

体空位缺陷对氧化铝二次电子发射特性的影响分析*

张建威^{1)†} 牛莹¹⁾ 闫润圻²⁾ 张荣奇¹⁾ 曹猛²⁾
李永东²⁾ 刘纯亮²⁾ 张嘉伟¹⁾

1) (西安理工大学电气工程学院, 西安 710048)

2) (西安交通大学电子科学与工程学院, 物理电子与器件教育部重点实验室, 西安 710049)

(2024年4月26日收到; 2024年6月6日收到修改稿)

基于第一性原理和蒙特卡罗模拟方法, 系统地研究了氧化铝晶体内部O空位缺陷和Al空位缺陷对二次电子发射特性的影响. 密度泛函计算结果表明, 空位缺陷会导致能带结构发生改变, 其中Al空位缺陷的存在使得禁带宽度变窄, 费米能级降低至价带内部. 在此基础上, 获得了不同晶体结构下的弹性和非弹性平均自由程. 氧化铝中存在Al空位缺陷时的弹性平均自由程最大, 而存在O空位缺陷时的非弹性平均自由程最大. 为了分析不同缺陷浓度下的二次电子发射特性, 对已有蒙特卡罗模拟算法进一步优化. 模拟结果表明, 随着O空位和Al空位缺陷占比的增加, 最大二次电子发射系数随之而下降. 相比于Al空位缺陷, 相同缺陷占比下O空位缺陷导致二次电子发射系数降低更多.

关键词: 二次电子, 空位缺陷, 蒙特卡罗, 密度泛函**PACS:** 79.20.Hx**DOI:** 10.7498/aps.73.20240577

1 引言

由电子辐照激发的二次电子发射现象是物理学中一个重要的研究分支, 在诸多领域都有着广泛的应用. 由于二次电子对材料表面状态敏感, 常被用于材料的表征和探测, 如扫描电子显微镜成像^[1]、离子束加工聚焦检测^[2]、碳污染检测^[3]等. 此外, 采用高二次电子产额 (secondary emission yield, SEY) 的材料还可以实现光电倍增管中电子的倍增和信号的放大^[4]. 但是在大功率微波器件^[5,6]和加速器^[7]中, 二次电子倍增将会导致击穿的发生^[8-10], 损害器件的性能, 因此是需要遏制和规避的.

为了分析材料缺陷对二次电子发射特性的影响, 已经开展了大量的相关研究. He等^[11]通过测量无氧铜和不锈钢经过Ti离子辐照后的二次电子

产额, 结果表明辐照损伤缺陷对二次电子发射有抑制的效果. Gonzalez等^[12]采用Ar⁺轰击高定向热解石墨样品, 得到了相似的结论. Brillson等^[13]与Sun等^[14]通过阴极荧光光谱技术证明了材料体内部点缺陷对二次电子发射特性会产生相应的影响. 此外, Taha等^[15]与Heo等^[16]分别从第一性原理计算和实验诊断研究发现, 点空位缺陷的存在会使材料的带隙变窄. Hussain等^[17]的计算结果表明, 空位缺陷的存在不仅减小了带隙, 还可以获得较低的光学能量损失函数, 从而影响二次电子发射特性. 而在数值模拟方面, Nguyen等^[18]采用密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 和蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 模拟研究了晶向和表面空位对铜二次电子产额的影响, 结果表明在晶向为[111]时, 有空位的铜材料比无空位时的SEY值略高.

氧化铝以其优异的物理性质 (低电导率、高硬

* 国家自然科学基金 (批准号: 52307186)、陕西省自然科学基金基础研究计划 (批准号: 2023-JC-QN-0585) 和陕西省教育厅青年创新团队项目 (批准号: 23JP104) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhangjianwei@xaut.edu.cn

度、高熔点)和稳定的化学性质,被广泛用于电气绝缘设备^[19,20]及等离子催化^[21,22]中. Al_2O_3 的二次电子发射特性是影响相关电学性能的重要因素,然而目前尚缺乏材料缺陷对 Al_2O_3 二次电子发射特性影响的相关研究. 电子在材料中的散射轨迹与平均自由程密切相关,因此,本文首先利用密度泛函理论计算得到含有 Al 空位缺陷和 O 空位缺陷时 Al_2O_3 的弹性和非弹性平均自由程. 当发生非弹性散射时,电子损失能量并有一定概率产生内二次电子;而在弹性散射过程中,电子只改变散射的角度,不损失能量. 在此基础上,对已有蒙特卡罗模拟算法进行优化,分析了空位缺陷对氧化铝二次电子发射特性的影响.

