{\xi}} (2i)^{\frac{1+m}{2}} \frac{F_{\frac{m-1}{2}}\left(\frac{C}{\sqrt{E}}\frac{\sqrt{E}\xi}{2}\right)}{K_{\frac{m-1}{2}}\left(\frac{C}{\sqrt{E}}\right)} \right] e^{im\varphi} \quad (3.12)$$

Το πλεονέκτημα της (3.12) είναι ότι οι F_L και K_L είναι πραγματικές ποσότητες.



Σχ. 3-3. Τυπικά προφίλ των κυματοσυναρτήσεων τύπου Whittaker, που προκύπτουν από την ακριβή επίλυση της εξίσωσης Schroedinger για το υπό μελέτη σύστημα της μεταλλικής νανο-ακίδας, συναρτήσει της αντίστοιχης συντεταγμένης, για τις πρώτες τρεις τιμές του κύριου κβαντικού αριθμού $m=0, 1, 2$.

3.3 Αποτελέσματα

3.3.1 Προσδιορισμός κβαντικών αριθμών

Προτού ξεκινήσουμε την παρουσίαση των αποτελεσμάτων μας, είναι θεμιτό να τονισθεί η εξής διαφορά της παρούσας θεωρίας από τα γνωστά αποτελέσματα που σχετίζονται με την παραδοσιακή Καρτεσιανή θεωρία: στην τελευταία, οι κατευθύνσεις x, y, z είναι ανεξάρτητες η μία από την άλλη ενώ εδώ, δοσμένης της τιμής του m , η σταθερά C καθορίζει αμφότερες τις συνιστώσες η και ξ της κυματοσυνάρτησης. Η συνέπεια αυτού στο συγκεκριμένο πρόβλημα που μελετάμε είναι, με άλλα λόγια: Σε κάθε τιμή της προσπίπτουσας συνιστώσας της πυκνότητας ρεύματος, αντιστοιχεί μια άμεσα καθορισμένη παράλληλη συνιστώσα.

Μέχρι τώρα στην ανάλυσή μας υπάρχουν δυο άγνωστες παράμετροι: η ηλεκτρονική ενέργεια E και η σταθερά διαχωρισμού C . Αυτές μπορούν κατ'αρχήν να συναχθούν από τις δυο συνοριακές συνθήκες μας:

$$\Psi_{\eta}(\eta_0) = 0 \quad (3.13)$$

και

$$\Psi_{\xi}(\xi_0) = 0 \quad (3.14)$$

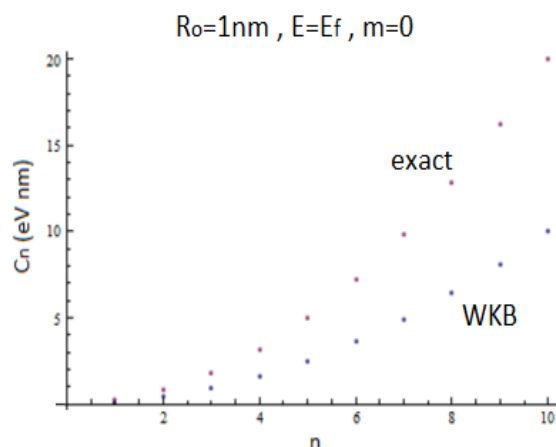
ή, ισοδύναμα,

$$F_{\frac{m-1}{2}}\left(-\frac{C}{\sqrt{E}}, \frac{\sqrt{E}\eta_0}{2}\right) = 0 \quad (3.15)$$

και

$$F_{\frac{m-1}{2}}\left(\frac{C}{\sqrt{E}}, \frac{\sqrt{E}\xi_0}{2}\right) = 0 \quad (3.16)$$

Οι παραπάνω συνθήκες συνιστούν, για κάθε m , ένα σύστημα δυο εξισώσεων με δυο αγνώστους. Οι εξισώσεις αυτές είναι προφανώς υπερβατικές γεγονός που καθιστά την αναλυτική τους μεταχείριση ανέφικτη. Ωστόσο, η ακόλουθη απλούστευση μπορεί να γίνει χωρίς απώλεια του φυσικού περιεχομένου: Αν $\xi_0 \rightarrow \infty$, δηλαδή αν υποθέσουμε ένα (σχεδόν) άπειρο σε ξ-έκταση παραβολοειδές, τότε οι ενεργειακές ιδιοτιμές E σχηματίζουν ένα σχεδόν συνεχές φάσμα (πάρα πολύ πυκνό σύνολο με τη φυσική έννοια) αντί για διακριτό. Υπό αυτήν την παραδοχή, το πρόβλημα εκπίπτει στο να βρεθεί, για κάθε τιμή E , η ακολουθία C_n που επιλύει (ικανοποιεί) την απαίτηση (3.13). Αυτή η προσέγγιση έχει υιοθετηθεί και στην εργασία [16]. Όμως, στην [16], η σχέση μεταξύ E και C αποκτήθηκε χρησιμοποιώντας τη WKB λύση για το κβαντικό πηγάδι και, κατ'επέκταση, την προσεγγιστική συνθήκη Bohr-Sommerfeld (με «μαλακό τείχος» για σύνορο) που τη συνοδεύει [11, 16, 18]. Έχουμε υπολογίσει τα C_n για δοθείσα E και αρκετά n με χρήση αφενός της ακριβούς σχέσης (3.13) και αφετέρου της WKB μεθόδου [18]. Τα αποτελέσματα παρατίθενται στο πιο κάτω σχήμα 3-4.



Σχ. 3-4. Τιμές της ακολουθίας σταθερών διαχωρισμού C_n -που προκύπτουν στη στάθμη Fermi και για $m=0$ - συναρτήσει του δεύτερου κβαντικού αριθμού n , υπολογισμένες αφενός βάσει της ακριβούς λύσης μας και αφετέρου μέσω της προσέγγισης WKB. Η τελευταία μέθοδος εισάγει σφάλμα που μεγαλώνει με την τιμή του δείκτη n .

Σε αυτούς τους υπολογισμούς, όπως και σε όλη την έκταση των γραφικών αποτελεσμάτων, έχουμε θεωρήσει την ενέργεια Fermi στα $E_F=10\text{eV}$, τιμή τυπική για ένα μέταλλο. Μπορούμε να δούμε ότι οι WKB τιμές γίνονται αναξιόπιστες καθώς ο δείκτης (κβαντικός αριθμός) n αυξάνει κι επομένως προκύπτουν αντίστοιχα εσφαλμένες WKB κυματοσυναρτήσεις. Δεν είναι σαφές εάν αυτή η απόκλιση από την ακριβή λύση οφείλεται στη WKB μέθοδο ή στη χρήση της συνοριακής συνθήκης «μαλακού τείχους» ή στο συνδυασμό αυτών. Η συνοριακή συνθήκη «μαλακού τείχους» απλώς αντικαθιστά την ποσότητα π^*n που εμφανίζεται στη δεξιά πλευρά του παραδοσιακού κανόνα κβαντοποίησης με την ποσότητα $\pi^*(n-1/2)$. Η προσέγγιση WKB πάσχει επίσης από ένα άλλο ελάττωμα που είναι ανεξάρτητο της συνοριακής συνθήκης «μαλακού τείχους»: δίνει πραγματικά εκθετικά (αντί για εκθετικά με φανταστικό όρισμα) που φθίνουν ως προς η και ξ κοντά στην αιχμή του μετάλλου, δηλαδή δεν προβλέπει διαδιδόμενα τρέχοντα κύματα σε όλη την έκταση της μεταλλικής ακίδας. Κάτι τέτοιο είναι προφανώς αλλόκοτο διότι ισοδυναμεί με «απαγορευμένη περιοχή» για ηλεκτρόνια σε κάποιο κομμάτι ενός μετάλλου! Αυτό το σφάλμα πιθανώς οφείλεται στο γεγονός ότι οι διαχωρισμένες μονοδιάστατες διαφορικές εξισώσεις περιέχουν όρους που, για πολύ μικρές τιμές της ακτίνας καμπυλότητας R , μεταβάλλονται πάρα πολύ γρήγορα ως προς τις αντίστοιχες μεταβλητές σε κάποιες περιοχές του πεδίου ορισμού. Έτσι παραβιάζεται η κλασική ποιοτική συνθήκη εγκυρότητας (validity condition) της μεθόδου.

3.3.2 Κάθετα προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος

Έχοντας προσδιορίσει τις ακριβείς κυματοσυναρτήσεις του συστήματος της αιχμηρής ακίδας, μπορούμε να προχωρήσουμε τώρα στον υπολογισμό της κάθετης και της παράλληλης συνιστώσας ηλεκτρονικής ροής στην εσωτερική επιφάνεια της ακίδας. Πρώτα όμως καλό είναι να διευκρινιστεί ότι το συνολικό ρεύμα πιθανότητας τόσο στην

η όσο και στην ξ κατεύθυνση είναι μηδέν διότι έχουμε να κάνουμε απλώς με ένα «κλειστό κβαντικό πηγάδι» (ακριβώς ανάλογα με το απλό, παιδαγωγικό μοντέλο του καρτεσιανού, ορθογώνιου παραλληλεπίπεδου κβαντικού κουτιού), συνεπώς τα προσπίπτοντα και τα ανακλώμενα κύματα πρέπει να αλληλοαναιρούνται. Σε αυτή τη λογική λοιπόν, πρέπει να αναλύσουμε (διασπάσουμε) την Ψ_η κυματοσυνάρτηση σε προσπίπτοντα και ανακλώμενα κομμάτια, δηλαδή:

$$\Psi_\eta = \Psi_\eta^+ - \Psi_\eta^-$$

όπου τα σύμβολα $+$ και $-$ παριστάνουν, αντίστοιχα, πρόσπτωση και ανάκλαση κυμάτων στην επιφάνεια ή, ισοδύναμα, διάδοση προς την κατεύθυνση αυξανόμενου και μειούμενου η , αντίστοιχα. Αυτό γίνεται γράφοντας:

$$\frac{1}{\sqrt{\eta}} F_{\frac{m-1}{2}} \left(-\frac{c_{m,n}}{\sqrt{E}}, \frac{\sqrt{E}\eta}{2} \right) = \frac{A_{m,n}^{max}}{2i} \exp(+iS_{m,n}(\eta)) - \frac{A_{m,n}^{max}}{2i} \exp(-iS_{m,n}(\eta)) \quad (3.17)$$

Τονίζεται ότι η παραπάνω διάσπαση σε προσπίπτοντα και ανακλώμενα κύματα είναι ακριβής κι όχι τύπου WKB προσέγγισης. Με άλλα λόγια, οι παράγοντες φάσης $S_{m,n}(\eta)$ θα υπολογιστούν ακριβώς με την απαίτηση η παραπάνω έκφραση (3.17) να ισχύει ακριβώς. Έτσι έχουμε:

$$S_{m,n}(\eta) = \arcsin \left(\frac{F_{\frac{m-1}{2}} \left(-\frac{c_{m,n}}{\sqrt{E}}, \frac{\sqrt{E}\eta}{2} \right)}{\sqrt{\eta} A_{m,n}^{max}} \right) \quad (3.18)$$

και

$$A_{m,n}^{max} \equiv \max \left(\frac{F_{\frac{m-1}{2}} \left(-\frac{c_{m,n}}{\sqrt{E}}, \frac{\sqrt{E}\eta}{2} \right)}{\sqrt{\eta}} \right) \quad (3.19)$$

Τότε

$$\Psi_\eta^+ = \frac{A_{m,n}^{max} (2i)^{\frac{1+m}{4}}}{2i K_{\frac{m-1}{2}} \left(-\frac{c_{m,n}}{\sqrt{E}} \right)} e^{+iS_{m,n}(\eta)} \quad (3.20)$$

Η προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος j_{m,n_η}^+ δίδεται από

$$j_{m,n_\eta}^+ = e\hbar/(2im_e) * [\Psi_+^* \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial \Psi_+}{\partial \eta} - \Psi_+ \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial \Psi_+^*}{\partial \eta}] \quad (3.21)$$

όπου $\Psi_+ \equiv \Psi_\eta^+ \Psi_\xi e^{im\varphi}$, $\hbar$ είναι η σταθερά του Plank και $h_\eta(\eta, \xi) = \frac{\sqrt{\eta+\xi}}{2\sqrt{\eta}}$ είναι ο αντίστοιχος παράγοντας κλίμακος των παραβολικών συντεταγμένων στην η κατεύθυνση. Η ποσότητα j_{m,n_η}^+ εύκολα προσδιορίζεται και ισούται με:

$$j_{m,n_\eta}^+(\xi) = e\hbar/(2im_e) * \frac{B_{m,n}^2 A_{m,n}^{max2} |\Psi_\xi|^2}{h_\eta(\eta_0, \xi) K_{m-1} \left(-\frac{C_{m,n}}{\sqrt{E}} \right)^2} \frac{dS_{m,n}}{d\eta}(\eta_0) \quad (3.22)$$

όπου οι συντελεστές κανονικοποίησης

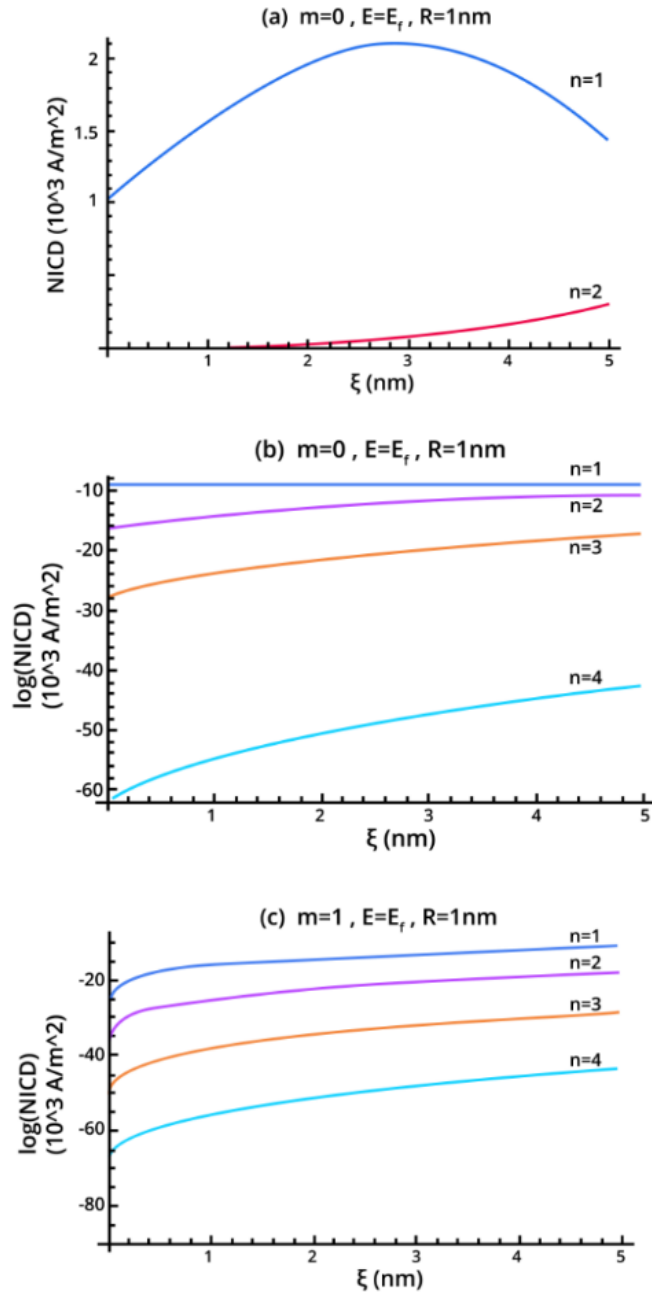
$$B_{m,n}^2 = \left(\iiint_{0,0,0}^{2\pi, \eta_0, \xi_0} |\Psi_\eta|^2 |\Psi_\xi|^2 h_\eta h_\xi h_\varphi d\eta d\xi d\varphi \right)^{-1}$$

$$= \frac{2}{\pi} \left(\iint_{0,0}^{\eta_0, \xi_0} |\Psi_\eta|^2 |\Psi_\xi|^2 (\eta + \xi) d\eta d\xi \right)^{-1}$$

υπολογίζονται αριθμητικά επιλέγοντας ένα κατάλληλα μεγάλο ξ_0 . Σημειώνεται ότι ο όρος $\frac{dS_{m,n}(\eta_0)}{h_\eta(\eta_0, \xi)}$ είναι ουσιαστικά η ταχύτητα κάθετης πρόσπτωσης ηλεκτρονίων κοντά στην κορυφή της ακίδας, ως συνάρτηση του ξ . Αυτή η ταχύτητα μειώνεται με αυξανόμενο ξ διότι ο παράγοντας κλίμακος αυξάνεται αντιστρόφως ανάλογα, αλλά το πλάτος της κυματοσυνάρτησης -το οποίο εμφανίζεται στην κάθετη συνιστώσα ηλεκτρονικής πυκνότητας- αυξάνεται, δίνοντας ένα συνολικό προφίλ αρχικής αύξησης της εν λόγω συνιστώσας, όπως φαίνεται στο σχήμα ...

