

三维热场致发射模型的数值模拟与研究*

彭凯[†] 刘大刚

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2011年9月26日收到; 2011年11月8日收到修改稿)

研究了场致发射与热电子发射的基本理论, 得出热场致发射的适用公式, 探讨了其粒子的初始分布和初始动量, 并在 FDTD-PIC 原理的基础上编写了软件, 分别实现了场致发射模型, 热电子发射模型和热场致发射模型, 通过分别对一个长楔形阴极器件的数值模拟, 从发射电流特性, 电子初始能量分布等方面验证了其正确性.

关键词: 场致发射, 热电子发射, 热场致发射, 空间电荷效应

PACS: 13.40.Dk 13.40.Em

1 引言

自从热电子发射发现以来, 热阴极就被广泛应用于传统的微波真空电子学中. 这类阴极可以在高真空环境中长时间提供稳定的空间电荷限制流, 特别适用于低流强或中等流强的场合. 而场致发射的发现解决了高强流这个问题, 在提供高压的情况下, 尖端冷阴极能达到 10^7 A/cm², 相比而言热电子发射阴极一般只能提供 100 A/cm² 的电流密度. 在这种情况下场致发射迅速发展, 在各领域都有着很大的发展. 而在实际情况下, 场致发射过程中并不存在真正的冷阴极, 在场致发射的过程中热电子发射常常是不可避免的. 而且当温度到达一定程度时, 热电子发射会对场致发射的过程有较大影响, 我们一般称这种情况为热场致发射. 这一过程具有很多优良的特点^[1], 然而目前学术界对场致发射模拟的工作近年来十分热门, 可是却少有对热场致发射进行描述和模拟的报道.

楔形阴极具有发射面积大、较小的栅极电容和每单位长度较大的跨导等优点, 因此, 在高频时使用楔形发射体具有更多的优点^[2-4]. 然而国内的数值模拟多局限于二维程序^[5], 对于楔形阴极的建

模与计算也就多采用国外软件(如 MAGIC)^[4], 然而国外的优秀软件现在大都(包括 MAGIC)已对我国禁运, 因而开发自主知识产权的三维计算程序是十分有必要的.

本文对上面三种发射的物理机理和电流密度公式进行的研究和推导, 并通过推理给出了它们各自的适用范围. 并在 CHIPIC 软件平台上实现了这一过程, 通过一个长楔形阴极二极管的数值模拟分别验证了其正确性.

2 发射的基本理论

2.1 场致发射基本原理

在尖端场致发射中, 由静电特性可得, 对于器件整体结构, 在远离尖端部分的场域内电位分布基本是均匀的. 只是由于在锥尖附近产生电场畸变, 使场强有较大变化. Fowler-Nordheim 方程给出了发射电流密度 J (A/m²) 和发射体顶尖上的电场强度 E (V/m)、发射体材料的功函数 ϕ (eV) 之间的关系

$$j = \frac{AE_s^2}{\phi \cdot t^2(y)} \exp \left[-\frac{B \cdot v(y) \cdot \phi^{3/2}}{E_s} \right], \quad (1)$$

* 国家重点基础研究发展计划(973)项目(批准号: 2007CB310401)资助的课题.

[†] E-mail: pkltxt@163.com

式中, $A = 1.54 \times 10^{-6} \text{A} \cdot \text{eV} \cdot \text{V}^2$, $B = 6.83 \times 10^9 \text{eV}^{-3/2} \cdot \text{V} \cdot \text{m}^{-1}$, $t^2(y) = 1.1$, $v(y) = 0.95 - y^2$, $y = 3.79 \times 10^{-4} E_s^{1/2} / \phi$, $E_s = (E_c A_c - q / \epsilon_0) / A_s$.

其中, E_s 为表面电场, E_c 为半网格电场, 对应地, A_c 为半网格的面积, A_s 为表面面积, q 为半网格的电量, 而 ϵ_0 为真空中的介电常数 [6,7].