2 DFT 计算模型及结果

图 1 为 Al_2O_3 材料存在氧空位、铝空位以及无空位时的晶体结构. Al_2O_3 为刚玉结构 ($R\bar{3}c$ 空间群),如图 1(c) 所示,无缺陷的 Al_2O_3 晶胞中包含 12 个 Al^{3+} 原子和 18 个 O^{2-} 原子. 在本文中,所有关于空位缺陷的计算都是基于在一个 Al_2O_3 晶胞中引入单个空位缺陷的结构进行的,此时 Al_2O_3 晶胞的缺陷浓度为 3.33%,空位缺陷原子的位置由图 1 可见. 本文中的第一性原理计算均是采用 Quantum ESPRESSO 7.1^[23] 完成的. 计算中采用了广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 方法来考虑电子之间相互作用中的交换关联势,电子波函数经平面波基矢组进行扩展,并采用了超软赝势^[24]

描述离子实与价电子间的相互作用. 布里渊区域 K 点网格^[25] 的设置采用 $12 \times 12 \times 12$. Al_2O_3 的晶格常数为 9.09 Bohr,为了保证存在缺陷时晶体结构的稳定性,对原子位置进行了弛豫计算.

内二次电子的初始能量为其未发生碰撞时的能量与碰撞过程中入射电子能量损失的总和. 而未发生碰撞时的能量即取决于材料的能带分布. 在本文中,假定材料内电子满足自由电子气模型,价电子被激发为内二次电子的概率与自由电子的联合态密度 $\sqrt{E_0(E_0 + E_F)}$ 成正比^[26],其中 E_F 为费米能级, E_0 为自由电子的初始能量. 同时,能带分布决定了材料的表面势垒高度,对于导体和非导体材料,界面势垒高度不同. 对于导体材料,势垒高度为功函数;而非导体材料,势垒高度为电子亲和势^[27]. 在二次电子发射中,基于不同方向下动量转移的能量损失函数决定了电子在材料中损失的能量及非弹性平均自由程,从而影响内二次电子的产生及穿过势垒出射的概率.

图 2 为 Al_2O_3 内部存在缺陷和无缺陷时的能带分布. 由图 2 可以看出,当存在 O 空位缺陷时,导带底 (conduction band minimum, CBM) 与价带顶 (valance band maximum, VBM) 能量均有所降低,分别从 13.23 eV 和 7.35 eV 降低到 13.20 eV 和 7.14 eV. 相比于无缺陷时,禁带宽度变化不大,但费米能级 E_F 较无缺陷时从 12.55 eV 降低到 10.92 eV. 而 Al 空位缺陷的存在使 CBM, VBM 和 E_F 都有所下降,分别为 12.58 eV, 7.30 eV 和 6.81 eV. 因此,Al 空位缺陷的存在使禁带宽度由 5.88 eV 下降至 5.28 eV,同时 E_F 进入价带内部.

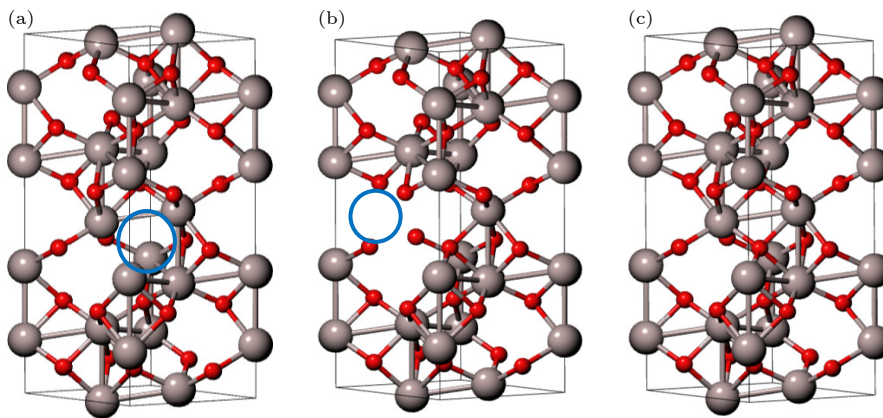


图 1 Al_2O_3 内部产生缺陷和无缺陷的晶体结构 (a) O 空位缺陷; (b) Al 空位缺陷; (c) 无缺陷 (灰色原子为 Al^{3+} , 红色原子为 O^{2-} , 蓝色圆圈为缺陷原子位置)

Fig. 1. Crystal structure of Al_2O_3 with ideal state and defects: (a) O vacancy defect; (b) Al vacancy defect; (c) ideal state (the gray atoms are Al^{3+} , the red atoms are O^{2-} and the blue circles are the defective atom positions).

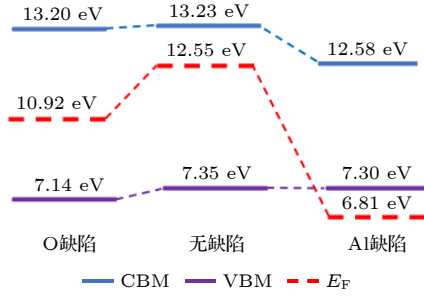

 图 2 Al_2O_3 内部存在缺陷和无缺陷时的能带分布

Fig. 2. Energy band profile in Al_2O_3 with and without internal defects.