Στο σχήμα 3-5(a-c) φαίνονται τα αποτελέσματά μας για την κάθετα προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος (normally incident current density NICD), δηλαδή την ποσότητα j_{m,n_η}^+ , ως συνάρτηση της συντεταγμένης ξ , για διάφορους κβαντικούς αριθμούς m και C_n . Φαίνεται καθαρά ότι μόνο ο όρος που αντιστοιχεί σε $m=0$ και $n=1$ είναι σημαντικός ενώ οι υπόλοιποι είναι τάξεις μεγέθους μικρότεροι και, συνεπώς, αμελητέοι. Αυτό προκύπτει ακόμα πιο ξεκάθαρα σε λογαριθμικής κλίμακος γράφημα των εν λόγω ποσοτήτων, δηλαδή στα ...b-c. Αυτή η δραστική πτώση του NICD με αυξανόμενο m μπορεί να ερμηνευθεί διαισθητικά σχετικά απλά: οι γραφικές παραστάσεις έχουν γίνει με σταθερή συνολική ενέργεια το οποίο σημαίνει ότι, όταν το m αυξάνει, παράλληλα αυξάνει και η φ-συνιστώσα της ενέργειας (λόγω αύξησης της στροφορμής των ηλεκτρονίων με το m) κι επομένως απομένει ολόένα και λιγότερη ενέργεια στην εγκάρσια (κάθετη στην επιφάνεια του μετάλλου) η-διεύθυνση.

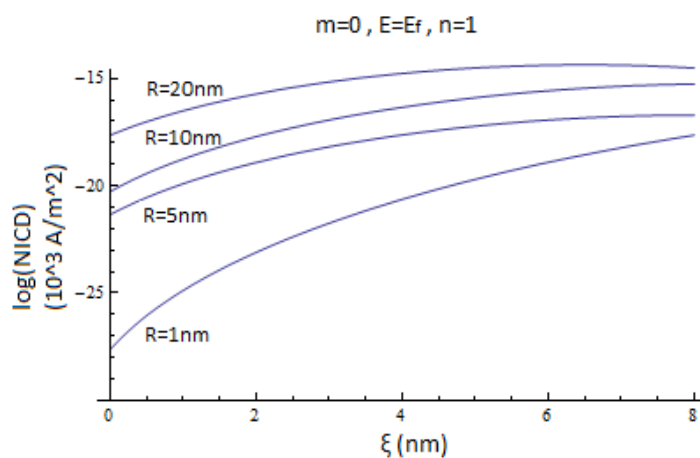
Σημειώνεται ότι η μεγιστοποίηση του NICD δε λαμβάνει χώρα στο $\xi=0$ αλλά σε κάποια μικρή γωνία ως προς τον άξονα συμμετρίας του συστήματος. Αυτό το φαινόμενο σχετίζεται με τη γεωμετρία του συστήματος, τις τιμές του R και έχει παρατηρηθεί και στην εργασία [16]. Ωστόσο, στο [16], το προσπίπτον ρεύμα στην αιχμή $\xi=0$ είναι μηδενικό για όλα τα m και n ενώ στους υπολογισμούς μας ο όρος $\{m=0, n=1\}$ δίνει μια μη μηδενική συνεισφορά στο σημείο ακριβώς της κορυφής της ακίδας. Αυτήν τη διαφορά στα αποτελέσματα την αποδίδουμε στη χρήση της WKB προσέγγισης σε συνδυασμό με τη συνοριακή συνθήκη «μαλακού τείχους» στο [16].



Σχ. 3-5 a-c. Η κάθετα προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος συναρτήσει του ξ πάνω στην εσωτερική επιφάνεια η_0 για $R=1\text{nm}$ και για διάφορες τιμές των κβαντικών αριθμών m και n , στη στάθμη Fermi. Σε λογαριθμική κλίμακα παρατηρούμε εύκολα ότι όλες οι ηλεκτρονικές ιδιοκαταστάσεις πέραν της $1^{\text{ης}}$ ($m=0, n=1$) έχουν αμελητέα συνεισφορά (διαφορά τάξεων μεγέθους).

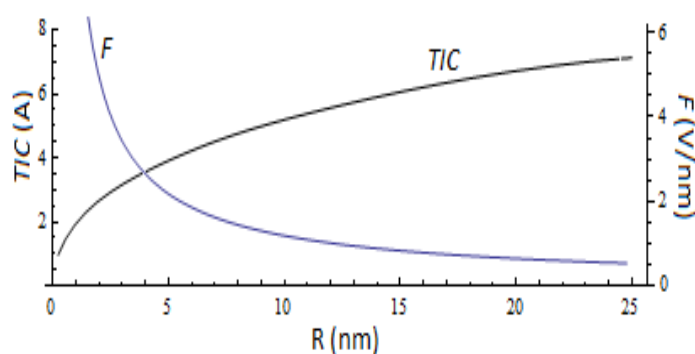
Είναι ενδιαφέρον να δούμε πως μεταβάλλεται το NICD κατά τη μετάβαση από μικρές τιμές του R μέχρι μια σχετικά επίπεδη επιφάνεια. Τέτοιου είδους υπολογισμοί έχουν νόημα μόνο αν γίνουν υπό σταθερό όγκο ακίδων καθώς η ακτίνα τους μεταβάλλεται, διότι ο συντελεστής κανονικοποίησης (που συνδέεται με τον εκάστοτε όγκο του κβαντικού συστήματος) υπεισέρχεται στο τελικό NICD. Στο σχήμα 3-6 δείχνουμε τον κυρίαρχο όρο $\text{NICD}_{m=0,n=1}(\xi)$ για διάφορες τιμές του R , φροντίζοντας κάθε φορά το ξ_0 να είναι τέτοιο ώστε ο όγκος του στερεού να είναι σταθερός. Η κλίμακα είναι

λογαριθμική επομένως παρατηρούμε αύξηση τάξεων μεγέθους με το R . Αυτό είναι απόρροια της τιμής της κυματοσυνάρτησης στην κορυφή της εκάστοτε ακίδας κι όχι της ηλεκτρονικής ταχύτητας στο σημείο αυτό.



Σχ. 3-6. Η κάθετα προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος συναρτήσει του ξ πάνω στην εσωτερική επιφάνεια η_0 για διάφορες τιμές της ακτίνας R της ακίδας και στην εκάστοτε θεμελιώδη ιδιοκατάσταση.

Το συνολικό προσπίπτον ρεύμα (ολοκλήρωμα του NICD) πάνω στην επιφάνεια της ακίδας, το οποίο συμβολίζουμε με TIC (total incident current), φαίνεται στο σχ. 3-7.



Σχ. 3-7. Μεταβολή της συνολικής προσπίπτουσας πυκνότητας ρεύματος αφενός με το τοπικά ενισχυμένο ηλεκτρικό πεδίο και αφετέρου με την ακτίνα της ακίδας, για σταθερή εξωτερικά εφαρμοζόμενη τάση. Παρατηρούμε αντιμαχόμενα φαινόμενα καθώς οι μοντέρνες ακίδες συρρικνώνονται.

Παρατηρούμε ότι προσεγγίζει έναν κορεσμό -όπως ήταν αναμενόμενο- διότι, καθώς το R αυξάνει, πλησιάζουμε τη «συνθήκη επίπεδης επιφάνειας». Αυτό φαίνεται ότι συμβαίνει περίπου στα $R=\eta_0=25\text{nm}$. Στο ίδιο γράφημα έχουμε περιλάβει τη μεταβολή με το R του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου που οφείλεται σε μια σταθερή εξωτερικά επιβαλλόμενη τάση. Παρατηρούμε αντιμαχόμενα φαινόμενα καθώς το μέγεθος της έντασης του πεδίου αυξάνεται μονοτονικά, αντίθεση με το ρεύμα, καθώς συρρικνώνεται το R . Επομένως, η αέναη ελάττωση των πειραματικών R δεν είναι απαραίτητως ωφέλιμη και ενδεχομένως υπάρχει μια βέλτιστη τιμή: καθώς το R μειώνεται, το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο F ενισχύεται αυξάνοντας κατ' επέκταση το

συντελεστή διάδοσης αλλά η παροχή ηλεκτρονίων ελαττώνεται. Αν η αύξηση του συντελεστή διέλευσης είναι αρκετά μεγαλύτερη από την πτώση της ηλεκτρονικής παροχής, τότε δεν υπάρχει βέλτιστο σημείο. Αν όμως η πτώση αυτή δεν αντισταθμιστεί αρκούντως από την ενίσχυση της πιθανότητας εκπομπής, τότε θα υπάρξει βέλτιστη τιμή R.

3.3.3 Παράλληλη προς το φράγμα ταχύτητα

Εντελώς ανάλογα, μπορούμε να προσδιορίσουμε τα παραπάνω μεγέθη που αντιστοιχούν στην κατεύθυνση ξ . Συγκεκριμένα:

$$\psi_{\xi}^{+} = \frac{A_{m,n}^{max} (2i)^{\frac{1+m}{4}}}{2i K_{\frac{m-1}{2}} \left(\frac{C_{m,n}}{\sqrt{E}} \right)} e^{+i S_{m,n}(\xi)}$$

όπου

$$S_{m,n}(\xi) = \arcsin \left(\frac{F_{\frac{m-1}{2}} \left(\frac{C_{m,n}}{\sqrt{E}}, \frac{\sqrt{E}\xi}{2} \right)}{\sqrt{\xi} A_{m,n}^{max}} \right)$$

και

$$A_{m,n}^{max} \equiv \max \left(\frac{F_{\frac{m-1}{2}} \left(\frac{C_{m,n}}{\sqrt{E}}, \frac{\sqrt{E}\xi}{2} \right)}{\sqrt{\xi}} \right)$$

Τότε

$$j_{m,n\xi}^{+} = e\hbar/(2im_e) * \frac{B_{m,n}^2 A_{m,n}^{max2} |\Psi_{\eta}|^2}{h_{\xi}(\eta_0, \xi) K_{\frac{m-1}{2}} \left(-\frac{C_{m,n}}{\sqrt{E}} \right)^2} \frac{dS_{m,n}}{d\xi}$$

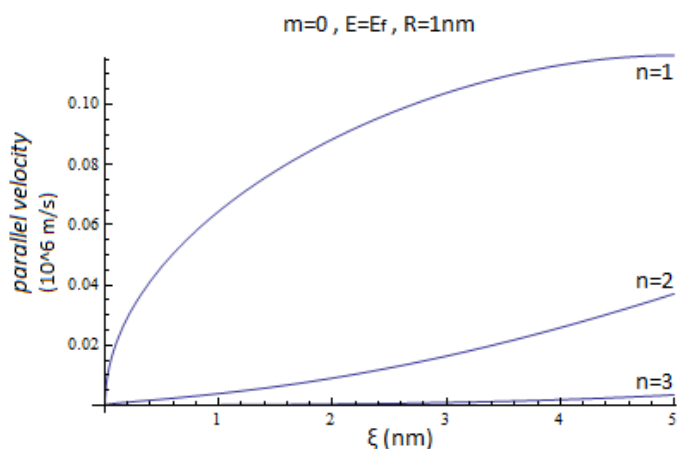
όπου

$$h_{\xi}(\eta, \xi) = \frac{\sqrt{\eta + \xi}}{2\sqrt{\xi}}$$

Πάλι -όπως και με την ανάλυση που κάναμε για την η συνιστώσα- η ποσότητα $\frac{dS_{m,n}}{d\xi}(\eta_0)/h_{\xi}(\eta_0, \xi)$ είναι η εφαπτομενική ταχύτητα πάνω στη μεταλλική επιφάνεια η_0 .

Ο παράγοντας h_{ξ} στον παρονομαστή κάνει την ταχύτητα αυτή να μηδενίζεται καθώς η συντεταγμένη ξ τείνει στο 0, δηλαδή στην κορυφή της επιφάνειας η_0 , όπως φαίνεται στο σχήμα 3-8. Όταν εφαρμοστεί ένα ηλεκτρικό πεδίο επί της ακίδας και ηλεκτρόνια αρχίσουν να εκπέμπονται μέσω του φράγματος δυναμικού, η εν λόγω παράλληλη ταχύτητα θα διατηρείται διότι το ηλεκτροστατικό πεδίο προσπίπτει κάθετα στη μεταλλική επιφάνεια. Επομένως η εφαπτομενική ταχύτητα κατά την έξοδο από το μέταλλο θα δίδεται από την παραπάνω σχέση και θα είναι σημαντικά μικρότερη από την αντίστοιχη τιμή του Gomer [14] που παραδοσιακά έχει χρησιμοποιηθεί για τέτοιου

είδους υπολογισμούς στη βιβλιογραφία και αντιστοιχεί στην πάνω συμπαγή καμπύλη στο σχήμα 3-1. Συνεπώς, η κάτω συμπαγής γραμμή στο ίδιο σχήμα αποτελεί πράγματι μια «έγκυρη» προσομοίωση και ερμηνεία των πειραματικών δεδομένων του ερευνητικού γκρουπ του ΕΤΗ.