由于场致发射的电子能量一般很小 (略小于费米能级), 因而在强场中可以简化认为初值为零, 也可以认定为在略小于费米能级附近呈现类麦克斯韦分布, 带宽为 1 eV 左右, 即为考虑了低温热电子发射的情况. 因为根据量子力学的分析, 在绝对零度时, 是不应该存在比费米能级高的发射电子. 当然由于实际上也并不存在绝对零度时的发射阴极, 故而上面的两种近似都是有实际意义的. 本文采用的是第二种分布方式.

2.2 热电子发射的基本理论

对于金属的热电子发射, 我们有如下的公式:

$$j = A_0 T^2 \exp \left[- \frac{\phi}{kT} \right], \quad (2)$$

其中 $A_0 = \frac{4\pi e m k^2}{h^3} = 1.204 \times 10^6 (\text{A} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-2})$, 是发射常数的理论值, 对于所有金属都是同样的. k 为 Boltzmann 常数, ϕ 是所用金属的逸出功.

而热电子发射一般工作在加速场下, 根据肖特基效应逸出功会降低, 此时我们可以用下式来描述:

$$j = j(0) e^{(0.439\sqrt{E})/T}, \quad (3)$$

其中 $j(0)$ 为零场时的热电子发射电流密度, E 为阴极表面的电场强度 [7]. 此式一般可以定性来表示加速场下的热电子发射密度, 同时也可以用来表示阴极表面温度限制流的公式.

当阴极表面电场接近于零时, (3) 式退化为 (2) 式, 即说明在零场时, (3) 式仍然是适用的. 当电场强度大到一定程度 (一般为 10^8V/m 以上) 时会产生场致发射, 这时就必须使用热场致发射公式了.

当发射电子形成的空间电荷密度足够大时, 热电子的初速就不能看做为零. 这时就必须考虑电子的初速及初速分布的影响. 而一般情况下热发射电子的初速我们认为它满足麦克斯韦 - 玻尔兹曼分布规律:

$$\frac{d^6 n}{d^3 v d^3 x} = \exp \left(- \frac{mv^2}{2kT} \right), \quad (4)$$

$$\frac{d^6 j_{\text{emit}}}{d v d \phi d \theta d^3 x} = v^3 \sin(\theta) \cos(\theta) \times \exp \left(- \frac{mv^2}{2kT} \right). \quad (5)$$

一般情况下, 热电子发射难以到达空间电荷限制流明显的情况, 然而在很多强场、高温等情况下 (如热场致发射、电子枪阴极等) 还是可以达到的, 这些情况下上面的初速分布才更有意义.

2.3 热场致发射理论

一般情况下在场强弱, 温度高时的发射, 我们一般采用由理查森方程 (3) 式来描述, 而温度低、场强强 的情况下, 我们采用 Fowler-Nordheim 方程 (1) 式来描述, 而还有一种情况, 即为温度和场强都不高不低的情况, 介于前面两者之间, 这时两种发射都无法被忽略, 我们称这种情况为热场致发射.

根据量子力学观点, 我们假定透射电子都是为费米能级 E_F 附近的电子, 这时发射电流积分式为

$$j(T) = \frac{4\pi e m k T}{h^3} \int e^{-c + \frac{E-E_F}{d}} \times \ln \left(1 + e^{-\frac{E-E_F}{kT}} \right) dE. \quad (6)$$

简化可得

$$j(T) = j(0) \frac{\frac{\pi k T}{d}}{\sin \frac{\pi k T}{d}}, \quad (7)$$

其中, $j(0)$ 为 (1) 式在绝对零度时的电流密度, 而 K 为诺曼常数, T 为阴极温度,

$$d = \frac{heE}{4\pi\sqrt{2m}|\phi|t(y_0)}, \quad (8)$$

$$c = \frac{8\pi\sqrt{2m}|E_F|^{3/2}\theta(y)}{3heE}, \quad (9)$$

其中 E 为阴极场强, ϕ 为金属逸出功, $t(y_0)$ 近似为 1.