图 3 为存在空位缺陷时, 基于不同方向下动量转移的能量损失函数 (energy loss function, ELF). ELF 为材料介电函数 $\varepsilon(q, \omega)$ 虚部的倒数. 其中动量 $|\mathbf{q}|$ 的取值为: 0—0.1 区间内, 间隔增量为 0.005; 0.1—1.5 区间内, 间隔增量为 0.02; 1.5—5.25 区间内, 间隔增量为 0.05; 5.25—6.95 区间内, 间隔增量为 0.1; 7.45—10.95 区间内, 间隔增量为 0.5. $|\mathbf{q}|$ 以 $2\pi/a$ 为单位, a 为晶格常数. 由于各向异性的晶体结构, Al_2O_3 在三个方向上的 ELF 略有不同^[28]. 如图 3 所示, 当 Al_2O_3 内部存在 Al 空位缺陷和 O 空位缺陷时, z 方向上的 ELF 在 $W = 28.25$ — 31.15 eV 内和 $W = 40.50$ — 44.35 eV 内的下降速度比在 x 和

y 方向更慢, 可归因于带间跃迁; 在 $W = 31.15$ — 40.50 eV 内的下降速度比在 x 和 y 方向更快, 这是由等离子体激发所致. 当 $|\mathbf{q}| = 0$ 时, 存在 Al 空位缺陷和 O 空位缺陷时不同方向的 ELF 峰值均在 24.65 eV 附近, 这是由等离子体共振引起的^[29]. 当 Al 空位缺陷存在且 $|\mathbf{q}|$ 增大到 0.39 Bohr^{-1} , 以及 O 空位缺陷存在且 $|\mathbf{q}|$ 增大到 0.55 Bohr^{-1} 时, x, y, z 方向的 ELF 在 30.25 eV 处均出现一个峰值. 当 Al 空位缺陷存在且 $|\mathbf{q}|$ 增大到 0.77 Bohr^{-1} , 以及 O 空位缺陷存在且 $|\mathbf{q}|$ 增大到 0.88 Bohr^{-1} 时, z 方向的 ELF 在 44.35 eV 处出现另一个峰值.

3 蒙特卡罗模拟算法及分析

基于 DFT 计算所得的介电常数 $\varepsilon(q, \omega)$, 可以得到固体材料中电子的非弹性平均自由程 λ_{in} ^[30]:

$$\lambda_{\text{in}}^{-1} = \frac{1}{\pi a_0 W} \int_{q_-}^{q_+} \frac{1}{q} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] dq, \quad (1)$$

$$q_{\pm} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left[\sqrt{W} \pm \sqrt{W - \hbar\omega} \right], \quad (2)$$

其中 $\hbar\omega$ 为能量损失, $a_0 = 5.29177 \times 10^{-11} \text{ m}$ 为 Bohr 半径, $\hbar q$ 为动量转移, \hbar 为约化普朗克常数, W 为电子能量, m 为电子质量.

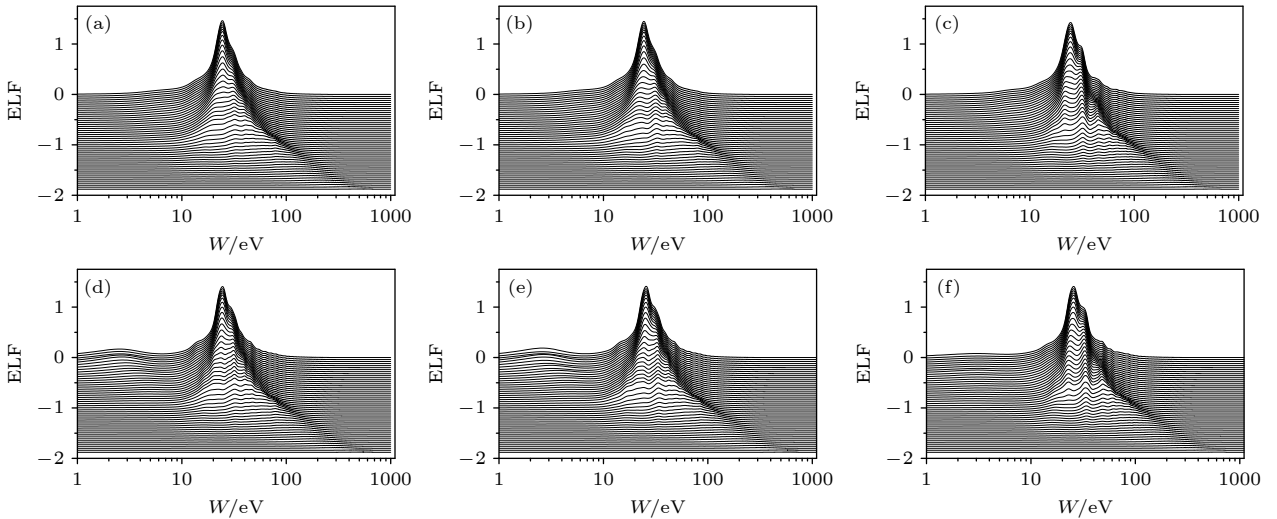


图 3 Al_2O_3 存在 Al 空位缺陷和 O 空位缺陷情况时, 基于不同方向下动量转移的 ELFs (a), (b), (c) O 空位缺陷的 ELF, 依次为 x, y, z 方向; (d), (e), (f) Al 空位缺陷的 ELF, 依次为 x, y, z 方向. $|\mathbf{q}|$ 的取值为: 0—0.1 区间内, 间隔增量为 0.005; 0.1—1.5 区间内, 间隔增量为 0.02; 1.5—5.25 区间内, 间隔增量为 0.05; 5.25—6.95 区间内, 间隔增量为 0.1; 7.45—10.95 区间内, 间隔增量为 0.5. $|\mathbf{q}|$ 以 $2\pi/a$ 为单位, a 为晶格常数. 从 $|\mathbf{q}| = 0$ 开始, 每四个连续 $|\mathbf{q}|$ 取一行, 偏移量是 -0.01