Σχ. 3-8. Παράλληλη προς το φράγμα ηλεκτρονική ταχύτητα $v_{||}$ καθώς απομακρυνόμαστε από τον άξονα συμμετρίας $\xi=0$, για την κυρίαρχη ιδιοτιμή $m=0$ και τους τρεις πρώτους κβαντικούς δείκτες $n=1, 2, 3$ στη στάθμη Fermi. Βλέπουμε ότι η ταχύτητα αυτή είναι ακριβώς μηδενική στην αιχμή της ακίδας ανεξαρτήτως κβαντικής κατάστασης. Η μονάδα ταχύτητας ηλεκτρονίων είναι 10^6 m/s που αντιστοιχεί περίπου σε ηλεκτρονική ενέργεια της τάξης των 3 eV (ultralow).

Αυτό το σημείο απαιτεί περαιτέρω σχολιασμό: τόσο η ανάλυσή μας όσο και εκείνη στο κλασικό εγχειρίδιο του Gomer [14] χρησιμοποιούν το μοντέλο του Sommerfeld στο οποίο ένα σταθερό δυναμικό υποτίθεται μέσα στον όγκο του εκπομπού. Τα πραγματικά μέταλλα βεβαίως αποτελούνται από άτομα, όπως το βολφράμιο (tungsten, W), και έχουν κρυσταλλικό δυναμικό στο εσωτερικό τους που με τη σειρά του «υποστηρίζει» τις καταστάσεις Bloch των ηλεκτρονίων. Κάθε τέτοια κατάσταση δίνει μια κάθετη και μια εφαπτομενική συνιστώσα ταχύτητας οι οποίες είναι κατ'αρχήν διαφορετικές από το μοντέλο «άδειου πλέγματος» (empty lattice model). Επομένως, με ποια έννοια μπορούμε να μιλάμε για σύγκριση με πραγματικά πειράματα έχοντας ένα απλό μοντέλο. Η απάντηση βασίζεται στο γεγονός ότι -στα πλαίσια της θεωρίας «ενεργού μάζας» (effective mass theory)- αυτό που έχουμε υπολογίσει είναι οι περιβάλλουσες συναρτήσεις (envelop functions) των πραγματικών κυματοσυναρτήσεων. Οι περιβάλλουσες αυτές καθορίζονται από τη γεωμετρία του συστήματος και τα κβαντικά φαινόμενα που οφείλονται στη διαστατικότητα (dimensionality). Συμπερασματικά, η «έλλειψη» χώρου» στην περιοχή της αιχμής της ακίδας επιβάλλει τους περιορισμούς της σε εκείνο που οι Bloch καταστάσεις θα έδιναν αν αναφερόμασταν σε εκτενή (σχεδόν) επίπεδα (με μικρή καμπυλότητα) επιφάνεια.

3.4 Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό [20] κατορθώσαμε να προσδιορίσουμε ακριβώς τις ιδιοκαταστάσεις ενός επιμήκους αλλά νανομετρικού -στην κορυφή του- εκπομπού

παραβολοειδούς σχήματος, ο οποίος περιβάλλεται από ένα άπειρο δυναμικό «τείχος». Για πολύ μικρές ακτίνες καμπυλότητας ($R \sim 1 - 4 \text{ nm}$) ακραία φαινόμενα κβαντοποίησης λαμβάνουν χώρα όσον αφορά τις κατευθύνσεις (συντεταγμένες) ϕ και η , ενώ ένα (σχεδόν) συνεχές φάσμα λαμβάνεται στην τρίτη συνιστώσα ξ . Με βάση τις ιδιοκαταστάσεις αυτές υπολογίσαμε την προσπίπτουσα (κάθετα στην επιφάνεια) και την παράλληλη συνιστώσα της ροής ηλεκτρονίων. Αφενός, όσον αφορά την πρώτη, μόνο ένας κβαντικός όρος -σε κάθε ενεργειακό επίπεδο γύρω από τη στάθμη Fermi- συνεισφέρει σημαντικά ενώ, αφετέρου, η παράλληλη ταχύτητα των ηλεκτρονίων τείνει στο μηδέν στην κορυφή της ακίδας. Το τελευταίο αυτό αποτέλεσμα έχει βοηθήσει στην εξήγηση των πειραματικών αποτελεσμάτων με πραγματικούς εκπομπούς σε εργαστηριακό περιβάλλον αναφορικά με το εύρος ίχνους ηλεκτρονικής δέσμης (ισοδύναμα, με την ανάλυση ή διακριτική ικανότητα) στο SEM εγγύς πεδίου. Τέλος, αντιμαχόμενα φαινόμενα ανάμεσα στην ένταση της προσπίπτουσας -εσωτερικά- δέσμης και του τοπικά ενισχυμένου πεδίου παρατηρήθηκαν καθώς η ακτίνα αιχμηρότητας R μειώνεται από τα 25 μέχρι το 1 nm, που συνεπάγεται ότι πιθανώς υπάρχει κάποια βέλτιστη περιοχή τιμών για πειράματα πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων.

3.5 Αναφορές Κεφαλαίου

- [1] Cutler PH, He J, Miskovsky NM, Sullivan TE, Weiss B. 1993 Theory of electron emission in high fields from atomically sharp emitters: validity of the Fowler–Nordheim equation. *J. Vac. Sci. Technol. B*. **11**, 387–391.
- [2] Saenz JJ, Garcia R. 1994 Near field emission scanning tunneling microscopy. *Appl. Phys. Lett.* **65** (23), 5, 3022-3024
- [3] Edgcombe CJ. 2005 Development of Fowler–Nordheim theory for a spherical field emitter. *Phys. Rev. B* **72**, 045420.
- [4] Edgcombe CJ, de Jonge NJ. 2007 Deduction of work function of carbon nanotube field emitter by use of curved-surface theory. *J. Phys. D* **40**, 4123–4128.
- [5] Forbes RG. 2012 Extraction of emission parameters for large-area field emitters, using a technically complete Fowler–Nordheim-type equation. *Nanotechnology*, **23**, 095706
- [6] Jensen KL. 2012 A quantum dipole–modified work function for a simplified electron emission barrier *J. Appl. Phys.* **111**, 054916
- [7] Kyritsakis A, Xanthakis JP. 2015 Derivation of a generalized Fowler–Nordheim equation for nanoscopic field-emitters. *Proc. R. Soc. A* **471**: 20140811.
- [8] Kyritsakis A, Xanthakis JP. 2016 Extension of the general thermal field equation for nanosized emitters. *J. Appl. Phys.* **119**, 045303

- [9] Holgate JT and Coppins M. 2017. Field-Induced and Thermal Electron Currents from Earthed Spherical Emitters *Phys Rev Appl* 7, 044019
- [10] Zestanakis P and Xanthakis JP, 2008 Field emission from open multiwall carbon nanotubes: A case of non-Fowler–Nordheim behavior. *J. Appl. Phys.* **104**, 094312
- [11] Paterson AA, Akinwande AI. 2013 Elementary framework for cold field emission: Incorporation of quantum-confinement effects *J. Appl. Phys.* **114**, 234303
- [12] Zanin DA, Cabrera H, De Pietro LG, Pikulski M, Goldmann M, Ramsperger U, Pescia D, Xanthakis JP. 2012 Fundamental aspects of near-field emission scanning electron microscopy. *Advances in Imaging and Electron Physics.* **170**, 227–258.
- [13] Cabrera H et al. 2013 Scale invariance of a diode-like tunnel junction. *Phys. Rev. B* **87**, 115436.
- [14] Kyritsakis A, Xanthakis JP. 2013 Beam spot diameter of the near-field scanning electron microscopy. *Ultramicroscopy* **125**, 24–28.
- [15] Zanin DA , De Pietro LG, Cabrera H, Kostanyan A, Vindigni A, Pescia D and Ramsperger U. 2014 Improving the topografiner technology down to nanometer spatial resolution *Proc. 27th IVNC, Switzerland*
- [16] Gomer R, 1993 Field Emission and Field Ionization, *American Institute of Physics*, ch.2.
- [17] Patterson AA, Akinwande AI. 2016 Cold field emission from a low-dimensional paraboloidal tip, *Proc. 29th International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC)*
- [18] *Digital Library of Mathematical Functions* of NIST, Confluent Hypergeometric Functions (ch.13) and Coulomb Functions (ch.33)
- [19] Hagelstein PL, Senturia SD and Orlando TP, 2004 Introductory Applied Quantum and Statistical Mechanics, *John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ*, p. 702, 259.
- [20] Chatziafratis A, Fikioris G and Xanthakis JP. 2018 Exact eigenstates of a nanometric paraboloidal emitter. *Proceedings of the Royal Society A* **474**.
- [21] Chatziafratis A and Xanthakis JP, “Field emission from a nanometric paraboloidal emitter”, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* (2019).
- [22] Chatziafratis A and Xanthakis JP. 2020 “Correction factors for field emission from a nanoscopic emitter based on ab initio calculation of the electron eigenstates”. *Proceedings of the International Vacuum Nanoelectronics Conference 2020, IEEE*

Never discourage anyone who continually makes progress, no matter how slow

-Plato

*In art, as in science, reductionism does not trivialize our perception - of color, light,
and perspective - but allows us to see each of these components in a new way*

-Eric Kandel

*In an honest search for knowledge, you quite often have to abide by ignorance for an
indefinite period*

-Erwin Schroedinger

4^ο Κεφάλαιο

Πεδιακή εκπομπή ηλεκτρονίων από πολύ αιχμηρές μεταλλικές ακίδες

4.1 Αποτελέσματα της σύγχρονης θεωρίας εκπομπής

4.1.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο αναλύσαμε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων ενός νανοσκοπικού παραβολοειδούς εκπομπού με ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή του $R < 5 \text{ nm}$ [1]. Οι υπολογισμοί έγιναν μέσα στα πλαίσια του μοντέλου Sommerfeld. Υπάρχουν κι άλλες επιστημονικές μελέτες [2-6] που βασίζονται στο μοντέλο αυτό αλλά όλες υποθέτουν μια σταθερή παροχή ηλεκτρονίων, εσωτερικά του μετάλλου -όπως υποδεικνύει η αρχική θεωρία των Fowler και Nordheim [7] της δεκαετίας 1930s-, τα οποία είναι διαθέσιμα για πιθανή εκπομπή μέσα από το δυναμικό φράγμα υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου. Σκοπός του προηγούμενου κεφαλαίου [1], λοιπόν, ήταν να εξεταστεί η εγκυρότητα της υπόθεσης αυτής δεδομένου ότι οι ακίδες εκπομπής ηλεκτρονίων της σύγχρονης τεχνολογίας είναι σαφώς κάτω από το όριο των 5 nm. Πολύ έντονα φαινόμενα κβαντικής διακριτοποίησης βρέθηκαν: οι ιδιοτιμές σε τέτοια επίπεδα αιχμηρότητας σχηματίζουν ένα συνεχές φάσμα μόνο ως προς τη μία καμπυλόγραμμη συντεταγμένη ενώ μια ακολουθία ιδιοτιμών αναδύεται σε κάθε μία από τις άλλες δυο κατευθύνσεις. Κατά συνέπεια, η προσπίπτουσα πυκνότητα ρεύματος ακολουθεί ένα αντίστοιχο μοτίβο διακριτοποίησης με μόνο το πρώτο ζεύγος κβαντικών αριθμών να συνεισφέρει σημαντικά στην τιμή της.

Στο κεφάλαιο αυτό, θα υπολογίσουμε την εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος από ένα τέτοιο νανο-εκπομπό με πολύ μικρό R , με σκοπό να επιτύχουμε καλύτερη σύνδεση με το πείραμα και την πραγματικότητα των εξαιρετικά αιχμηρών ακίδων. Αξίζει να υπενθυμίσουμε ότι, όταν γίνεται σύγκριση θεωρητικών ευρημάτων με το πείραμα, η ποσότητα που αντιπροσωπεύει τη «συνάρτηση παροχής» ηλεκτρονίων (electron supply function) δε συμφωνεί με την παραδοσιακή σταθερή τιμή του μοντέλου Fowler-Nordheim εξαιτίας τόσο των ιδιόμορφων Bloch κυματοσυναρτήσεων, που στην περίπτωση μας απέχουν έντονα από επίπεδα κύματα, όσο και της ενεργού μάζας ηλεκτρονίων, η οποία διαφέρει από τη μάζα κενού. Σημειώνεται ότι η κλίση του διαγράμματος FN δίνει πληροφορίες για το φράγμα δυναμικού ενώ η τομή με τον κατακόρυφο άξονα συνδέεται με το γινόμενο της συνάρτησης παροχής και της επιφάνειας εκπομπής (στα πειράματα μετριέται το ρεύμα κι όχι η πυκνότητα ρεύματος). Υπολογισμοί αυτού του γινομένου έχουν δοθεί στο [5]. Υποθέτοντας μια ενεργό περιοχή εκπομπής που αντιστοιχεί σε στερεά γωνία περίπου 30 μοιρών, η διόρθωση στη συνάρτηση παροχής υπολογίζεται να είναι ένας παράγοντας μεταξύ 1 και 10 για μεταλλικούς εκπομπούς, όμως για ημιαγώγιμες ακίδες ο παράγοντας αυτός είναι δραματικά μικρότερος από 10^{-6} έως 10^{-7} . Ωστόσο, δεν είναι σαφές εάν αυτή η διαφοροποίηση περιλαμβάνει -ή όχι- μη παρατηρημένα -έως τώρα- φαινόμενα που οφείλονται στη γεωμετρία και τις ακραία χαμηλές διαστάσεις. Επιπλέον, η γωνία εκπομπής -ποσότητα ιδιαίτερα σημαντική για τη μικροσκοπία και τη λιθογραφία- αναμένεται να επηρεαστεί έντονα από μια παροχή ηλεκτρονίων που είναι μεταβλητή ως προς τη γωνία αντί να είναι σταθερή όπως στη θεωρία FN.

Τέλος, κατά τη διάρκεια των ερευνών μας, εξετάσαμε την επίδραση του είδους του δυναμικού ειδώλου. Συνήθως χρησιμοποιείται το σφαιρικό δυναμικό [2,5] σε τέτοιους υπολογισμούς, αλλά έχει χρησιμοποιηθεί και το είδωλο που αντιστοιχεί σε σφαιροειδή εκπομπό [3,4]. Με βάση το σχήμα του δικού μας εκπομπού, είναι απαραίτητο -εδώ- να χρησιμοποιήσουμε το παραβολοειδές είδωλο. Όταν αυτό το είδος ειδώλου χρησιμοποιηθεί στους υπολογισμούς μας, αξιόλογες αποκλίσεις παρατηρούνται σε σχέση με την περίπτωση χρήσης του παραδοσιακού σφαιρικού.