(7) 式成立的条件为 $d > kT$, 由 (8) 式简化为 $E > 8.83 \times 10^5 \phi^{1/2} T$, 这是场致发射的界限. 当温度高于这个界限时, 说明有较多高能级的电子逸出时, 且 E 也不太大 (因为金属熔点限制温度不可能无限增大). 这时就应该主要考虑热电子发射情况, 由 (3) 式来考虑. 而如果温度很小时, 此时产生的发射就主要为场致发射 (如果可以产生场发射的话), 这时就可以由 (1) 式来考虑.

当 T 趋近于零时, (7) 式退化为 (1) 式, 即为求取绝对零度时的场致发射.

当 T 不太大时, 我们展开 (7) 式有

$$j(T) = j(0) \left[1 + \frac{1}{6} \left(\frac{\pi k T}{d} \right)^2 + \dots \right]. \quad (10)$$

由 (8) 式有

$$\frac{\pi k T}{d} = 2.77 \times 10^2 \frac{T \sqrt{\phi}}{E}. \quad (11)$$

我们可以看到当 T 变大时, 可以认作是对绝对零度电流密度的一个修正. 我们以钨阴极为例, 在表面场强到达 $4 \times 10^9 \text{ V/m}$, 室温下即 $T = 300 \text{ K}$ 时, $\frac{\pi k T}{d}$ 约等于 0.4, 由 (6) 式可知, $j(T) = 1.03 \times j(0)$. 而当温度提升到 1000 K 时, $\frac{\pi k T}{d}$ 约等于 1.5, 这时由 (10) 式可知, $j(T) = 1.5 \times j(0)$. 由此可见当温度从 $T = 0 \text{ K}$ 升到 $T = 300 \text{ K}$ 时, 热电子发射不过总数的 3%, 而当温度升到 1000 K 时, 则有三分之一的电子是由热电子发射, 从高能级逸出的 [7].

一般来说, 热电子发射发射的电子能量会比费米能级高几个电子伏, 总的能量还是比较小, 一般情况下仍可考虑为零. 在必须考虑电子初速及能量分布的情况下可以类似上面的分析, 算出热电子发射的比例, 然后分别按上面的两种发射情况来描述.

3 模拟验证

3.1 器件结构

本文采用的是长楔形阴极, 结构图如图 1 所示. 外壳是一个长方体的腔, 高和宽都是 0.31 mm , 长为 1.21 mm , 其中腔壁厚为 0.01 mm , 楔形阴极的长为 0.95 mm , 阴极尖端的曲率半径约为 $0.2 \mu\text{m}$, 在场致与热场致发射测试阴极都设定为钨阴极 (功函为 4.5 eV).

