

金刚石薄膜中二次电子运输的蒙特卡罗模拟

李鹏[†] 许州 黎明 杨兴繁

(中国工程物理研究院应用电子学研究所, 绵阳 621900)

(2011年5月6日收到; 2011年8月18日收到修改稿)

本文通过编写的二维 MATLAB 蒙特卡罗程序, 对倍增的二次电子在金刚石薄膜中的运输特性进行了初步模拟. 研究表明: 二次电子的迁移率对温度 and 外加电场的大小很敏感, 在杂质浓度比较低时 ($< 10^{17}/\text{cm}^{-3}$) 受杂质浓度的影响不大. 模拟得到的二次电子的饱和速度为 $1.88 \times 10^7 \text{ cm/s}$, 无外加电场时的迁移率为 $3732 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. 同时, 通过对二次电子束团在金刚石薄膜中的整体运输特性的模拟, 证明了束团电荷密度在应用要求的范围内时, 空间电荷力的影响可以忽略不计.

关键词: 金刚石薄膜二次电子倍增光阴极, 蒙特卡罗方法, 二次电子运输

PACS: 85.60.Ha, 79.20.Hx, 87.55.Kh, 72.20.Dp

1 引言

随着加速器技术的发展, 直线电子加速器系统, 譬如自由电子激光 (FEL)^[1]、能量回收型直线加速器 (ERL)^[2]、重离子加速器的电子冷却环^[3]等, 都需要能提供高平均电流和高亮度电子束的阴极. 传统的光阴极主要是金属光阴极和半导体光阴极^[4]. 金属光阴极真空度要求低、寿命长, 但是它的量子效率 (QE) 却很低, 并且需要紫外光驱动. 半导体光阴极的主要优点是具有高的量子效率 (QE), 然而它对环境非常敏感, 极易受污染. 为了满足对阴极的高要求, 近年来人们发展了一种新型的金金刚石薄膜倍增光阴极 (DAP)^[5-8]. 最新的实验结果表明, 它能将电流倍增 40 倍, 束团电荷量达到 $50 \text{ pC}/0.5 \text{ mm}^2$ ^[9].

DAP 的主要的物理原理如下^[10]. 传统光阴极发射出来的初次电子束被加速到 10 keV , 撞击到金刚石薄膜上, 穿透膜表面的金属层, 在金刚石中发生非弹性散射, 初次电子能量全部损失, 产生电子-空穴对. 电子-空穴对在外加电场的作用下分离, 电子漂移到金刚石膜的另一表面. 这一表面被氢化, 以便产生负的电子亲和势^[11](NEA). 最后, 电子从

表面逃逸, 发射到电子枪中. 这一物理现象包含了三个物理过程: 二次电子的产生, 二次电子的运输和二次电子的发射.

本文使用 MATLAB 编写的一个蒙特卡罗程序, 模拟了单个二次电子的运输性质, 同时还模拟了二次电子束团的整体运输性质.

2 计算方法与模型

蒙特卡罗方法常常应用于半导体粒子运输性质的研究^[12]. 对电子在金刚石中的运输的模拟, 是通过追踪电子在固体中的微观运动过程来实现的. 这个微观过程包含两种随机过程: 1) 自由飞行时间 (即两次连续碰撞之间的时间间隔, 在这个过程中, 仅受外加电场的加速作用); 2) 散射事件 (即散射属于何种类型、散射后载流子的能动能量如何改变).

2.1 散射事件

电子主要通过声子散射损失能量, 因为在金刚石薄膜倍增光阴极中使用的是纯度较高的单晶, 所以, 在我们模拟中考虑的散射类型为光学声

[†] E-mail: burnlife@sina.com

子的发射和吸收, 电离杂质的散射, 以及声学声子的散射^[13].