4.1.2 Μέθοδος

Έχοντας κατά νου τα αποτελέσματα της ανάλυσης που κάναμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, μπορούμε προχωρήσουμε τώρα στον υπολογισμό της εκπεμπόμενης πυκνότητας ρεύματος. Αυτή ουσιαστικά είναι το γινόμενο της προσπίπτουσας πυκνότητας NICD και του συντελεστή διάδοσης. Η ανάλυση του προηγούμενου κεφαλαίου υπέθετε ένα άπειρο δυναμικό τείχος έξω από την επιφάνεια της ακίδας, αλλά στην πραγματικότητα το ύψος του φράγματος που «αντιλαμβάνονται» τα ηλεκτρόνια του μετάλλου είναι μόνο μερικά eV σε ύψος και, ως αποτέλεσμα της εφαρμογής ενός εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, το ρεύμα που εξέρχεται της ακίδας είναι μη μηδενικό. Παρ'όλα αυτά, τα αποτελέσματα του 3^{ου} κεφαλαίου είναι σχετικά με το παρόν πρόβλημα που εξετάζουμε διότι το εξωτερικό πεδίο δεν αλλοιώνει ουσιαστικά την NICD καθώς τα ηλεκτρικά πεδία δεν εισέρχονται στα μέταλλα όταν εφαρμόζονται από απόσταση.

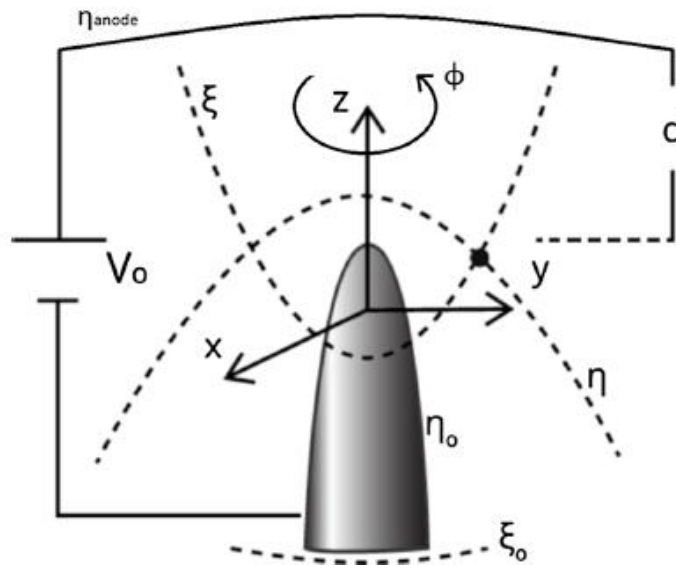
Για τους σκοπούς μας, λοιπόν, υποθέτουμε ότι ένα ηλεκτροστατικό πεδίο $V_{\text{applied}}(\eta)$ εφαρμόζεται σε μια άνοδο αρκετά «μακριά» -για τα νανομετρικά μεγέθη- ώστε να ταυτίζεται με μια η-επιφάνεια του συστήματος συντεταγμένων μας, έστω η_{anode} , όπως φαίνεται στο σχήμα 4-1. Δεδομένου ότι στο πρόβλημά μας η ακτίνα καμπυλότητας R είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με το εύρος της περιοχής σήραγγος, δεν είναι θεμιτό να υποθέσουμε ότι τα ηλεκτρονικά μονοπάτια μέσα στην απαγορευμένη αυτή περιοχή είναι ευθύγραμμα. Αντ'αυτού πρέπει να χρησιμοποιηθεί μια γενικευμένη τρισδιάστατη WKB μέθοδος [9,10], η οποία θα είναι κατάλληλη να διαχειριστεί ικανοποιητικά προσπίπτοντα κύματα που δεν είναι επίπεδα αλλά ακριβώς της μορφής των συναρτήσεων Whittaker, όπως περιγράψαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Εκεί, αποφανθήκαμε ότι μόνον ο πρώτος κβαντικός όρος $\{m=0, n=1\}$ σε κάθε κατειλημμένο ενεργειακό επίπεδο E γύρω από τη στάθμη Fermi του μετάλλου έχει αξιόλογη συνεισφορά στο ρεύμα εκπομπής. Έτσι μπορούμε να γράψουμε για την εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος σε κάθε σημείο ξ της επιφάνειας της ακίδας:

$$J_{\text{trans}}(\xi) = \sum_E j_{m=0,n=1}^{\text{inc}}(E, \xi) * T(E, \xi) \quad (4.1)$$

όπου η πιθανότητα διάδοσης μέσω του φράγματος δίδεται για κάθε E και ξ από:

$$T(E, \xi) = \exp \left(-2 \int_{\eta_1}^{\eta_2} \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} (V(\eta) - E)} * h_\eta(\eta, \xi) d\eta \right) \quad (4.2)$$

με τα η_1 και η_2 να είναι η αρχή και το τέλος της περιοχής όπου λαμβάνει χώρα το φαινόμενο σήραγγος και όλα τα σύμβολα να έχουν τη συμβατική τους φυσική σημασία. Η ολοκλήρωση στην (4.2) γίνεται κατά μήκος των διαδρομών που ακολουθούν τα ηλεκτρόνια κατά την διάδοσή τους μέσα από το φράγμα, οι οποίες -σύμφωνα με τη θεωρία που αναπτύσσεται στις εργασίες [9,10]- είναι, εν γένει, καμπυλόγραμμες, κάθετες στις επιφάνειες η_1 και η_2 (δηλαδή εισέρχονται και εξέρχονται στην περιοχή του φράγματος κάθετα στα σύνορά του) και αντιπροσωπεύουν τα μονοπάτια ελαχίστης «δράσης» (least action paths) και μέγιστης πιθανότητας σε σχέση με οποιαδήποτε άλλη εναλλακτική. Στην περίπτωση μας, η ολοκλήρωση γίνεται κατά μήκος των ξ συντεταγμένων που είναι πράγματι κάθετες στις η επιφάνειες του ορθογώνιου συστήματός μας. Αυτή η προσέγγιση έχει επιλεγθεί και υλοποιηθεί και από τους Jensen et al. [4].



Σχ. 4-1. Μια τυπική διάταξη πεδιακής εκπομπής μαζί με τις παραβολικές συντεταγμένες αξιμουθιακής συμμετρίας που χρησιμοποιήθηκαν στην εργασία μας. Η καμπυλόγραμμη συντεταγμένη η_0 αναπαριστά την επιφάνεια του νανο-εκπομπού μας ενώ η άνοδος ταυτίζεται με την επιφάνεια η_{anode} του συστήματος συντεταγμένων.

Για το φράγμα δυναμικού $V(\eta)$ έχουμε συνολικά:

$$V(\eta) = E_F + W_f - eV_{applied}(\eta) + U_{im}(\eta) \quad (4.3)$$

όπου E_F είναι η στάθμη Fermi των ηλεκτρονίων του μετάλλου, W_f είναι το έργο εξόδου (work function) του υλικού της ακίδας και U_{im} είναι η δυναμική ενέργεια που οφείλεται στο ειδώλου που αντιστοιχεί στην παραβολοειδή επιφάνεια του εκπομπού. Η τελευταία αυτή ποσότητα προσδιορίστηκε με κατάλληλη ηλεκτροστατική ανάλυση από τους Cutler et al. [8] και πάνω στον άξονα συμμετρίας της ακίδας ($\xi=0$) είναι συνάρτηση του η που ισούται με:

$$U_{im}(\eta) = -q_e^2 \int_0^\infty \frac{I_0(k\sqrt{\eta_0})K_0(k\sqrt{\eta})}{K_0(k\sqrt{\eta_0})} K_0(k\sqrt{\eta}) k dk \quad (4.4)$$

όπου I_0 και K_0 είναι οι «τροποποιημένες» (modified) συναρτήσεις Bessel 1^{ου} και 2^{ου} είδους, αντίστοιχα. Μπορούμε να απλοποιήσουμε κάπως αυτήν την έκφραση αν παρατηρήσουμε ότι μέσα στην περιοχή του φράγματος -η οποία και είναι ακριβώς εκείνη που μας ενδιαφέρει στο πρόβλημα υπολογισμού της πιθανότητας διείσδυσης και, συνακόλουθα, του ρεύματος εκπομπής- ισχύει $\eta \approx \eta_0$, επομένως:

$$U_{im}(\eta) \approx -q_e^2 \int_0^\infty I_0(k\sqrt{\eta_0})K_0(k\sqrt{\eta})kdk \quad (4.5)$$

Εφαρμόζοντας τη σχέση 10.43.27 της NIST και την ισότητα $I_0(x\sqrt{\eta_0}) = J_0(ix\sqrt{\eta_0})$ [13] στη σχέση (4.5), τελικά προκύπτει η έκφραση:

$$U_{im}(\eta) \approx \frac{-q_e^2}{\eta - \eta_0} \quad (4.6)$$

για το παραβολικό δυναμικό ειδώλου μέσα στην περιοχή όπου συμβαίνει το φαινόμενο σήραγγος και συντελείται, ουσιαστικά, η εκπομπή ηλεκτρονίων. Το τρισδιάστατο δυναμικό, που αναπτύσσεται στο χώρο εξωτερικά της ακίδας λόγω της εφαρμοζόμενης τάσης, προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης Laplace και ισούται με:

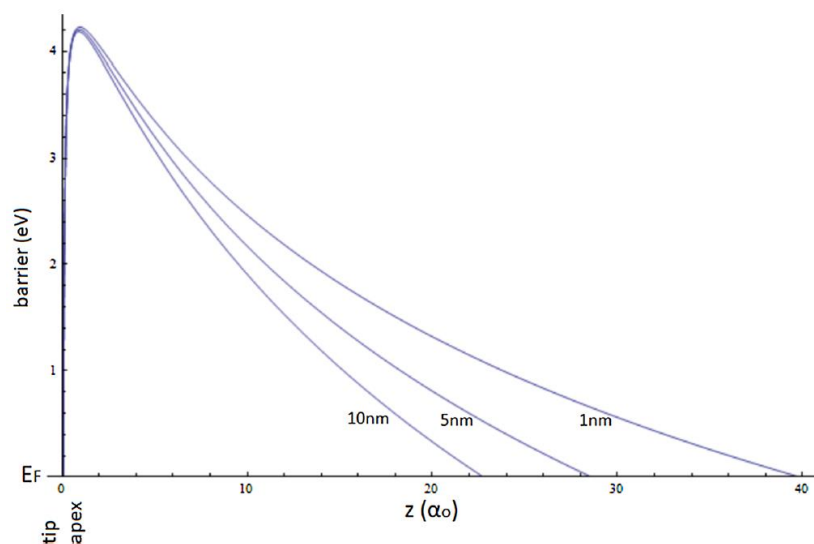
$$V_{applied}(\eta) = 2V_{anode} \log \left(\frac{\frac{\eta}{R}}{1 + \frac{2d}{R}} \right) \quad (4.7)$$

Να σημειωθεί ότι το δυναμικό πρέπει να πολλαπλασιαστεί με το στοιχειώδες φορτίο του ηλεκτρονίου για να δώσει ηλεκτρική δυναμική ενέργεια.

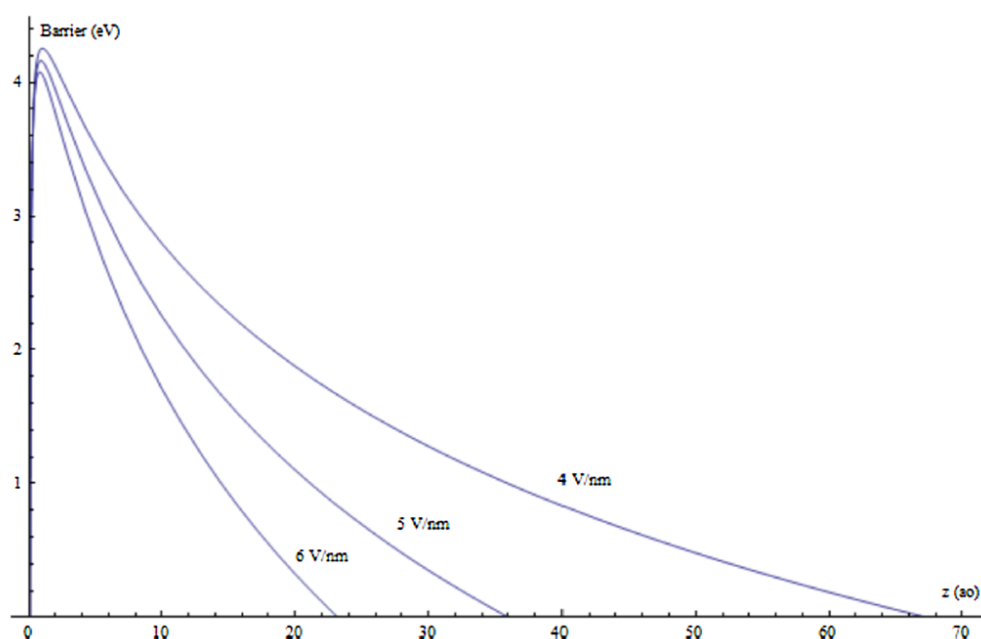
4.1.3 Αποτελέσματα

Αρχικά, στο σχήμα 4-2 παρουσιάζουμε το προφίλ των φραγμάτων δυναμικού κατά τη διεύθυνση του άξονα συμμετρίας της ακίδας, για μερικές χαρακτηριστικές τιμές της ακτίνας R και υπό σταθερό τοπικά ενισχυμένο ηλεκτρικό πεδίο, δηλαδή υπό κατάλληλα μεταβλητή εξωτερικά εφαρμοζόμενη τάση. Όπως είπαμε και νωρίτερα, στους υπολογισμούς έχει χρησιμοποιηθεί το δυναμικό ειδώλου που αντιστοιχεί ακριβώς στη γεωμετρία μας. Από το σχήμα παρατηρούμε ότι, καθώς η παράμετρος R μικραίνει, το εύρος του φράγματος αυξάνεται. Αυτή η συμπεριφορά έχει παρατηρηθεί επίσης στην εργασία [5] και αποδόθηκε στον όρο 2^{ης} τάξης του αναπτύγματος Taylor της λύσης της εξίσωσης Laplace, που είχε περιληφθεί στους υπολογισμούς εκεί, και ο οποίος όρος γίνεται όλο και σημαντικότερος καθώς το R μειώνεται. Αυτή η παρατηρούμενη μεταβολή του φράγματος με την εκάστοτε αιχμηρότητα είναι που οδηγεί στην «ιεραρχία» των καμπυλών FN, που θα δούμε παρακάτω, καθώς -ποιοτικά- ευρύτερο φράγμα συνεπάγεται χαμηλότερη πιθανότητα διέλευσης ηλεκτρονίων μέσα από αυτό και, συνεπώς, μικρότερο εκπεμπόμενο ρεύμα.