Fig. 3. ELFs based on momentum transfer in different directions when Al_2O_3 has Al vacancy defect and O vacancy defect: (a), (b), (c) The ELFs of O vacancy defect in $x, y,$ and z directions; (d), (e), (f) the ELFs of Al vacancy defect in $x, y,$ and z directions. The increments of $|\mathbf{q}|$ are 0.005 between 0 and 0.1, 0.02 between 0.1 and 1.5, 0.05 between 1.5 and 5.25, 0.1 between 5.25 and 6.95, and 0.5 between 7.45 and 10.95. $|\mathbf{q}|$ takes the unit of $2\pi/a$, and a is the lattice parameter. Lines are taken in the order of one for every four successive $|\mathbf{q}|$ from $|\mathbf{q}| = 0$ and offset by -0.01 .

当电子在材料中运动时, 电子的能量损失可以用阻止本领来表达:

$$\frac{dW}{ds} = \frac{\hbar}{\pi W a_0} \int_0^{W/\hbar} \hbar \omega d\omega \int_{q_-}^{q_+} \frac{dq}{q} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(\omega, q)} \right]. \quad (3)$$

其中 s 为电子在材料中的运动距离.

在非弹性散射中, 入射电子的能量会传递给材料, 并在材料内部激发出次级电子, 当电子遇到界面势垒时, 一些电子会被反射回材料内部, 而另一些电子则会跨越界面势垒 U_0 . 次级电子在向材料表面运动的过程中与材料中其他电子发生碰撞, 导致自身能量转移或损失, 以至于没有足够的能量越过界面势垒. 由 Drouin 等^[31] 的研究结果可知, 当入射能量较高时, 入射电子的能量损失很小, 此时次级电子越过界面势垒的概率增大. 电子越过势垒出射的概率为

$$T(W, \beta) = \begin{cases} \frac{4\sqrt{1 - U_0/W\cos^2\beta}}{[1 + \sqrt{1 - U_0/W\cos^2\beta}]^2}, & W\cos^2\beta > U_0, \\ 0, & W\cos^2\beta \leq U_0. \end{cases} \quad (4)$$

由 (4) 式可知, 当满足 $W\cos^2\beta > U_0$ 时电子才能跨过势垒, 其中 β 为次级电子到达表面时与表面法线的夹角.

图 4 为 Al_2O_3 在无缺陷、存在 O 空位缺陷和 Al 空位缺陷三种情况下, 基于不同方向下动量转移的 ELF 计算得到的电子的非弹性平均自由程. 不同晶体结构中电子的非弹性平均自由程略有不同. 当 $W < 110$ eV 时, 电子的非弹性平均自由程较大, 但总体趋势是随着入射电子能量的增加而快速减小的, 在 $W > 110$ eV 时, 非弹性平均自由程又随着入射电子能量的增加而逐渐增大. 同一种晶体结构下不同方向动量转移的电子非弹性平均自由程存在一定的差异. 当动量转移在 z 方向时, 电子的非弹性平均自由程最大; 当动量转移在 y 方向时, 电子的非弹性平均自由程最小. 这是由 Al_2O_3 晶体的各向异性引起的, 由于各向异性的晶体结构, Al_2O_3 在三个方向上的 ELF 不同, 由 (1) 式和 (2) 式可得, 当 z 方向上的能量损失率最小时, 导致非弹性平均自由程最大, 当 y 方向上的能量损失率最大时, 导致非弹性平均自由程最小. 如图 4 所示, 当 $W < 50$ eV 时, 无缺陷氧化铝的非弹性平均自由程比存在 Al 空位缺陷氧化铝的非弹性平均自由程大; 当 $W > 50$ eV 时, 则完全相反. 而存在 O 空

位缺陷氧化铝的非弹性平均自由程在整个能量区间内总是大于存在 Al 空位缺陷和无空位缺陷氧化铝的非弹性平均自由程.