非极化光学声子的发射和吸收的散射概率为^[14]

$$\tau_{\text{nop,e}} = \frac{\sqrt{2}\pi\hbar^2\rho}{D_0^2 m^{3/2}} \times \frac{\hbar\omega_0}{[1+n(\beta\hbar\omega_0)](E-\hbar\omega_0)^{1/2}}, \quad (1)$$

$$\tau_{\text{nop,a}} = \frac{\sqrt{2}\pi\hbar^2\rho}{D_0^2 m^{3/2}} \times \frac{\hbar\omega_0}{n(\beta\hbar\omega_0)(E+\hbar\omega_0)^{1/2}}, \quad (2)$$

其中, e 和 a 分别代表发射和吸收散射, E 是电子的能量. 其他参数见表 1. 在电子与光学声子散射以后, 我们假定电子仅能量改变, 其运动方向不变.

在室温下, 声学声子散射弛豫时间的一阶近似为^[13]

$$\tau_{\text{ac}} \approx \frac{\pi\hbar^3\rho\tilde{v}_s^2}{4m\Xi^2k(E)}, \quad (3)$$

其中, $k(E)$ 是电子的动量. 声学声子散射仅改变电子的方向, 不改变电子的能量.

当声子能量比带隙能量要小时, 电离杂质散射概率可以由量子力学的计算结果的渐进形式得到

$$\tau_{\text{ii}}(E) \approx \frac{\alpha_{\text{fs}}m^2c}{4\pi\hbar^2} \left(\frac{K_0^2}{N_i} \right) \frac{k_{\text{B}}T}{\ln 2} \times \frac{\sqrt{E(E+E_{\text{g}})}}{E_{\text{g}}^2}, \quad (4)$$

其中, T 代表金刚石的温度, 单位为 K. E_{g} 是金刚石带隙能量. 电离杂质散射因为包含了库仑力, 电子散射末态运动方向不是均匀分布, 而是仅在运动方向有一个小角度改变, 即方位角 φ 均匀分布, 而极角 θ 被一随机数 r 改变^[14],

$$\cos\theta \equiv \frac{rE^2 - E_{\text{ii}}^2}{rE^2 + E_{\text{ii}}^2}, \quad (5)$$

其中 E_{ii} 是电离能量, 单位 eV, 它的定义为

$$E_{\text{ii}} = \frac{q^2}{4\pi K_{\text{s}}\epsilon_0} \left(\frac{4\pi}{3} N_{\text{A}}^- \right)^{1/3}. \quad (6)$$

2.2 自由飞行时间

在本文中, 自由飞行时间的确定使用阶梯 Γ 值的“自散射”的方法. 散射事件选择的概率正比于

它的散射概率, 所以, 总的平均自由程为

$$\lambda = \Gamma^{-1} = \tau_{\text{self}}^{-1} + \sum_{j=1}^4 \tau_j^{-1} \equiv \sum_{j=1}^5 \tau_j^{-1}, \quad (7)$$

其中, Γ 是常数, 表示总的散射概率. τ_j 是上面介绍的四种散射的概率. 由 (7) 式可以得到第 i 个散射事件发生的概率 $P_i(\epsilon)$ 为

$$P_k = \frac{\sum_{j=1}^k \tau_j^{-1}}{\sum_{j=1}^5 \tau_j^{-1}} \equiv \Gamma \sum_{j=1}^k \tau_j^{-1}. \quad (8)$$

一个电子在半导体中输运的基本模拟过程如下: 首先, 生成一个均匀分布的随机数 $0 \leq r \leq 1$, 由此可以得到自由飞行时间 $t = -\Gamma \ln(r)$. 在自由飞行过程中, 电子仅受到外加电场的加速作用, 因此它的能量和动量都可以确定. 在自由飞行完成后, 由开始给出的随机数 r , 判断散射事件的概率 P_k : $P_k < r \leq P_{k+1}$, 这样就决定了散射事件类型. 最后, 计算散射后电子的末态 k' . 重复这个基本过程, 直至模拟截止.