Στο σχήμα 4-3 παρουσιάζεται η συρρίκνωση του φράγματος που βλέπουν τα ηλεκτρόνια μιας ακίδας με $R=1\text{nm}$ καθώς η ένταση του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου αυξάνει παίρνοντας μια σειρά από τυπικές τιμές.



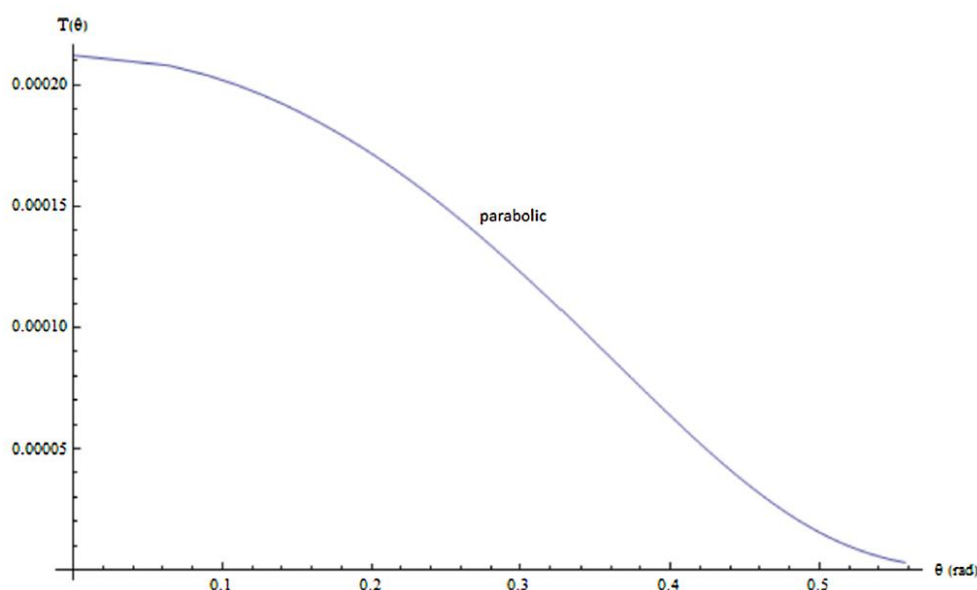
Σχ. 4-2. Το προφίλ των φραγμάτων δυναμικού κατά μήκος του άξονα συμμετρίας συναρτήσει της απόστασης από την κορυφή του εκπομπού, για διάφορες τιμές της ακτίνας καμπυλότητας R και υπό τυπικό ηλεκτρικό πεδίο $F=5\text{V/nm}$ (μεταβλητή εξωτερική τάση). Καθώς το R συρρικνώνεται, το φράγμα διευρύνεται. Οι αποστάσεις μετρούνται σε πολλαπλάσια της ακτίνας Bohr



Σχ. 4-3. Το προφίλ των φραγμάτων δυναμικού κατά μήκος του άξονα συμμετρίας συναρτήσει της απόστασης από την κορυφή του εκπομπού, για $R=1\text{nm}$ και για διάφορες τιμές του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου F . Καθώς αυτό αυξάνει, το φράγμα συρρικνώνεται.

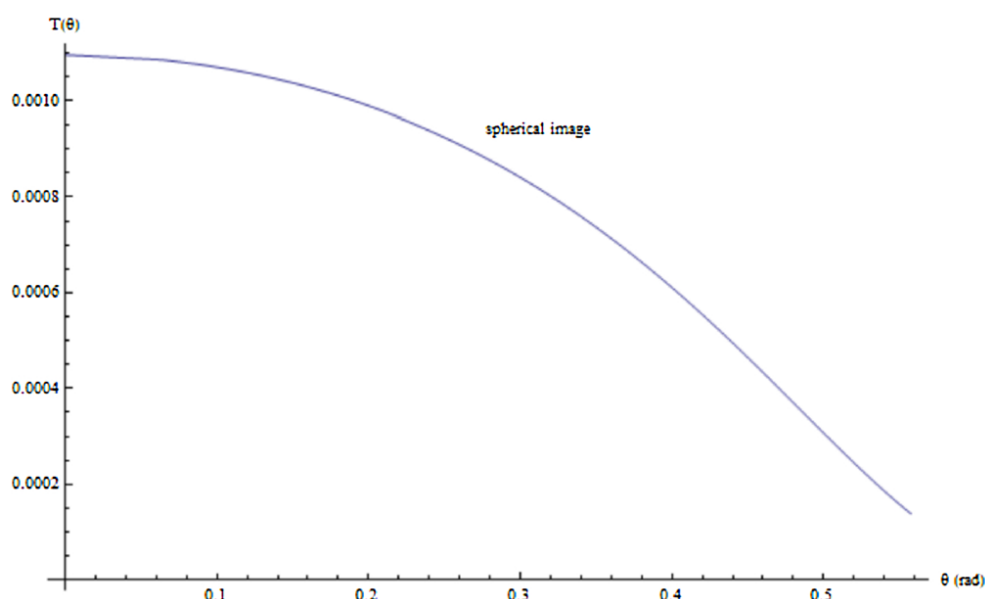
Η γωνιακή εξάρτηση του συντελεστή διάδοσης για $R=1\text{ nm}$ και $F=5\text{ V/nm}$ φαίνεται στο σχήμα 4-4. Για διευκόλυνση ο οριζόντιος άξονας παριστάνει τη γωνία θ ως προς τον κατακόρυφο άξονα της ακίδας $\xi=0$. Πάλι, εδώ, έχει χρησιμοποιηθεί το παραβολικό εικονικό δυναμικό. Σε σύγκριση με το συνηθισμένο μοντέλο του ημισφαιρίου σε στέλεχος (hemisphere on a post) [11], η γωνιακή μεταβολή του συντελεστή εκπομπής

$T(\theta)$ είναι πρακτικά περίπου η ίδια: είναι φθίνουσα συνάρτηση και πέφτει σχεδόν στο μισό της μέγιστης τιμής του σε μια γωνία περίπου 0.3-0.35 rad.



Σχ. 4-4. Γωνιακή εξάρτηση του συντελεστή διάδοσης για $R=1\text{nm}$ και $F=5\text{V/nm}$, με χρήση του παραβολικού δυναμικού ειδώλου.

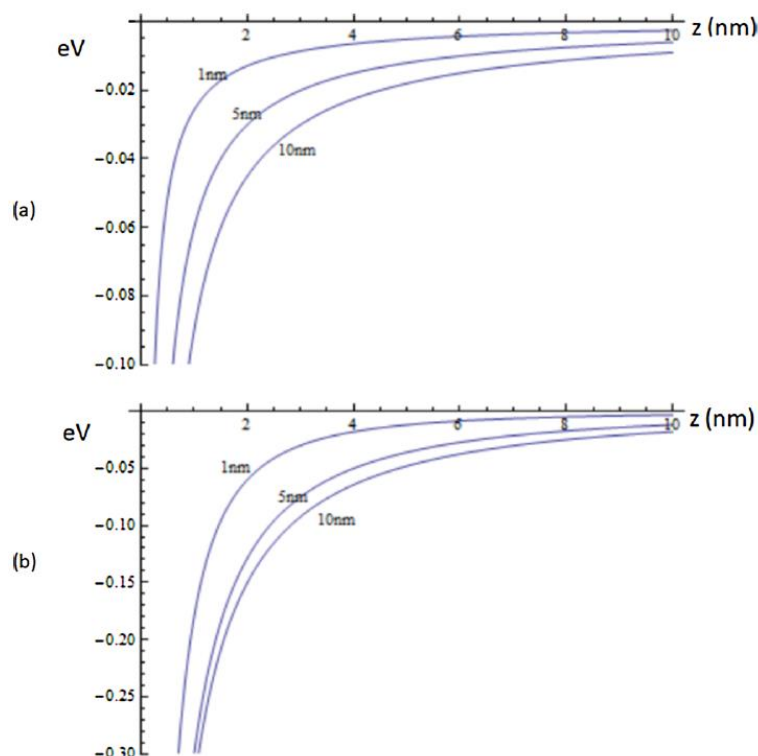
Στο σχήμα 4-5 φαίνεται πάλι ο συντελεστής διάδοσης για τη γεωμετρία του συστήματός μας αλλά αυτή τη φορά χρησιμοποιήσαμε το παραδοσιακό σφαιρικό είδωλο (δηλαδή το εικονικό δυναμικό που αντιστοιχεί σε μια σφαιρική μεταλλική επιφάνεια, σαν να είχαμε μια τέτοια τοπικά) για σκοπούς σύγκρισης με το παραπάνω σχήμα 4-4. Όπως είναι ίσως αναμενόμενο, η εξάρτηση από τη γωνία θ είναι σχεδόν αναλλοίωτη αλλά παρατηρούμε ότι οι τιμές που παίρνει η συνάρτηση $T(\theta)$ είναι γενικώς περίπου μια τάξη μεγέθους μεγαλύτερες.



Σχ. 4-5. Γωνιακή εξάρτηση του συντελεστή διάδοσης για $R=1\text{nm}$ και $F=5\text{V/nm}$, με χρήση του παραδοσιακού σφαιρικού κατοπτρικού δυναμικού, ως προσέγγιση της κβαντομηχανικά

απαιτούμενης ηλεκτρονικής «ανταλλαγής και συσχέτισης» (electronic exchange and correlation). Παρατηρούμε αύξηση (σφάλμα) μιας τάξης μεγέθους σε σχέση με το σχ. 4-4.

Για να κατανοήσουμε καλύτερα πως τα εικονικά δυναμικά επηρεάζουν την τιμή του συντελεστή T , συγκρίνουμε τις τιμές τους στο σχήμα 4-6 a και b. Παρατηρούμε ότι, για δοσμένη απόσταση z από την κορυφή της ακίδας και κατά μήκος του άξονά της, το σφαιρικό είδωλο είναι «πιο αρνητικό» οδηγώντας σε ένα χαμηλωμένο συνολικό φράγμα, δηλαδή μικρότερη απαγορευμένη περιοχή, επομένως σε μεγαλύτερα πιθανότητα διείσδυσης και διέλευσης. Στο σχήμα 4-7 εικονίζονται μαζί τα δυο φράγματα και η μεταξύ τους διαφορά.

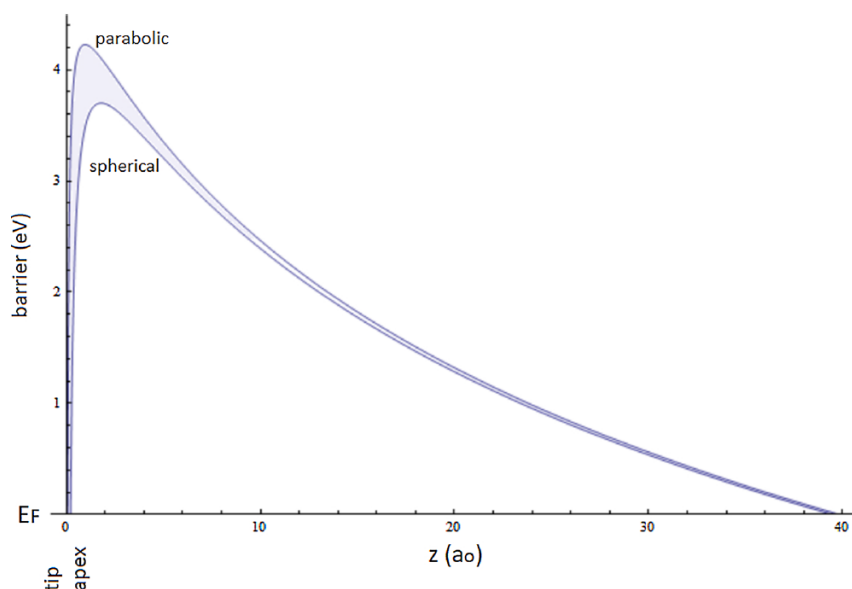


Σχ. 4-6 a-b. Σύγκριση των τιμών του (a) παραβολικού και του (b) σφαιρικού ειδώλου για διάφορες τιμές R . Οι σχετικά μικρές αριθμητικές διαφορές που παρατηρούνται ευθύνονται για τη διαφορά τάξης μεγέθους μεταξύ των σχ. 4-4 και 4-5 καθώς το «εμβადό» του φράγματος υπεισέρχεται στο εκθετικό του συντελεστή διείσδυσης μεγεθύνοντας τις εν λόγω διαφορές.

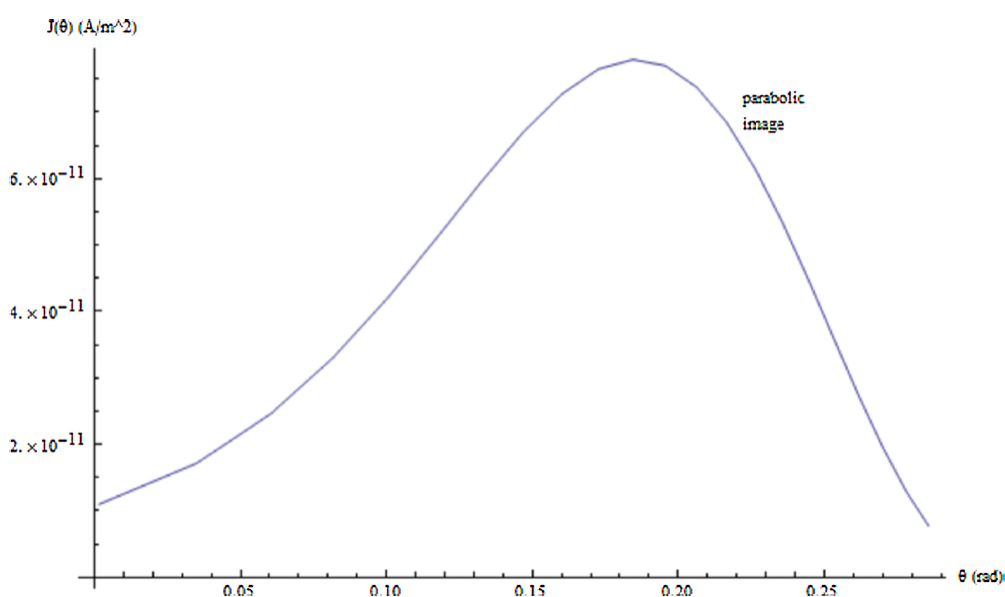
Η εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος J σε συνάρτηση του θ για $R=1$ nm και $F=5$ V/nm δίδεται στο σχήμα 4-8. Το σύνολο σχεδόν του ρεύματος φαίνεται πως εκπέμπεται ουσιαστικά από μια γωνία περίπου 0.3 rad ως προς τον άξονα συμμετρίας $\theta=0$. Το πιο εντυπωσιακό χαρακτηριστικό που παρατηρούμε είναι το γεγονός ότι το μέγιστο J δεν συμβαίνει στην κορυφή $\theta=0$ αλλά σε μια μικρή γωνία ~ 0.2 rad. Αυτό οφείλεται αποκλειστικά στη γωνιακή εξάρτηση της προσπίπτουσας πυκνότητας ρεύματος -που, όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο [1], παρουσιάζει ελάχιστο για $\theta=0$ - και δε σχετίζεται καθόλου με τις ιδιότητες του εξωτερικού φράγματος.