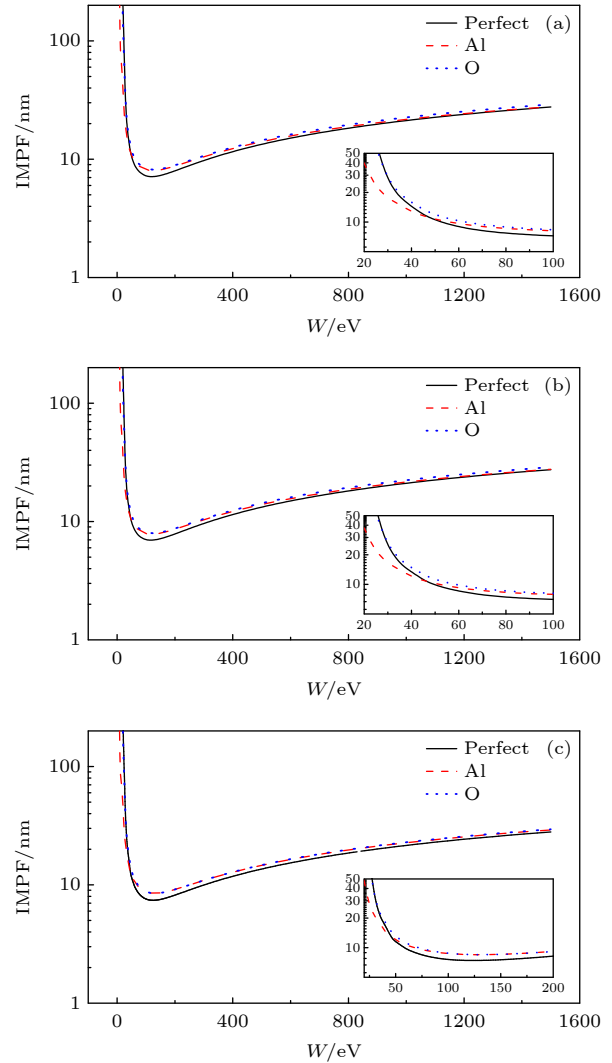


图 4 Al_2O_3 在无缺陷、存在 O 空位缺陷和 Al 空位缺陷时, 基于不同方向动量转移的电子非弹性平均自由程 (a) x 方向; (b) y 方向; (c) z 方向

Fig. 4. Inelastic mean free paths of electrons in Al_2O_3 in the ideal state, Al vacancy defect and O vacancy defect with momentum transfer in different direction: (a) x -direction; (b) y -direction; (c) z -direction.

10 keV 入射能量以下的电子在发生弹性碰撞时, 其总微分弹性截面是各单元微分弹性截面比例的总和, 总弹性截面可由 Mott 微分散射截面^[32] 来表达:

$$\sigma_{\text{el}} = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} \sin\theta d\theta, \quad (5)$$

其中 $\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega}$ 为微分弹性截面. 电子的弹性平均自由程为

$$\lambda_{\text{el}} = \frac{A}{N_A \rho \sigma_{\text{el}}}, \quad (6)$$

其中 A 是原子的相对质量, N_A 是阿伏伽德罗常数, ρ 是物质密度.

在发生弹性碰撞时, 化合物中的原子比例对弹性平均自由程也具有一定的影响^[33], 此时弹性微分截面为

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} = \sum_n C_n \left(\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} \right)_n, \quad (7)$$

其中 C_n 为第 n 种原子的权重分数. 因此当 Al_2O_3 内部产生空位缺陷的情况下, Al 原子和 O 原子的比例将发生变化, 从而影响到弹性平均自由程的大小.

图 5 为 Al_2O_3 在无缺陷、存在 O 空位缺陷和 Al 空位缺陷情况下电子的弹性平均自由程. 结果表明 Al 空位缺陷和 O 空位缺陷的存在使得弹性平均自由程增大. 其中存在 Al 空位缺陷时的弹性平均自由程最大, 而无缺陷的弹性平均自由程最小. 当 Al_2O_3 内部产生 Al 空位缺陷时, Al 原子的权重分数最小, 所以此时的弹性微分截面最小, 根据 (5) 式和 (6) 式可知, 相对应的弹性平均自由程最大. 同理可得, 由于此时 Al 原子的权重分数最大, 因此在无缺陷情况下的弹性平均自由程最小.

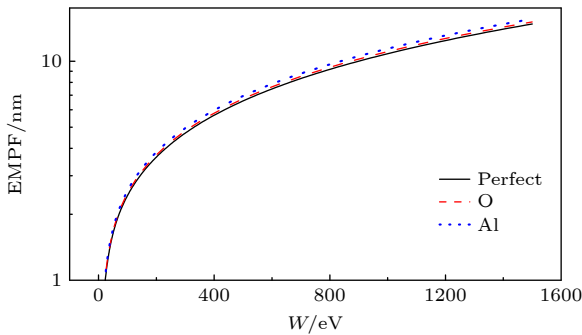


图 5 Al_2O_3 在无缺陷、O 空位缺陷和 Al 空位缺陷情况下的弹性平均自由程

Fig. 5. Elastic mean free paths of electrons in Al_2O_3 under conditions of ideal state, Al vacancy defect and O vacancy defect.

由于材料内的缺陷分布存在一定的随机性, 为了简化起见, 本文通过 O 空位缺陷和 Al 空位缺陷的缺陷概率来表征体空位缺陷对二次电子发射系数的影响. 实际中材料的缺陷浓度最高为 10%^[34], 因此本文对空位缺陷概率的取值范围为 1%—10%, 此时 Al_2O_3 晶体中的空位缺陷浓度为 Al_2O_3 晶胞的空位缺陷浓度与空位缺陷概率的乘积, 即空位缺陷浓度最大为 0.33%, 最小为 0.033%. 因此, 对已