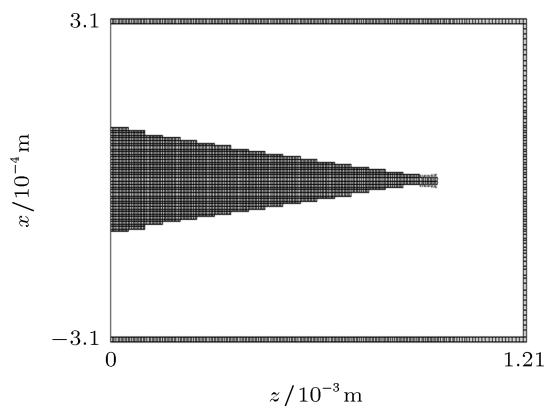


图 1 器件结构图

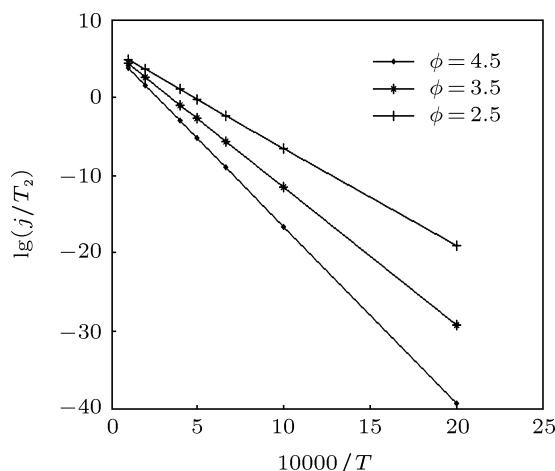


图 2 不同功函下的热电子发射图像

3.2 热电子发射验证

对 (9) 式两边取对数, 则有

$$\lg \left(\frac{j}{T^2} \right) = \lg A + \frac{0.434}{T} \left(0.439 \sqrt{E} - \frac{\phi}{k} \right). \quad (12)$$

我们采取零场模拟, 上式自然可近似退化为

$$\lg \left(\frac{j}{T^2} \right) = \lg A - 5040 \frac{\phi}{T}. \quad (13)$$

我们由计算得出的不同温度下的 j , 并用 $\lg \left(\frac{j}{T^2} \right)$ 为纵坐标, $10000/T$ 为横坐标, 可以得到图 2. 如图 2 所示, 功函不同时得到的三条直线. 据其斜率由 (13) 式算出功函分别为 4.504 eV , 3.511 eV , 2.521 eV , 与最初给定的 4.5 eV , 3.5 eV , 2.5 eV 基本一致. 为了便于观察三条直线与纵坐标的交点, 我们特定选取了 T 为 5000 K 和 10000 K 的点, 但是这些点在实际工程中并不存在, 因为阴极早已熔化. 可以看到, 三条直线与纵坐标的交点都在 6.0 附近, 这与 $\lg A$ (约为 6.08) 基本符合, 这一点也满足 (13) 式. 由此可以看出热电子发射模块的正确性.

3.3 场致发射验证

同样的, 对 (1) 式进行变换取对数有

$$\lg \left(\frac{j}{E^2} \right) = \lg \left(\frac{A}{\phi t^2(y)} \right) - 0.434 \frac{Bv(y)\phi^{3/2}}{E}. \quad (14)$$

因为阴极表面各处 E 并不尽相同, 因而总体电流密度并不能以一点场强来决定. 由于尖端效应中

各点的场强与阴极电压有一个类正比的关系, 我们不妨设定 $E = \beta U$, 我们以 $\lg(j)$ 为纵坐标, $1/U$ 为横坐标, 理论上应该也会得到一条直线. 由图 3 和图 4 可以看出, 在场强不太大的时候 (AB 段) 基本符合直线, 但是在高场强处 (BC 段) 会有偏离, 这主要是由于场强高的时候电流密度变大, 空间电荷效应开始明显. 而当场强继续增加 (CD 段) 时, 空间电荷效应会更加明显, 发射电流的伏安特性会呈现二分之三次方定律特性. 除了可以看出场致发射的基本正确之外, 也能看出软件自洽地考虑了空间电荷效应的影响.