Τα διαγράμματα FN, τα οποία υπολογίσαμε με βάση τη θεωρία την οποία έχουμε παρουσιάσει έως τώρα, παρουσιάζονται στο σχήμα 4-9. Βλέπουμε ότι οι καμπύλες δεν είναι ευθύγραμμες -σε αντίθεση με την κλασική θεωρία- και, συνεπώς, οι

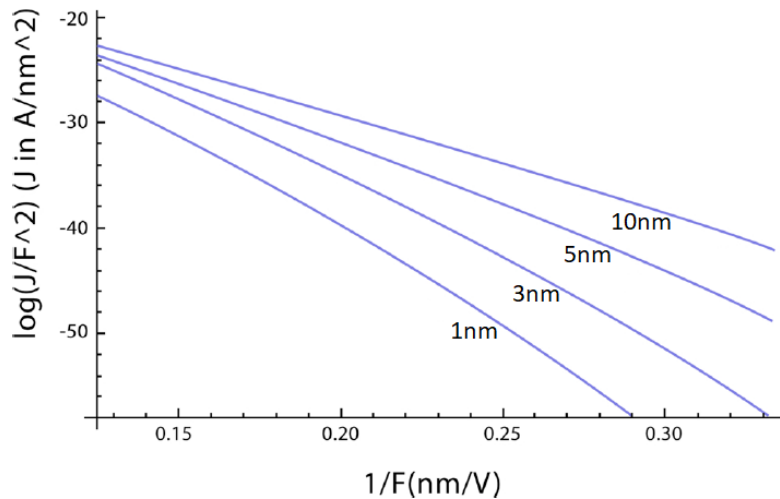
παραδοσιακές διαδικασίες, που χρησιμοποιούνται για την εξαγωγή πληροφοριών για το υλικό ή για άλλες ιδιότητες της ακίδας, δεν μπορούν να εφαρμοστούν πλέον απευθείας στην περίπτωση αυτή. Η εν λόγω καμπύλωση των διαγραμμάτων FN δεν είναι καινούριο εύρημα, όμως, όταν είχε παρατηρηθεί σε κάποιες θεωρίες που αντιμετωπίζουν περιπτώσεις ακίδων με μεγαλύτερες ακτίνες R , είχε αποδοθεί σε κυκλωματικά στοιχεία της ευρύτερης πειραματικής διάταξης, σε συσσώρευση χωρικού φορτίου στο χώρο μεταξύ εκπομπού και ανόδου και στην παρουσία γειτονικών ακίδων διαφόρων γεωμετριών σε διατάξεις πολλαπλών εκπομπών (emitting arrays).



Σχ. 4-7. Σύγκριση των απαγορευμένων περιοχών αφενός με παραβολικό και αφετέρου με σφαιρικό είδωλο, για τυπικές τιμές των διαφόρων παραμέτρων. Η γραμμοσκιασμένη διαφορά είναι ικανή για την διαφορά τάξης μεγέθους στους αντίστοιχους συντελεστές διέλευσης.



Σχ. 4-8. Γωνιακή εξάρτηση της εκπεμπόμενης πυκνότητας ρεύματος για $R=1\text{nm}$ και $F=5\text{V/nm}$, με χρήση του παραβολικού δυναμικού ειδώλου.



Σχ. 4-9. Διαγράμματα Fowler-Nordheim για διάφορες τιμές της ακτίνας R . Παρατηρείται αυξανόμενη καμπύλωση καθώς το R μειώνεται. Η «ιεραρχία» των καμπυλών οφείλεται ακριβώς στη μεταβολή του φράγματος με το R , υπό σταθερό πεδίο F , όπως φαίνεται στο σχ. 4-2, και, ισοδύναμα, κατ' επέκταση, στη αντίστοιχη μεταβολή του συντελεστή εκπομπής που καθορίζει, ως επί το πλείστον, το εκπεμπόμενο ρεύμα.

Αντίθετα, στη θεωρία που έχουμε αναπτύξει είναι μάλλον φανερό ότι η απόκλιση του γραφήματος FN από την κλασική μορφή του οφείλεται στον εξαιρετικά αιχμηρό εκπομπό -με όλα όσα αυτό συνεπάγεται για τα έντονα φαινόμενα που εμφανίζονται και τα οποία αναλύσαμε νωρίτερα- καθώς και στη χρήση της πρωτότυπης -πλην όμως κατάλληλης- συνάρτησης παροχής, αντί για την παραδοσιακή σταθερά που αντιστοιχεί στην θεωρία πεδιακής εκπομπής από επίπεδους εκπομπούς.

Παραδοσιακά, τα διαγράμματα FN χρησιμοποιούνται για εξαγωγή πληροφοριών [12], όπως ο παράγοντας τοπικής ενίσχυσης της έντασης του πεδίου στην κορυφή της εκπέμπουσας ακίδας, κοιτώντας την κλίση του διαγράμματος, αλλά και, πιο πρόσφατα, για τον προσδιορισμό του R από την καμπύλωση του διαγράμματος [2,5]. Σε όλες τις περιπτώσεις υποτίθεται μια σταθερή παροχή ηλεκτρονίων. Δεν είναι ακόμα σαφές πως ακριβώς αυτές οι ρουτίνες μπορούν να υλοποιηθούν εδώ, όπου έχουμε μεταβλητή συνάρτηση παροχής. Μια εισαγωγική προσπάθεια να επιτευχθεί αυτή η σύνδεση έχει γίνει και παρουσιάζεται στο επόμενο κεφάλαιο.

4.1.4 Συμπεράσματα

Στην ενότητα αυτή [14] συζητήσαμε την πεδιακή εκπομπή από νανοσκοπικές ακίδες παραβολοειδούς σχήματος, βασιζόμενοι στην προηγούμενη κβαντομηχανική ανάλυση που είχαμε κάνει για το τι συμβαίνει στο εσωτερικό τέτοιων ακίδων. Αφού διευκρινίσαμε ποιοι όροι υπεισέρχονται στο δυναμικό φράγμα, περιλαμβανομένης της ακριβούς λύσης της εξίσωσης Laplace καθώς και του παραβολικού ειδώλου, παρατηρήσαμε την επίδραση των παραμέτρων R και F στο προφίλ της απαγορευμένης περιοχής και συγκρίναμε με την περίπτωση χρήσης του σφαιρικού εικονικού δυναμικού. Στη συνέχεια προσδιορίσαμε τα πολυπλόθητα διαγράμματα Fowler-Nordheim, τα οποία παρουσιάζουν όλο και πιο έντονη καμπύλωση καθώς το R

μικραίνει. Αυτό είναι απόρροια, εν μέρει, της συνάρτησης παροχής που επιβάλλει το υπό μελέτη σύστημα και η οποία εμφανίζει έντονα κβαντική συμπεριφορά (quantum confinement effects) ενώ εξαρτάται από τη γωνία ως προς τον άξονα. Όταν χρησιμοποιείται το παραβολικό εικονικό δυναμικό στους υπολογισμούς, η πυκνότητα ρεύματος είναι περίπου μια τάξη μεγέθους χαμηλότερη σε σχέση με αυτή που θα προέβλεπε η πιο κλασική θεωρία που χρησιμοποιεί προσεγγιστικά το σφαιρικό είδωλο.

Στην επόμενη ενότητα [15] κάνουμε μια εισαγωγική προσπάθεια να συνδέσουμε τα παρόντα ευρήματα με τις ανάγκες της πειραματικής κοινότητας, γραμμικοποιώντας τις καμπύλες FN ή, ισοδύναμα, προσεγγίζοντας τη συνάρτηση παροχής με μια άλλη που θα είναι σταθερή ως προς τη γωνία θ αλλά θα διατηρεί την εξάρτησή της από την ακτίνα R .

4.2 Συντελεστές διόρθωσης – Σύνδεση με το πείραμα

4.2.1 Εισαγωγή

Χάρη στην πρόοδο που έχει σημειωθεί στην τεχνολογία κατασκευής νανοηλεκτρονικών διατάξεων, οι μοντέρνοι εκπομποί ηλεκτρονίων μπορούν να έχουν ακτίνες καμπυλότητας στην αιχμή τους της τάξης μερικών μόνο nm, τυπικά 1 – 5 nm. Για τόσο αιχμηρά συστήματα, όπως έχουμε πει προηγουμένως, η παραδοσιακή θεωρία Fowler-Nordheim [7] είναι φανερά ανεπαρκής. Μια θεωρία πεδιακής εκπομπής από νανομετρικούς εκπομπούς η οποία γενικεύει την εξίσωση FN έχει παραχθεί -και πλέον εγκαθιδρυθεί- από τους Kyritsakis και Xanthakis [5] αλλά αναφέρεται στις περιπτώσεις όπου $R > 5$ nm. Από την άλλη μεριά, οι αριθμητικοί υπολογισμοί δεν παρέχουν μεγάλη βοήθεια αν επιθυμούμε να διατηρήσουμε το τυπικό σχήμα «βελόνας» (needle-shaped) του εκπομπού. Όπως δείξαμε στο 3^ο κεφάλαιο [1], χρησιμοποιώντας ένα παραβολοειδές εκ περιστροφής ως πρωτότυπο σύστημα, αντιπροσωπευτικό της ρεαλιστικής μορφής των ακίδων που χρησιμοποιούνται σε πειράματα πεδιακής εκπομπής, οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων ενός μετάλλου στις εν λόγω συνθήκες είναι τύπου συναρτήσεων Whittaker, δηλαδή αποκλίνουν δραματικά από το να είναι απλώς επίπεδα κύματα που υποθέτει η κλασική θεωρία. Τέτοιες ηλεκτρονικές ιδιοκαταστάσεις συνοδεύονται από πολύ έντονα φαινόμενα κβαντικού περιορισμού και διακριτοποίησης. Συνεπώς, υπολογισμοί στον $\mathbf{k}$ -χώρο ($\mathbf{k}$ -space) που χρησιμοποιούν περιοδικές συνοριακές συνθήκες είναι ακατάλληλες για την περίπτωσή μας, ενώ υπολογισμοί «τοπικής βάσης» (localized-basis calculations) θα απαιτούσαν ένα τεράστιο πλήθος ατόμων για να προσομοιώσουν πραγματικούς εκπομπούς, διότι συνήθως αυτοί έχουν ένα ύψος της τάξης των μερικών μm.

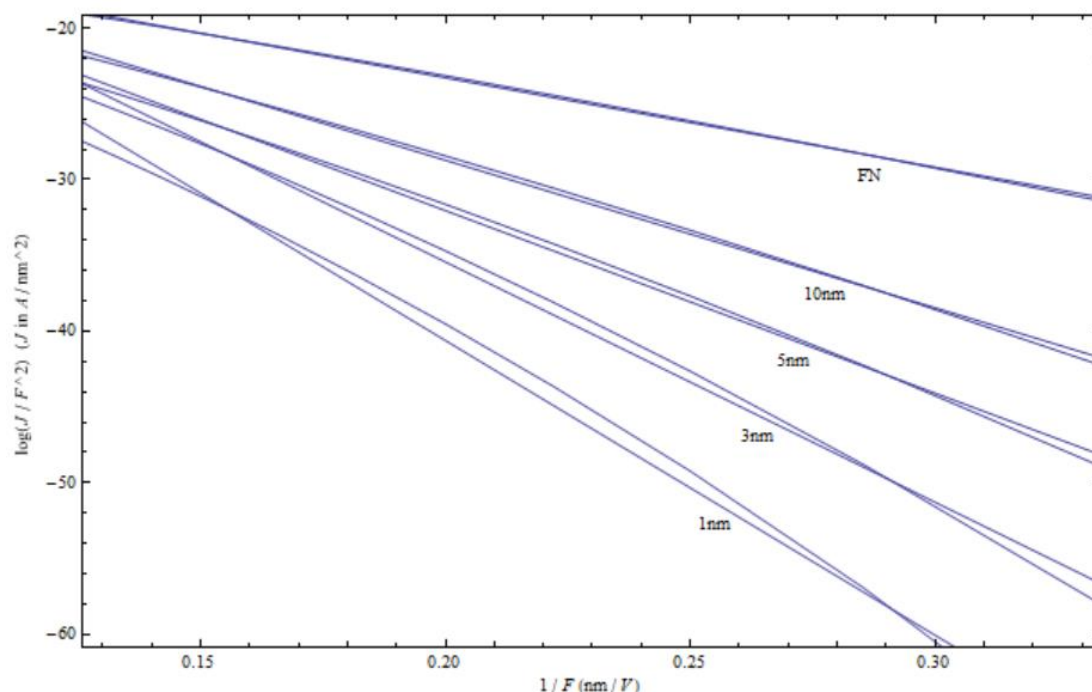
Για να αντιμετωπίσουμε αυτές τις δυσκολίες, στις προηγούμενες ενότητες [1,14] αναλύσαμε ένα σύστημα αρκετά απλό ώστε να είναι επιλύσιμο αλλά το οποίο συγχρόνως διατηρεί τα κρίσιμα χαρακτηριστικά των πραγματικών ακίδων. Αποκτήσαμε τα διαγράμματα FN ενός τέτοιου συστήματος, τα οποία είναι μη γραμμικά και εξαρτώνται από την ακτίνα R . Ωστόσο, λόγω της μαθηματικής πολυπλοκότητας της θεωρίας μας, τα αποτελέσματα του μοντέλου αυτού δε συσχετίζονται εύκολα με πειραματικά ευρήματα.

4.2.2 Μέθοδος - Αποτελέσματα

Στην παρούσα ενότητα [15], θα κάνουμε μια εισαγωγική προσπάθεια να συνδέσουμε τα ευρήματα της θεωρίας μας [1,14] με τις ανάγκες της πειραματικής κοινότητας, προτείνοντας μια απλή και άμεση συσχέτιση των θεωρητικών αποτελεσμάτων μας με το πείραμα. Πιο συγκεκριμένα, γραμμικοποιούμε τις καμπύλες FN ή, ισοδύναμα, προσεγγίζουμε τη συνάρτηση παροχής ηλεκτρονίων με μια άλλη που θα είναι σταθερή ως προς τη γωνία θ αλλά θα διατηρεί την εξάρτησή της από την ακτίνα R .