表 1 金刚石中计算各种散射概率的参数及其值

参数	单位	值
普朗克常数	$\hbar/(\text{MeV} \cdot \text{fm})$	6.58×10^{-22}
玻尔兹曼的常数	$k_{\text{B}}/(\text{eV/K})$	1/11605
精细常数	α_{fs}	1/137
电子有效质量	$m/(0.29 \text{ eV}/c^2)$	0.57 m_0
声子能量	$\hbar\omega_0/\text{eV}$	0.163
密度	$\rho/(\text{g}/\text{cm}^3)$	3.515
金刚石带隙	E_{g}/eV	5.47
光学形变势	$D_0/(\text{eV}/\text{nm})$	209.96
声子速度	$\tilde{v}_s/(\text{m}/\text{s})$	18000
声学形变势	Ξ/eV	8.4
介电常数	K_{s}	5.7
中性杂质密度	$N_{\text{A}}/(\text{cm}^3)$	$\approx 10^{14}$

3 模拟结果与讨论

3.1 单个二次电子输运模拟结果

首先我们模拟了单个二次电子的二维输运性质. 在金刚石薄膜中产生的二次电子的初始能量小于带隙能量 E_{g} (5.47 eV), 并且由于碰撞出二次电子的初始电子能量较低, 二次电子的运动方向垂直于初级电子运动方向. 在模拟过程中, 我们假定电

子的动量是三维的, 并且当电子的纵向坐标 $z \leq 0$ 时, 电子丢失. 根据蒙特卡罗方法的原理, 记录一个电子通过金刚石薄膜 N 次的结果, 然后作统计平均, 可得到单个二次电子的性质.

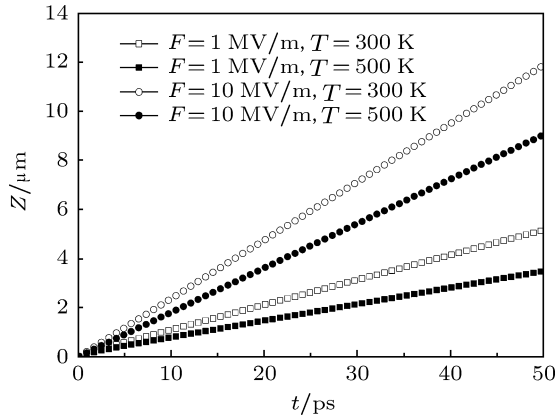


图1 漂移距离 Z 与漂移时间 t 的关系

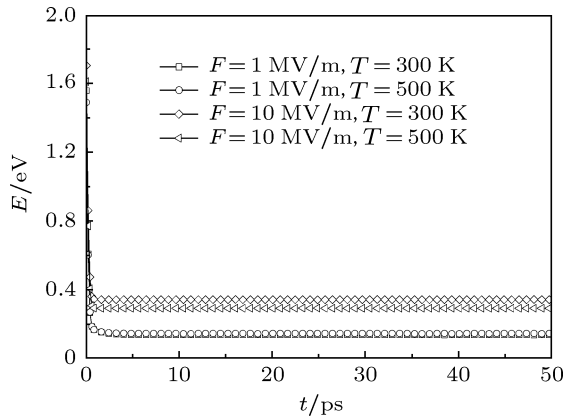


图2 二次电子能量 E 与漂移时间 t 的关系

图 1 为外加电场 F 分别为 1 MV/m 和 10 MV/m, 金刚石薄膜温度 T 分别为 300 K 和 500 K 时, 电子漂移距离 Z 与漂移时间 t 的关系. 图 2 是二次电子能量 E 随漂移时间 t 的变化情况. 从这两个图中, 我们发现漂移距离 Z 对外加电场 F 和温度 T 都比较敏感. 二次电子能量 E 受温度的影响不大, 但对外加电场 F 比较敏感, 在 10 MV/m 时比在 1 MV/m 时大得多. 这与定性的分析的结果是一致的: 外加电场越大时, 电子在自由飞行时得到的能量越多, 电子的能量也越大. 从图 2 我们可以看出, 在外加电场和声子碰撞的相互作用下, 电子的能量在 1 ps 附近达到动态平衡. 例如, 在 $F = 10$ MV/m, $T = 300$ K 时, 平衡能量 E 为 0.343 eV.