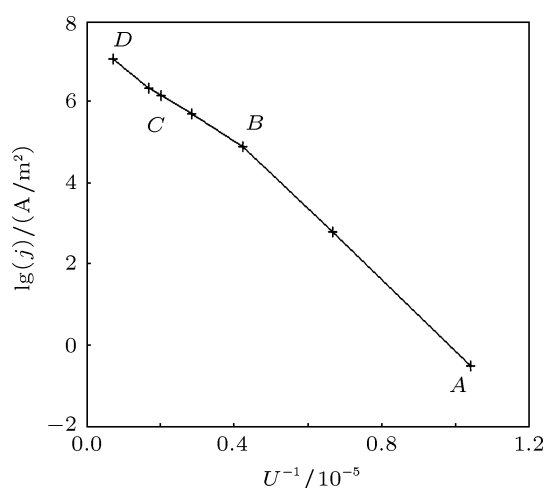


图 3 场致发射电流密度与电压特性图

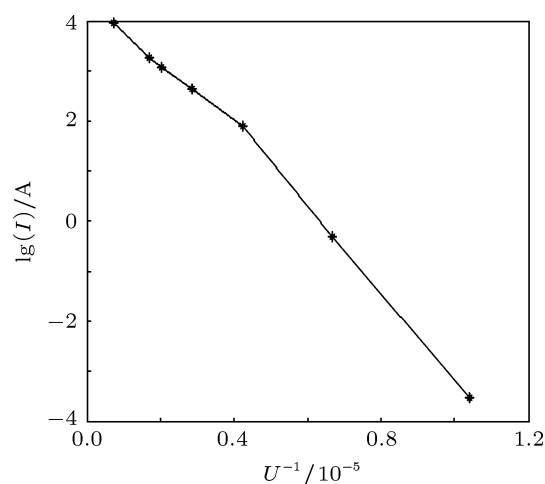


图 4 场致发射电流与电压特性图

响显著增大. 而在强电场下, 温度的影响也是较弱的, 这主要是因为强电场下, 能穿过势垒逸出的电子太多, 热电子发射的影响变得微不足道了. 这一点和理论 [6,7] 完全符合.

一般我们假定电子在无穷远处的势能为零, 此时费米能级与功函数 (4.5 eV) 相等. 我们以电压为 230 kV 为例, 对所有发射的粒子能量进行追踪归一化处理得图 6, 由于上面提过的场致发射粒子初始分布近似的原因, 这里没有考虑 $T = 0$ K 时的分布情况. 可以看出电子的能量分布在 500 K 时还主要以小于费米能级的电子逸出, 而在 1000 K 时就有了较多的高于费米能级的电子逸出了. 这里的结果与理论 [7] 推出的基本一致, 可以看出电子初始状态的假定基本上是正确的.

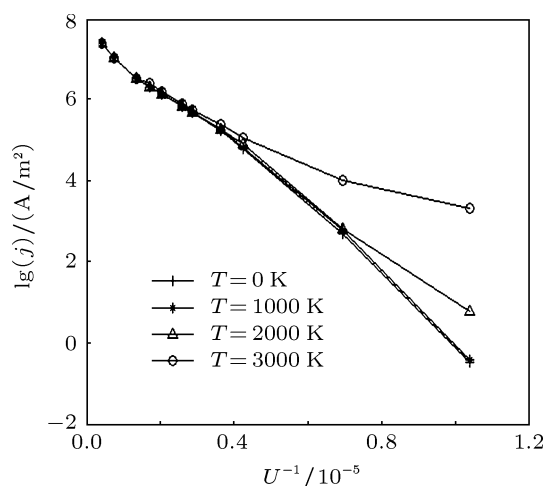


图 5 热场致发射中温度对电流密度的影响

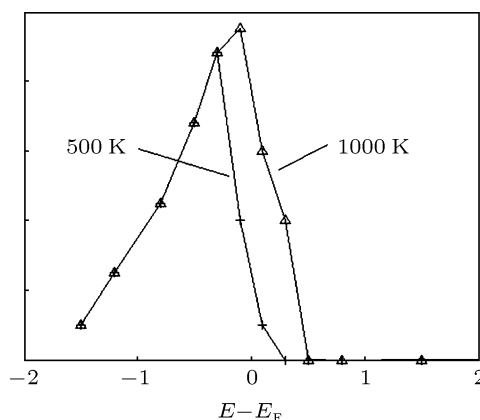


图 6 热场致发射中电子初始能量归一化分布图

3.4 热场致发射验证

图 5 可以清楚的看出, 当温度小于 1000 K 时, 温度对电流密度的影响很小, 而当温度变高时, 影

4 结论

本文从量子力学的物理机理出发, 分别研究

了场致发射,热电子发射和热场致发射公式,并根据条件给出了它们分别的适用范围,讨论并给出了几种模型的粒子初始状态.并在CHIPIC平台上实现了这些发射,通过一个长楔形阴极二极管的模拟,分别进行了正确性的验证,并可以看出由于FDTD-PIC方法的第一性原理的优势,在计算中自洽的考虑了空间电荷效应的影响.而如果当粒子之间产生碰撞、能量交换等情况的影响不可忽略时,宏粒子近似就必须引入蒙特卡罗算法和温度算法来校正.