有考虑各向异性的蒙特卡罗模拟算法^[28]进一步优化, 当电子发生碰撞之前, 先确定所在区域是否存在缺陷及其缺陷的类型. 图 6 为本文所采用的蒙特卡罗方法模拟流程图. 在碰撞发生前, 先生成一个 0—1 之间的随机数, 当空位缺陷的概率 O_{n1} 和 Al_{n2} 确定时, 根据生成的随机数来判断碰撞所采用的弹性及非弹性截面. 若随机数在 0— O_{n1} 之间, 则缺陷类型为 O 空位缺陷; 若随机数在 O_{n1} — $O_{n1} + \text{Al}_{n2}$ 之间, 则缺陷类型为 Al 空位缺陷; 若随机数在 $O_{n1} + \text{Al}_{n2}$ —1 之间, 则无缺陷. 当发生碰撞时, 需要确定碰撞的类型. 若为弹性碰撞, 则只改变电子的运动方向, 无能量损失; 若为非弹性碰撞, 则求得电子的能量损失和非弹性平均自由程, 并更新电子的能量及速度位置信息. 如果产生内次级电子, 则二次电子的产生取决于电子越过表面势垒的概率^[26]. 当电子运动至材料表面时, 如果能够越过势垒, 则成为真正的二次电子.

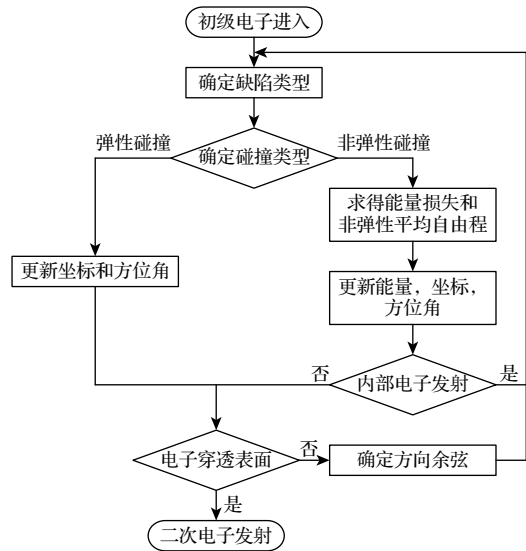


图 6 蒙特卡罗模拟流程图

Fig. 6. A flow chart of Monte Carlo simulation.

本文利用蒙特卡罗模拟方法获得了 Al_2O_3 晶体中存在 Al 空位缺陷和 O 空位缺陷时的二次电子发射系数. 如图 7 所示, 研究了 O 空位缺陷概率和 Al 空位缺陷概率在 1%—10% 范围内对氧化铝 SEY 的影响. 当两种空位缺陷概率分别为 1%, 4%, 7%, 10% 时对二次电子发射系数的影响结果如表 1 所列, 当 O 空位缺陷和 Al 空位缺陷概率从 1% 增加到 10% 时, Al_2O_3 SEY 的最大值所对应的入射电子能量在 420—460 eV 之间; Al_2O_3 SEY 峰值随着 O 空位缺陷概率的增加而下降; 当 Al 空位缺陷

的概率大于 1% 时, Al_2O_3 SEY 峰值在 4.06—4.08 之间波动. 结果表明, Al_2O_3 的 SEY 值是随着两种空位缺陷概率的增加而下降, 其中 O 空位缺陷概率的变化对 SEY 的影响比 Al 空位缺陷概率变化对其影响更为明显. 这种现象是由于 O 空位缺陷概率越高, 碰撞就更加接近于 Al 的情况. 而 Al_2O_3 的非弹性截面小于 Al^[28,30], 因此 O 空位缺陷的存在使非弹性散射的概率增大, 发生非弹性散射后的偏转角较小, 电子不容易出射.

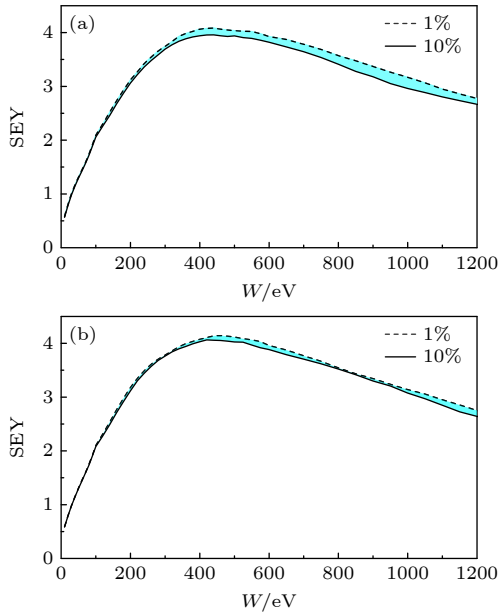


图 7 空位缺陷概率对 Al_2O_3 的二次电子发射系数的影响 (a) O 空位缺陷; (b) Al 空位缺陷

Fig. 7. Effect of vacancy defect probability on the secondary electron emission coefficient of Al_2O_3 : (a) O vacancy defect; (b) Al vacancy defect.

表 1 不同空位缺陷概率对二次电子发射系数的影响

Table 1. Effect of different vacancy defect probabilities on the coefficients of secondary electron emission.