从图 1 还可以看出, 电子的漂移距离随着漂移时间几乎成线性增长, 这表明电子迁移率 μ 受外

加电场 F 和温度 T 的影响也很大. 为了更好的研究它们的关系, 我们将二次电子迁移率 μ 随外加电场 F 和温度 T 的变化情况表示在图 3 和图 4 中.

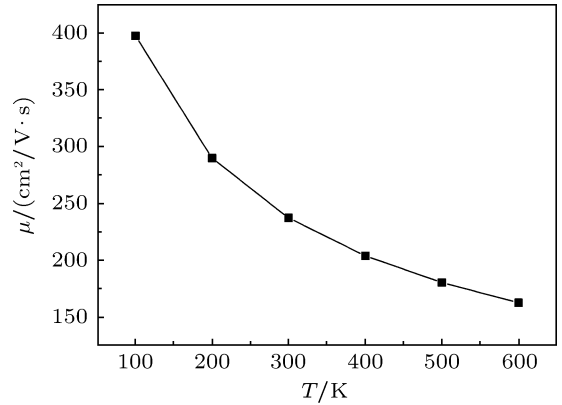


图3 二次电子迁移率 μ 与金刚石温度 T 的关系. 此时外加电场为 $F = 10$ MV/m

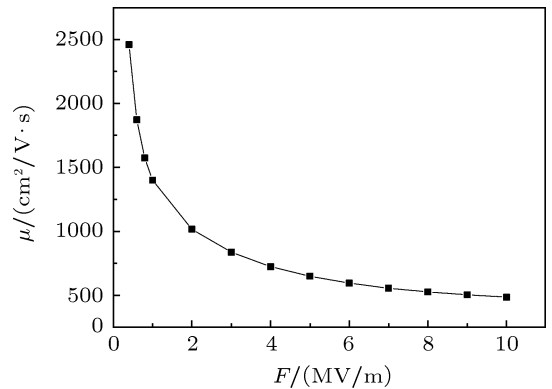


图4 二次电子迁移率 μ 与外加电场 F 的关系. 此时金刚石温度为 $T = 300$ K

从图 3 可以看出, 二次电子的迁移率随着温度 T 的增加单调递减, 可以定性的解释为, 当金刚石的温度增高时, 电子与声子的碰撞概率增加, 导致电子的迁移率变小. 同时由图 4 可知, 二次电子的迁移率随着外加电场 F 增加而单调增加.

迁移率与外加电场的关系为

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \mu_0 F / v_s}, \quad (9)$$

其中, F 表示外加的电场, μ_0 代表没有外加电场时的漂移率, v_s 代表饱和速度. 根据 (9) 式对图 4 的结果进行拟合, 得到 $\mu_0 = 3732$ cm²/V.s, $v_s = 1.88 \times 10^7$ cm/s.

饱和速度理论公式为^[15]

$$v_s = \left\{ \frac{3\hbar\omega_0}{4m} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_0\right) \right\}^{1/2}. \quad (10)$$

使用表 1 中的参数, 理论计算的结果为 $v_s =$

1.94×10^7 cm/s, 与我们的模拟结果相差不大. 另外, 独立式的 CVD 金刚石单晶测得的结果为^[16] $v_s = 1.0 \times 10^7$ cm/s 和 $\mu_0 = 2100$ cm²/V·s, 天然金刚石测得的结果为^[17] $v_s = 1.5 \times 10^7$ cm/s 和 $\mu_0 = 2000$ cm²/V·s.