当场强较低较少有场致发射存在时,我们采用

热电子发射模型来计算;而当场强十分大的时候,我们可以直接考虑场致发射,当然这时也可以考虑使用热场致发射模型来实现,结果是差不多的;而当场强一般大,温度却较高(一般1000 K以上)的时候,我们就必须考虑热场致发射的模型.

对于温度影响不可忽略的器件中使用热场致发射或是热电子发射来实现温度限制流效应也是十分有意义的.而三维程序能对各种非对称的结构(如楔形阴极)进行模拟在国内也填补了我国这方面的空白.

-
- [1] Liu H Y, Gu W Q 1992 *Microfabrication Technology* **1** 7 (in Chinese) [刘晗英, 顾文琪 1992 微细加工技术 **1** 7]
- [2] Lee B 1994 *J. Vac. Sci. Technol. B* **12** 644
- [3] Marcus R B 1990 *IEEE Trans Electron Devices* **37** 1545
- [4] Zheng B Q, Yang Z H 1998 *Vacuum Electronics* **6** 9 (in Chinese) [曾葆青, 杨中海 1998 真空电子技术 **6** 9]
- [5] Li L, Du Y H, Li B Y, Liao F J 2004 *Journal of Shandong University* **39** 73 (in Chinese) [李莉, 杜英华, 李炳炎, 廖复疆 2004 山东大学学报 **39** 73]
- [6] Fowler R H, Nordheim L W 1928 *Electron Emission in Intense Fields* London: Pmc R Soe, 1928.
- [7] Liu X Q 1980 *Cathode electronics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [刘学恂 1980 阴极电子学 (北京: 科学出版社)]
- [8] Shao F Q 2002 *Plasma Simulation* (Beijing: Science Press) p90 (in Chinese) [邵福球 2002 等离子体粒子模拟 (北京: 科学出版社) 第 90 页]
- [9] Wang C Q 1994 *Finite-Difference Time-Domain Method Used for Electromagnetic Field Calculation* (Beijing: Peking University Press) p62 (in Chinese) [王长清 1994 电磁场计算中的时域有限差分法 (北京: 北京大学出版社) 第 62 页]
- [10] Wang B Z 2002 *Electromagneticz Calculation* (Beijing: Science Press) p53 (in Chinese) [王秉中 2002 计算电磁学 (北京: 科学出版社) 第 53 页]
- [11] Xie C F, Rao K J 1999 *Electromagnetic Field and Electromanetic Wave* (Beijing: Higher Education Press) p35 (in Chinese) [谢处方, 饶克谨 1999 电磁场与电磁波 (北京: 高等教育出版社) 第 35 页]
- [12] Holland R, Simpson L 1981 *IEEE Tram. Electromagn. Comp.* 2388
- [13] Liu D W, Yuan X S, Yan Y, Liu S G 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3049
- [14] Liu D G, Zhou J, Liu S G 2007 *Acta Phys. Sin.* **12** 6924 (in Chinese) [刘大刚, 周俊, 刘盛纲 2007 物理学报 **12** 6924]
- [15] Liu D W, Yuan X S, Yan Y, Liu S G 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5507

Numerical simulation and study of three-dimensional thermal field emission*

Peng Kai[†] Liu Da-Gang

(School of Physical Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

(Received 26 September 2011; revised manuscript received 8 November 2011)

Abstract

In this paper, we study the basic theory of field emission, thermionic emission and the thermal field emission, derive their current density formula, the initial distribution of the particles and their initial momentum. And then we achieve a field emission model, thermionic emission model and thermal field emission model on the basis of FDTD-PIC algorithm software. Finally, we verify its correctness using a wedge-shaped-cathode device.

Keywords: field emission, thermionic emission, thermal field emission, space charge effects

PACS: 13.40.Dk 13.40.Em

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2007CB310401).

[†] E-mail: pklxtx@163.com