缺陷概率/%	O空位缺陷		Al空位缺陷	
	W/eV	SEY	W/eV	SEY
1	440	4.08	460	4.14
4	460	4.06	460	4.06
7	440	4.02	460	4.08
10	440	3.96	420	4.06

4 结 论

本文采用第一性原理与蒙特卡罗模拟相结合的方法, 对 Al_2O_3 材料内部产生 Al 空位缺陷和 O 空位缺陷时的二次电子发射特性进行了研究. 根

据密度泛函的计算结果得到了空位缺陷对能带分布的影响. 其中 Al 空位缺陷的存在使得禁带宽度变窄, 同时费米能级与无缺陷时相比明显下降, 进入了价带内部. 此外, 还获得了不同晶体结构中的电子非弹性和弹性平均自由程, 当 Al_2O_3 中存在 Al 空位缺陷时的弹性平均自由程最大, 存在 O 空位缺陷时的非弹性平均自由程最大. 基于优化后的蒙特卡罗模拟算法, 研究了空位缺陷概率对 SEY 的影响. 结果表明, 当 O 空位缺陷和 Al 空位缺陷概率从 1% 增加到 10% 时, 入射电子能量大于 100 eV 时, 二次电子发射系数随之降低. 相同缺陷概率下, O 空位缺陷对二次电子发射特性的影响比 Al 空位缺陷更为显著.

参考文献

- [1] Seiler H 1983 *J. Appl. Phys.* **54** R1
- [2] Joe H E, Lee W S, Jun M B G, Park N C, Min B K 2018 *Ultramicroscopy* **184** 37
- [3] Chai K, Lu Q, Song Y, Gong X, Li A, Zhang Z 2024 *Vacuum* **221** 112869
- [4] Tao S X, Chan H W, Van Der Graaf H 2016 *Materials* **9** 1017
- [5] Chang C 2018 *Chin. Sci. Bull.* **63** 1390 (in Chinese) [常超 2018 科学通报 **63** 1390]
- [6] Hu T C, Zhu S K, Zhao Y N, Sun X, Yang J, He Y, Wang X B, Bai C J, Bai H, Wei H, Cao M, Hu Z Q, Liu M, Cui W Z 2022 *Chin. Phys. B* **31** 047901
- [7] Kirby R E, King F K 2001 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **469** 1
- [8] Lin S, Yan Y J, Li Y D, Liu C L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 147902 (in Chinese) [林舒, 闫杨娇, 李永东, 刘纯亮 2014 物理学报 **63** 147902]
- [9] Li S, Chang C, Wang J G, Liu Y S, Zhu M, Guo L T, Xie J L 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 137701 (in Chinese) [李爽, 常超, 王建国, 刘彦升, 朱梦, 郭乐田, 谢佳玲 2015 物理学报 **64** 137701]
- [10] Zhou Q H, Dong Y, Dong Z W, Zhou H J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 085201 (in Chinese) [周前红, 董焯, 董志伟, 周海京 2015 物理学报 **64** 085201]
- [11] He J, Yang J, Zhao W, Long J, Lan C, Liu E, Chen X, Li J, Yang Z, Dong P, Wang T, Shi J 2020 *Appl. Surf. Sci.* **515** 145990
- [12] González L A, Larciprete R, Cimino R 2016 *AIP Adv.* **6** 095117
- [13] Brillson L J, Foster G M, Cox J, Ruane W T, Jarjour A B, Gao, H, Von Wenckstern H, Grundmann M, Wang B, Look D C, Hyland A, Allen M W 2018 *J. Electron. Mater.* **47** 4980
- [14] Sun X L, Goss S H, Brillson L J, Look D C, Molnar R J 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 6729
- [15] Taha M, Abdelhay R A, Khedr M H 2022 *Optik* **271** 170125
- [16] Heo S, Cho E, Lee H I, Park G S, Kang H J, Nagatomi T, Choi P, Choi B D 2015 *AIP Adv.* **5** 077167
- [17] Hussain A, Mian S A, Ahmed E, Jang J 2023 *J. Mol. Model* **29** 393
- [18] Nguyen H K A, Sanati M, Joshi R P 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 123301
- [19] Li S T, Nie Y J, Min D M, Pan S M 2017 *Trans. Chin.*

- Electrotech. Soc.* **32** 1 (in Chinese) [李盛涛, 聂永杰, 闵道敏, 潘绍明 2017 电工技术学报 **32** 1]
- [20] Zhang G J, Su G Q, Song B P, Mu H B 2018 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **25** 2321
- [21] Wang Y L, Craven M, Yu X T, Ding J, Bryant P, Huang J, Tu X 2019 *ACS Catal.* **9** 10780
- [22] Diao Y, Wang H, Chen B, Zhang X, Shi C 2023 *Appl. Catal., B* **330** 122573
- [23] Quantum ESPRESSO <https://www.quantum-espresso.org/> (accessed 8 March 2023)
- [24] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [25] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [26] Hussain A, Yang L H, Zou Y B, Mao S F, Da B, Li H M, Ding Z J 2020 *J. Appl. Phys.* **128** 015305
- [27] Yater J E 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 050901
- [28] Zhang J, Niu Y, Yan R Q, Zhang R Q, Cao M, Li Y D, Liu C L, Zhang J W, Luo W 2024 *J. Appl. Phys.* **135** 013301
- [29] Waidmann S, Knupfer M, Arnold B, Fink J, Fleszar A, Hanke W 2000 *Phys. Rev. B* **61** 10149
- [30] Polak M P, Morgan D 2021 *Comput. Mater. Sci.* **193** 110281
- [31] Drouin D, Hovington P, Gauvin R 1997 *Scanning* **19** 20
- [32] Czyzewski Z, MacCallum D O N, Romig A, Joy D C 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 3066
- [33] Tho T H, Nguyen-Truong H T 2019 *J. Phys. Condens. Matter.* **31** 415901
- [34] Zhang C M, Jiang Y, Yin D F, Tao H J, Sun S P, Yao J G 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 076101 (in Chinese) [张朝民, 江勇, 尹登峰, 陶辉锦, 孙顺平, 姚建刚 2016 物理学报 **65** 076101]