Χρησιμοποιώντας τα φράγματα δυναμικού που παρουσιάστηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο, υπολογίζουμε τα διαγράμματα FN που αντιστοιχούν σε διάφορες τιμές της ακτίνας καμπυλότητας R . Στο σχήμα 4-10 παρουσιάζονται αυτά, μαζί με τη γραμμική προσρμογή (linear fit) ελαχίστων τετραγώνων του καθενός, δηλαδή τα «γραμμικοποιημένα» FN διαγράμματα. Επίσης, στο ίδιο σχήμα, περιλαμβάνεται το FN

διάγραμμα που αντιστοιχεί σε πολύ μεγάλη τιμή του R , το οποίο είναι σχεδόν γραμμικό, δηλαδή ταυτίζεται με τη γραμμικοποίησή του, όπως είναι άλλωστε αναμενόμενο καθώς η περίπτωση αυτή αντιστοιχεί σε ουσιαστικά επίπεδο εκπομπό. Τα αναλυτικά αποτελέσματα της θεωρίας των προηγούμενων κεφαλαίων εμφανίζουν προφανώς παραμετρική εξάρτηση από το έργο εξόδου (work function) W που καθορίζεται από το υλικό της ακίδας. Οι αριθμητικοί υπολογισμοί της προσομοίωσής μας έχουν γίνει συγκεκριμένα για $W=4.5$ eV. Επομένως, εάν χρησιμοποιείτο η παραδοσιακή FN εξίσωση για εξαγωγή της τιμής της παραμέτρου W (με την τυπική εμπειρική ρουτίνα) από πραγματικά πειραματικά γραφήματα πεδιακής εκπομπής από νανομετρικές ακίδες -τα οποία, όπως έχουμε πει, είναι καμπυλωμένα και με πιο απότομη κλίση (όπως στο σχήμα) σε σχέση με την περίπτωση επίπεδου εκπομπού- τότε το σφάλμα που θα περιέκλειε το αποτέλεσμα θα ήταν ένας πολλαπλασιαστικός παράγοντας μεταξύ 2 και 3 περίπου, όπως προκύπτει από τις κλίσεις των γραμμικοποιημένων διαγραμμάτων που αντιστοιχούν σε διάφορες τιμές της παραμέτρου R . Ένα τέτοιο πειραματικό σφάλμα για το έργο εξόδου είναι πράγματι εντυπωσιακό. Παρακάτω, στο σχήμα 4-11, δίνουμε έναν απλό πίνακα με μερικούς διορθωτικούς παράγοντες που αντισταθμίζουν τις επιπτώσεις της αιχμηρότητας της ακίδας. Πιο συγκεκριμένα, παρουσιάζεται, για κάθε τιμή R , ο λόγος της αντίστοιχης γραμμικοποιημένης κλίσης προς την κλίση του παραδοσιακού FN γραφήματος. Αυτή η μεθοδολογία θα μπορούσε εύκολα να εφαρμοστεί προκειμένου να διευρυνθεί ο πίνακας αυτός ώστε να περιλάβει ένα πυκνό σύνολο τιμών για τις παραμέτρους W και R , καθιστώντας εφικτή την εμπειρική σύνδεση της θεωρίας μας με την πειραματική διαδικασία.



Σχ. 4-10. Διαγράμματα Fowler-Nordheim που προκύπτουν με βάση τη θεωρία μας, για διάφορες τιμές αιχμηρότητας του εκπομπού, μαζί με τις αντίστοιχες ευθείες ελαχίστων τετραγώνων (γραμμικές προσαρμογές).

Tip Radius	Correction Factor
10 nm	1.65
5nm	2.04
3nm	2.69
1nm	3.3

Σχ. 4-11. Συντελεστές διόρθωσης κλίσης διαγράμματος FN με τιμή αναφοράς την κλασική θεωρία επίπεδου εκπομπού. Η τιμή του παράγοντα αυτού αυξάνει καθώς το R μικραίνει, δηλαδή το σφάλμα που υπεισέρχεται, χωρίς τη διόρθωση, στον πειραματικό προσδιορισμό φυσικών παραμέτρων όπως το έργο εξόδου W του μετάλλου επιδεινώνεται όσο πιο αιχμηρός είναι ο νανο-εκπομπός που χρησιμοποιείται για τις μετρήσεις.

4.3 Αναφορές κεφαλαίου

- 1) Chatziafratis A, Fikioris G, Xanthakis JP. 2018 Exact eigenstates of a nanometric paraboloidal emitter and field emission quantities. *Proc. R. Soc. A* **474**: 201706928
- 2) Edgcombe CJ. 2005 Development of Fowler–Nordheim theory for a spherical field emitter. *Phys. Rev. B* **72**, 045420
- 3) K.L. Jensen, D.A. Shiffler, J.R. Harris, I.M. Rittersdorf and J.J. Petillo. 2017 2D/3D image charge for modeling field emission. *JVST B* **35**, 02C101
- 4) K.L. Jensen, D.A. Shiffler, M. Peckerar, J.R. Harris and J.J. Petillo. 2017 Current from a nano-gap hyperbolic diode using shape-factors: Theory. *J. Appl. Phys.* **122**, 064501
- 5) Kyritsakis A, Xanthakis JP. 2015 Derivation of a generalized Fowler–Nordheim equation for nanoscopic field-emitters. *Proc. R. Soc. A* **471**: 20140811.
- 6) Forbes RG. 2012 Extraction of emission parameters for large-area field emitters, using a technically complete Fowler–Nordheim-type equation. *Nanotechnology*, **23**, 095706
- 7) Fowler RH, Nordheim L. 1928 Electron emission in intense electric fields. *Proc. R. Soc. A* **119**, 173-181
- 8) He J, Cutler PH, Miskovsky NM, Feuchtwang TE, Sullivan TE, Chung M. 1991 Derivation of the image interaction for non-planar pointed emitter geometries: application to field emission I-V characteristics. *Surf. Sci* **246**, 348-364
- 9) Kapur P.L. and Peirls 1937 *Proc R. Soc. London Ser. A* **163**, 606
- 10) Das B and Mahanty J, 1987 Spatial distribution of tunnel current and application to scanning tunneling microscopy *Phys. Rev. B* **36**, 898
- 11) Xanthakis JP, Kokkorakis GC. 2004 Theoretical calculation of spatial variation of the transmission coefficient of closed carbon nanotubes. *Surf. Interface Anal.* **36**, 391-394
- 12) R.G. Forbes. 2009 Use of Millikan-Lauritsen plots, rather than Fowler–Nordheim plots, to analyze field emission current-voltage data. *J. Appl. Phys.* **105**, 114313

- 13) NIST DLMF chapter 10
- 14) Chatziafratis A and Xanthakis JP. 2019 Field emission from a nanometric paraboloidal emitter. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **241**, 146871
- 15) A. Chatziafratis and J.P. Xanthakis. 2020 “Correction factors for field emission from a nanoscopic emitter based on ab initio calculation of the electron eigenstates”. *Proceedings of the International Vacuum Nanoelectronics Conference 2020, IEEE Xplore Digital Library*

Time and Space are modes by which we think and not conditions in which we live

-Albert Einstein

Memory is a creative process. What the brain stores is only a core memory. Upon recall, this memory is elaborated upon and reconstructed, with subtractions, additions and distortions

-Eric Kandel

Μια αστραπή η ζωή μας ... μα προλαβαίνουμε!

-Nikos Kazantzakis

The ability to perceive or think differently is more important than the knowledge gained

-David Bohm

By convention sweet and by convention bitter, by convention hot, by convention cold, by convention color; but in reality atoms and void

-Democritus

Not only does God play dice, but He also sometimes confuses us by throwing them where they can't be seen

-Stephen Hawking

Παράρτημα I

Προσδιορισμός της σταθεράς ηλεκτρονικής παροχής z_s της θεωρίας F-N

Εδώ παρουσιάζεται μια απόδειξη [1] για τη μαθηματική έκφραση που δίνει τη σταθερή παροχή ηλεκτρονίων της κλασικής θεωρίας πεδιακής εκπομπής των Fowler & Nordheim που στηρίζεται στην παραδοχή μονοδιάστατης, καρτεσιανής γεωμετρίας και στα πλαίσια ισχύος του μοντέλου ελεύθερων ηλεκτρονίων για μεταλλικούς εκπομπούς. Η έννοια της παροχής ηλεκτρονίων, διαθέσιμων για εκπομπή υπό την έλξη ηλεκτρικού πεδίου, είναι κεντρική στη διατριβή αυτή. Ο υπολογισμός της *συνάρτησης* παροχής που αντιστοιχεί σε νανομετρικές ακίδες και η χρήση αυτής για τον προσδιορισμό του εκπεμπόμενου ρεύματος σε σύγχρονα συστήματα πεδιακής εκπομπής γίνεται στο Κεφ. 3 και αποτελεί δομικό συστατικό της παρούσας μοντέρνας θεωρίας.

Η συνεισφορά j , λοιπόν, μιας ηλεκτρονικής κατάστασης στην εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος (emitted current density) ισούται με:

$$j = f_{FD} z T$$

όπου f_{FD} είναι η πιθανότητα κατάληψης του δεδομένου ενεργειακού επιπέδου από ένα ηλεκτρόνιο, z είναι η κάθετα προσπίπτουσα στην επιφάνεια του εκπομπού πυκνότητα ρεύματος όταν $f_{FD}=1$ και T είναι η κβαντομηχανική πιθανότητα διαφυγής του ηλεκτρονίου μέσω του φράγματος δυναμικού. Για απλότητα δεχόμαστε ότι η υπό μελέτη ηλεκτρονική κατάσταση είναι ένα επίπεδο κύμα (plane-wave state) περιορισμένη μέσα σε ένα κυβικό κουτί όγκου Ω , το οποίο έχει μια πλευρά να εφάπτεται του επιπέδου φράγματος σήραγγος στην επίπεδη μεταλλική επιφάνεια. Αν η κατάσταση περιέχει πράγματι ένα ηλεκτρόνιο φορτίου e , τότε η χωρική πυκνότητα φορτίου στο Ω έχει μέτρο $\rho = e/\Omega$. Αν το φορτίο κινείται με ομοιόμορφη ταχύτητα c_n κάθετη στην επιφάνεια εκπομπής τότε:

$$z = \rho c_n = e c_n / \Omega$$

και, επομένως:

$$j = f e c_n T / \Omega$$

Από την άλλη μεριά, ας δούμε τι συμβαίνει με τη συνεισφορά ενός στοιχείου στον k -χώρο (element in k -space): ένα ηλεκτρόνιο που ταξιδεύει στον ελεύθερο χώρο αναπαρίσταται από μια κυματοσυνάρτηση της μορφής $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, όπου $\mathbf{r}$ είναι το διάνυσμα θέσης του και $\mathbf{k}$ είναι το (κυκλικό) κυματοδιάνυσμα (wave-vector) του. Αν θεωρηθεί ότι το ηλεκτρόνιο είναι περιορισμένο σε ένα κυβοειδές κουτί με μήκη πλευρών Δx , Δy , Δz και όγκο Ω , και η κυματοσυνάρτησή του υπόκειται σε «περιοδικές» (Born-von-Karman) συνοριακές συνθήκες [2], τότε ο αριθμός d^3n των οδεύοντων κυματο-καταστάσεων με συνιστώσες κυματο-διανύσματος στο στοιχείο (dk_x, dk_y, dk_z) είναι:

$$d^3n = 2(\Omega/8\pi^3) dk_x dk_y dk_z$$

επομένως η πυκνότητα καταστάσεων (density of states) στον k -χώρο είναι $2(\Omega/8\pi^3)$. Με σφαιρική δομή ζωνών (spherical band structure), όπως εδώ, παίρνουμε έναν άξονα κάθετο προς την επιφάνεια του εκπομπού, χρησιμοποιούμε κυλινδρικές συντεταγμένες (k_p, ϕ, k_n) στον k -χώρο και ολοκληρώνουμε πάνω στην αζιμουθιακή γωνία ϕ . Το αποτέλεσμα για τον αριθμό d^2n των καταστάσεων στο στοιχειώδες k -διάνυσμα (dk_p, dk_n) είναι:

$$d^2n = 4\pi(\Omega/8\pi^3) k_p dk_p dk_n$$

Σφαιρική δομή ζωνών σημαίνει ότι όλες οι καταστάσεις με την ίδια τιμή k_p συνεισφέρουν εξίσου στην εκπεμπόμενη πυκνότητα ρεύματος. Έτσι, η συνεισφορά d^2J στην πυκνότητα αυτή των d^2n καταστάσεων του στοιχείου (dk_p, dk_n) είναι:

$$d^2J = j d^2n = (4\pi e/8\pi^3) f T k_p dk_p c_n dk_n$$

Η τελευταία εξίσωση θα μετατραπεί τώρα σε μια ισοδύναμη που θα περιέχει ενεργειακά διαφορικά. Η συνολική (κινητική) ενέργεια K ενός ηλεκτρονίου του μετάλλου γράφεται:

$$K=(h/4\pi m)k^2=(h/4\pi m)(k_n^2+k_p^2)$$

Η συνιστώσα K_p της ενέργειας που συνδέεται με την κίνηση που είναι παράλληλη στην επιφάνεια του εκπομπού είναι:

$$K_p=(h/4\pi m)k_p^2$$

με το αντίστοιχο διαφορικό:

$$dK_p=(h/2\pi m)k_p dk_p$$

Η συνιστώσα K_n της ενέργειας που συνδέεται με την κίνηση που είναι κάθετη στην επιφάνεια του εκπομπού είναι:

$$K_n=K- K_p$$

Στο μοντέλο ελεύθερων ηλεκτρονίων, η K_p δεν έχει συναρτησιακή εξάρτηση από το k_n συνεπώς:

$$dK_n=(\partial K/\partial k_n)dk_n$$

Μέσα στο υλικό, ένα ηλεκτρόνιο πρέπει να αναπαρασταθεί με ένα κυματο-πακέτο πεπερασμένου μήκους και η ταχύτητα c_n είναι, εν γένει, η συνιστώσα της ταχύτητας ομάδος (group velocity) που δίδεται από:

$$c_n=(2\pi/h)(\partial K/\partial k_n)$$

Τελικά, προκύπτει:

$$\begin{aligned} d^2J &= (4\pi em/h^3) f T dK_p dK_n \\ &\equiv z_s f T dK_p dK_n \end{aligned}$$

όπου ετέθη (και ορίστηκε) ακριβώς η παγκόσμια σταθερά της κλασικής πεδιακής εκπομπής:

$$z_s \equiv 4\pi em/h^3 \cong 1,618311 \times 10^{14} \text{ A m}^{-2} \text{ eV}^{-2}$$

Βιβλιογραφία παραρτήματος:

[1] Forbes R.G. Use of energy-space diagrams in free-electron models of field electron emission. *Surf. Interface Anal.* 2004; 36: 395–401

[2] Ziman JM. *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge University Press: Cambridge, 1964.

Παράρτημα II

Ημικλασική προσέγγιση – Μέθοδος JWKB

Η μέθοδος JWKB παρέχει προσεγγιστικές λύσεις σε γραμμικές συνήθεις διαφορικές εξισώσεις με συντελεστές που μεταβάλλονται «αργά». Το ακρωνύμιο προκύπτει από τα αρχικά των Jeffreys, Wentzel, Kramers και Brillouin που ανεξάρτητα την ανακάλυψαν και δημοσίευσαν τις σχετικές εργασίες τους -που αναφέραμε στο εισαγωγικό κεφάλαιο- την περίοδο 1923-1926. Όταν η προσεγγιστική αυτή μέθοδος εφαρμόζεται σε προβλήματα κβαντομηχανικής, ονομάζεται *ημικλασική* καθώς, τότε, έννοιες της κλασικής φυσικής προσφέρουν φυσική διαίσθηση όσον αφορά τα χαρακτηριστικά και τις ιδιότητες των κυματοσυναρτήσεων κβαντικών σωματιδίων.