Analysis of effect of bulk vacancy defect on secondary electron emission characteristics of Al_2O_3 *

Zhang Jian-Wei^{1)†} Niu Ying¹⁾ Yan Run-Qi²⁾ Zhang Rong-Qi¹⁾
Cao Meng²⁾ Li Yong-Dong²⁾ Liu Chun-Liang²⁾ Zhang Jia-Wei¹⁾

1) (School of Electrical Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

2) (Key Laboratory for Physical Electronics and Devices of the Ministry of Education, School of Electronic Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 26 April 2024; revised manuscript received 6 June 2024)

Abstract

Based on the combination of the first-principles and Monte Carlo method, the effect of vacancy defect on secondary electron characteristic of Al_2O_3 is studied in this work. The density functional theory (DFT) calculation results show that the band structure changes when the vacancy defects exist. The existence of Al vacancy defects results in a decrease in band gap from 5.88 to 5.28 eV, and in Fermi level below the energy of the valence band maximum as well. Besides, the elastic mean free paths and inelastic mean free paths of electrons in different crystal structures are also obtained. The comparison shows that the inelastic mean free path of electrons in Al_2O_3 with O vacancy defects is much larger than those of Al_2O_3 without defects and Al_2O_3 with Al vacancy defects. When the energy of electrons is smaller than 50 eV, the inelastic mean free path of electrons in Al_2O_3 without defects is longer than that in Al_2O_3 with Al vacancy defects. The elastic mean free path of electrons slightly increases when the vacancy defects exist, and the elastic mean free path of electrons in Al_2O_3 with Al vacancy defects is the largest. In order to investigate the secondary electron emission characteristics under different vacancy defect ratios, an optimized Monte Carlo algorithm is proposed. When the ratio between O vacancy defect and Al vacancy defect increases, the simulation results show that the maximum value of secondary electron yield decreases with the ratio of vacancy defect increasing. The existence of O vacancy defects increases the probability of inelastic scattering of electrons, so electrons are difficult to emit from the surface. As a result, comparing with Al vacancy defect, the SEY of Al_2O_3 decreases greatly under the same ratio of O vacancy defect.

Keywords: secondary electron, vacancy defects, Monte Carlo, density functional theory

PACS: 79.20.Hx

DOI: 10.7498/aps.73.20240577

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52307186), the Natural Science Basic Research Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2023-JC-QN-0585), and the Youth Innovation Scientific Research Program of the Education Department of Shaanxi Province, China (Grant No. 23JP104).

† Corresponding author. E-mail: zhangjianwei@xaut.edu.cn

体空位缺陷对氧化铝二次电子发射特性的影响分析

张建威 牛莹 闫润圻 张荣奇 曹猛 李永东 刘纯亮 张嘉伟

Analysis of effect of bulk vacancy defect on secondary electron emission characteristics of Al_2O_3

Zhang Jian-Wei Niu Ying Yan Run-Qi Zhang Rong-Qi Cao Meng Li Yong-Dong Liu Chun-Liang
Zhang Jia-Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 157902 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240577

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240577>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

氧化铝表面二次电子发射抑制及其在微放电抑制中的应用

Secondary electron emission suppression on alumina surface and its application in multipactor suppression

物理学报. 2023, 72(10): 107901 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222404>

介质材料二次电子发射特性对微波击穿的影响

Influence of secondary electron emission characteristic of dielectric materials on microwave breakdown

物理学报. 2020, 69(8): 087901 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200026>

非晶态碳薄膜对金属二次电子发射的影响

Effect of amorphous carbon film on secondary electron emission of metal

物理学报. 2024, 73(4): 047901 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231604>

电子非麦氏分布的二次电子发射磁化鞘层特性

Characteristics of non-Maxwellian magnetized sheath with secondary electron emission

物理学报. 2021, 70(24): 245201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211061>

二次电子发射对系统电磁脉冲的影响

Effect of secondary electrons on SGEMP response

物理学报. 2021, 70(16): 165201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210461>

基于密度泛函理论的外电场下 $\text{C}_5\text{F}_{10}\text{O}$ 的结构及其激发特性

Structure and excitation characteristics of $\text{C}_5\text{F}_{10}\text{O}$ under external electric field based on density functional theory

物理学报. 2020, 69(1): 013101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191455>