Για ένα σωματίδιο με ορμή p , το μήκος κύματος de Broglie, λ , δίνεται από τη σχέση:

$$\lambda = h/p$$

όπου h είναι η σταθερά του Planck. Η κλασική φυσική παρέχει φυσική διαίσθηση όταν το λ είναι πολύ μικρότερο από την κλίμακα μήκους του προβλήματος. Εναλλακτικά, μπορούμε να φανταστούμε (thought experiment) το εκάστοτε υπό μελέτη πρόβλημα στο όριο όπου το h τείνει στο μηδέν, δηλαδή παίρνει όλο και μικρότερες τιμές. Τότε μπορεί η ημικλασική μέθοδος να διατυπωθεί μαθηματικά.

Ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο με μάζα m και συνολική ενέργεια E , κινούμενο σε μια διάσταση μέσα σε δυναμικό $V(x)$. Στην κλασική φυσική, η διαφορά $E - V(x)$ είναι η κινητική ενέργεια του σωματιδίου στη θέση x και ισούται με $p^2/2m$. Με αφορμή αυτό, ορίζεται η *τοπική ορμή* $p(x)$ ως:

$$p^2(x) = 2m[E - V(x)]$$

Έτσι, αντίστοιχα, ορίζουμε το τοπικό μήκος κύματος de Broglie $\lambda(x)$ μέσω της γνώριμης σχέσης:

$$\lambda(x) = h/p(x)$$

Ας δούμε τώρα συγκεκριμένα πώς εφαρμόζεται το πλαίσιο της υπό συζήτηση μεθόδου στην εξίσωση Schroedinger, η οποία είναι κεντρικό θέμα της παρούσας διατριβής άλλωστε, καθώς η μέθοδος WKB χρησιμοποιείται κατά κόρον στη θεωρία πεδιακής εκπομπής ηλεκτρονίων, όπως έχουμε ήδη αναφέρει. Ας θεωρήσουμε, λοιπόν, τη χρονο-ανεξάρτητη μορφή της εξίσωσης Schroedinger που γράφεται ως εξής:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = [E - V(x)]\psi(x)$$

όπου $\psi(x)$ η ζητούμενη κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου, η οποία επιτρέπει τον προσδιορισμό της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας εύρεσής του (ή, αλλιώς, την πυκνότητα φορτίου) στο χώρο. Θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο WKB για να εκτιμήσουμε προσεγγιστικά τη λύση $\psi(x)$.

Γράφουμε τη λύση -μιγαδική, εν γένει- σε πολική μορφή:

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x)\right)$$

όπου $S(x)$ είναι μιγαδική συνάρτηση και το φανταστικό της μέρος προσδιορίζει το μέτρο της λύσης. Με αντικατάσταση στην εξίσωση Schroedinger και κάποια άλγεβρα προκύπτει η σχέση:

$$(S'(x))^2 - i\hbar S''(x) = p^2(x)$$

όπου η απόστροφος συμβολίζει παραγώγιση. Η παρουσία της φανταστικής μονάδας i στο συντελεστή μας υπενθυμίζει ότι η λύση $S(x)$ αυτής της (μη γραμμικής) διαφορικής εξίσωσης δεν είναι πραγματική. Αποδεικνύεται ότι όταν το δυναμικό $V(x)$ είναι αργά μεταβαλλόμενο τότε ο όρος $i\hbar S''(x)$ είναι μικρός και μας επιτρέπει σε πρώτη προσέγγιση να τον παραλείψουμε. Στην ειδική περίπτωση που το δυναμικό είναι

σταθερό, επίσης η ορμή είναι σταθερή και η εξίσωση επιλύεται δίνοντας $S''=0$ ταυτοτικά. Επομένως, είναι λογικό να είναι ο ο όρος αυτός πολύ μικρός για σχεδόν σταθερό δυναμικό.

Εναλλακτικά, ο όρος $i\hbar S''(x)$ είναι μικρός καθώς $\hbar \rightarrow 0$, που κάνει και το $\lambda(x) \rightarrow 0$. Θεωρώντας λοιπόν το $\hbar$ σε μια μικρή παράμετρο -όπως είναι χαρακτηριστικό της ημικλασικής προσέγγισης- αναπτύσσουμε φορμαλιστικά το $S(x)$ ως προς αυτό:

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) + O(\hbar^3)$$

Αντικαθιστώντας αυτό το ασυμπτωτικό (διαταρακτικό, perturbative) ανάπτυγμα στην προηγούμενη μη γραμμική εξίσωση, αγνοώντας όρους τάξης $\hbar^2$ και πάνω, αναδιατάσσοντας όρους κατά δυνάμεις του $\hbar$ και απαιτώντας να είναι ταυτοτικά μηδέν η παράσταση για κάθε x , παίρνουμε δυο εξισώσεις:

$$\begin{aligned} (S_0')^2 - p^2(x) &= 0 \\ 2S_0'S_1' - iS_0'' &= 0 \end{aligned}$$

Επιλύοντας διαδοχικά αυτές προκύπτει τελικά η προσεγγιστική ανακατασκευή της επιθυμητής κυματοσυνάρτησης:

$$\psi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right]$$

Σε μια περιοχή του χώρου που είναι κλασικά επιτρεπτή, δηλαδή όπου $V(x) < E$, θέτουμε $p^2(x) = \hbar^2 k^2(x)$ με $k(x) > 0$ και η γενική λύση στην περιοχή αυτή είναι η υπέρθεση δυο κυμάτων που διαδίδονται σε αντίθετες κατευθύνσεις:

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

Αντίθετα, σε μια κλασικά απαγορευμένη περιοχή όπου $E < V(x)$, θέτουμε $p^2(x) = -\hbar^2 \kappa^2(x)$ με $\kappa(x) > 0$, συνεπώς $p(x) = i\kappa(x)$ και:

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

Η τελευταία έκφραση παριστάνει δυο κύματα, εκ των οποίων ένα αυξάνει ενώ το άλλο φθίνει εκθετικά με το x . Στα παραπάνω το όριο ολοκλήρωσης x_0 είναι ένα κλασικό σημείο καμπής (classical turning point), δηλαδή ένα από τα σημεία του άξονα x που ικανοποιούν την εξίσωση $V(x) = E$.

Εξετάζοντας κανείς πιο λεπτομερώς το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα για το $S(x)$ και την προσέγγιση που έγινε παραπάνω όταν διατηρήθηκαν συγκεκριμένοι όροι ενώ αγνοήθηκαν άλλοι στη διαφορική εξίσωση για τη συνάρτηση αυτή, προκύπτουν διάφορες ισοδύναμες εκφράσεις για τη «συνθήκη εγκυρότητας» (validity condition) της υπό συζήτηση μεθόδου. Μερικές από αυτές είναι:

- (i) $\lambda \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll |p|$
- (ii) $\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1$
- (iii) $\lambda \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll \lambda$

Η (i) μας λέει ότι οι μεταβολές στην τοπική ορμή p σε απόσταση ίση με το μήκος κύματος de Broglie λ πρέπει να είναι μικρές σε σύγκριση με την ίδια την τιμή της ορμής αυτής. Η (ii) μεταφράζεται ως ότι το μήκος κύματος de Broglie πρέπει να μεταβάλλεται στο χώρο αργά. Η (iii) έχει την ερμηνεία ότι η κύμανση του μήκους κύματος de Broglie σε απόσταση ίση με λ πρέπει να είναι πολύ μικρότερη από λ . Αξίζει να αναφερθεί μια ακόμα έκφραση της συνθήκης εγκυρότητας της WKB μεθόδου που συνδέει το δυναμικό με την κινητική ενέργεια του σωματιδίου:

$$\lambda(x) \left| \frac{dV}{dx} \right| \ll \frac{p^2}{2m}$$

Η απαίτηση αυτή μας λέει ότι το δυναμικό πρέπει να είναι πολύ μικρότερο από την κινητική ενέργεια μέσα σε απόσταση ίση με λ . Αυτή η έκφραση ακριβώς είναι η αυστηρή διατύπωση της ποιοτικής έκφρασης ενός «αργά μεταβαλλόμενου» δυναμικού, που αναφέραμε νωρίτερα.

Οι παραπάνω συνθήκες παραβιάζονται κοντά στα σημεία καμπής, εκεί δηλαδή όπου $E=V(x)$, και η ακρίβεια της προσέγγισης επιδεινώνεται. Αυτό είναι ίσως αναμενόμενο καθώς στα σημεία αυτά η τοπική ορμή γίνεται μηδέν και το μήκος κύματος de Broglie απειρίζεται. Αυτό μπορούμε να το δούμε και αναλυτικά, με σχετικά απλό τρόπο. Στη γενική περίπτωση, κοντά σε ένα σημείο καμπής x_0 το δυναμικό είναι σχεδόν γραμμικό σύμφωνα με το ανάπτυγμα Taylor:

$$V(x)=V(x_0)+c(x-x_0) \Rightarrow V(x)-E=c(x-x_0)$$

Η τοπική ορμή για $x < x_0$ είναι:

$$p^2=2mc(x_0-x)$$

και το αντίστοιχο μήκος κύματος:

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mc}\sqrt{x_0-x}}$$

Παραγωγίζοντας παίρνουμε:

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2mc}(x_0-x)^{3/2}}$$

Εύκολα βλέπουμε τώρα ότι το δεξί μέλος δεν είναι φραγμένο καθώς $x \rightarrow x_0$.

Όπως γίνεται εύκολα αντιληπτό, η προσεγγιστική επίλυση που συζητήσαμε παραπάνω δίνει τη λύση στο χώρο *τμηματικά*, παρέχει δηλαδή μια αναπαράσταση της λύσης αναλόγως με το πρόσημο της διαφοράς $V(x)-E$. Η λύση όμως της αρχικής εξίσωσης του Schroedinger οφείλει να είναι ενιαία, συνεχής και ομαλή σε όλο το χώρο όπου το δυναμικό είναι πεπερασμένο. Το αρχικό εμπόδιο στη σύνδεση των WKB εκφράσεων της λύσης είναι ότι «καταρρέουν» στα σημεία καμπής (συνήθως δυο, για προβλήματα σήραγγος που ενδιαφέρουν και την εκπομπή ηλεκτρονίων από ακίδες υπό ισχυρό πεδίο). Η αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος είναι εφικτή: χρησιμοποιούμε πάλι τη γραμμική προσέγγιση του δυναμικού κοντά στα σημεία καμπής και επιλύουμε ακριβώς την εξίσωση Schroedinger, *τοπικά*, με το προκύπτον γραμμικό δυναμικό μέσω των ειδικών συναρτήσεων Airy. Έτσι σε κάθε περιοχή έχουμε δυο εκφράσεις για τη γενική λύση κόντα στα εν λόγω ιδιάζοντα σημεία. Στη συνέχεια προσδιορίζουμε συντελεστές στις γενικές λύσεις των επιμέρους περιοχών απαιτώντας να συμφωνούν οι ασυμπτωτικές εκφράσεις των δυο λύσεων (WKB και Airy) της κάθε περιοχής, «μακριά» από τα ανώμαλα σημεία. Περισσότερες λεπτομέρειες για αυτήν την απλή αλλά απαιτητική (από άποψη πράξεων) διαδικασία εύρεσης των «συνδετικών σχέσεων» (connection formulae) μπορούν να βρεθούν στα [1-4]. Βασισμένος στις σχέσεις αυτές είναι και ο γνωστός τύπος που δίνει το συντελεστή διάδοσης (tunneling transmission coefficient) μέσα από ένα φράγμα δυναμικού. Στις προαναφερθείσες αναφορές διατυπώνονται επίσης οι διάφορες εκδοχές -ανάλογα με το είδος του δυναμικού- του «κανόνα κβαντοποίησης» (quantization rule) των Bohr-Sommerfeld, ο οποίος δίνει τις προσεγγιστικές τιμές ενεργειας των ηλεκτρονικών ιδιοκαταστάσεων (ιδιοτιμές του τελεστή Schroedinger).

Βιβλιογραφία παραρτήματος:

- [1] Α. Κυριτσάκης. *Θεωρία ηλεκτρονικής μικροσκοπίας εγγύς πεδίου*. Διδακτορική διατριβή ΕΜΠ, 2014.
- [2] D. Cocolocchio and M. Viggiano, "WKB approximation without divergencies," *Int. J. Theor. Phys.*, 1997
- [3] Peter L Hagelstein, Stephen D Senturia, and Terry P Orlando. *Introductory Applied Quantum and Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 2004.
- [4] Lev Davidovitch Landau and Evgueni Mikhailovitch Lifshitz. *Course of Theoretical Physics. Volume 3: Quantum Mechanics*, 1965.

All human beings are also dream beings: Dreaming ties all mankind together

-Jack Kerouac

Πριν μιλήσεις Άκου, πριν γράψεις Σκέψου και πριν πληγώσεις Νιώσε

-Odysseas Elytis

The optimist regards the future as uncertain

-Eugene Wigner

In the fight between you and the world, back the world

-Franz Kafka

Always go too far, because that's where you'll find the truth

-Albert Camus

*The physical world is isomorphic to some mathematical structure and we are simply
uncovering this bit-by-bit*

-Max Tegmark

Ithaka — Constantine P. Cavafy

*“As you set out for Ithaka,
hope that the voyage will be a long one,
full of adventure, full of discovery.
Laistrygonians and Cyclops,
angry Poseidon—don’t be afraid of them:
you’ll never find things like that on your way
as long as you keep your thoughts raised high,
as long as a rare excitement
stirs your spirit and your body.
Laistrygonians and Cyclops,
wild Poseidon—you won’t encounter them
unless you bring them along inside your soul,
unless your soul sets them up in front of you.*

*Hope the voyage is a long one.
May there be many summer mornings when,
with what pleasure, what joy,
you come into harbours seen for the first time;
may you stop at Phoenician trading stations
to buy fine things,
mother of pearl and coral, amber and ebony,
sensual perfume of every kind—
as many sensual perfumes as you can;
and may you visit many Egyptian cities
to gather stores of knowledge from their scholars.*

*Keep Ithaka always in your mind.
Arriving there is what you are destined for.
But do not hurry the journey at all.
Better if it lasts for years,
so you are old by the time you reach the island,
wealthy with all you have gained on the way,
not expecting Ithaka to make you rich.*

*Ithaka gave you the marvelous journey.
Without her you would not have set out...*

*And if you find Her poor, Ithaka won’t have deceived you.
Wise as you will have become, so full of experience,
you must have understood by then what these Ithakas mean.”*