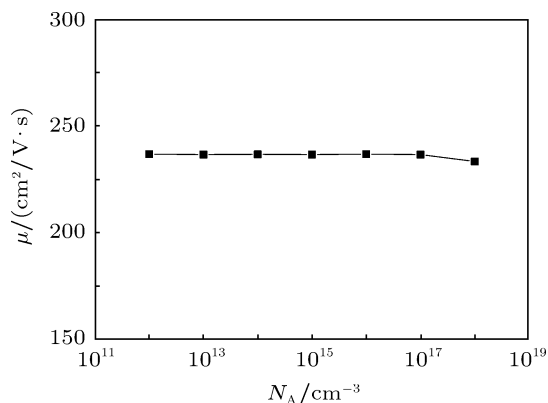


图5 二次电子迁移率 μ 与杂质浓度密度 N_A 的关系. 此时金刚石温度 $T = 300$ K, 外加电场 $F = 10$ MV/m

另一个重要的参数是杂质浓度密度 N_A , 我们

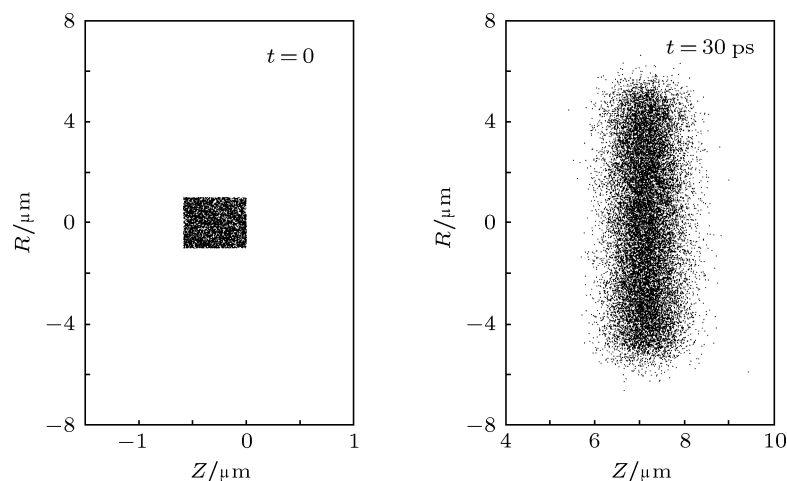


图6 初级电子束团形状和 30 ps 时二次电子束团形状

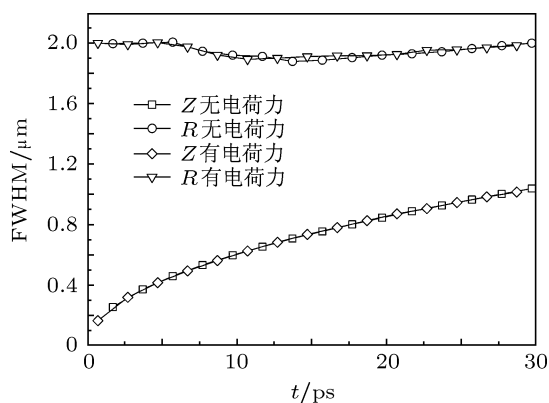


图7 初在有、无空间电荷力的情况下, 二次电子束团横向和纵向半高宽 FWHM 与漂移时间 t 的关系

将它与迁移率 μ 的关系表示在图 5 中. 模拟的结果表明, 在我们研究的低杂质浓度 ($< 10^{17}$ / cm⁻³) 范围内, N_A 的影响并不大.

3.2 二次电子束团整体输运模拟结果

3.1 节给出了单个电子在金刚石薄膜中的输运性质, 本小节将对从传统光阴极出来的初级电子束团在金刚石膜内产生的二次电子束团的整体输运性质进行模拟. 初级电子束团横向和纵向都是均匀分布, 横向的半径为 $r_{\max} = 1$ μm, 纵向的长度为 $L_z = 10$ fs (0.585 μm). 我们假定一个初级电子产生 218^[12] 个二次电子, 并且假定初级电子密度与一个电荷量为 120 pC, 横向均匀分布, 长度为 $r_{\max} = 6$ mm, 纵向高斯分布, 方均根为 $\sigma_z = 90$ fs 的束团密度相等. 在模拟中, 同时考虑了有、无空间电荷力的情况下电子束团的输运性质. 其中, 电荷力引起的二维泊松方程通过有限微分法求解, 电荷密度通过 cloud-in-cell 方法得到.

图 6 是 $t = 0$ 时初级电子束团形状和 $t = 30$ ps 时, 二次电子束团形状.

模拟结果表明, 随着二次电子束团在横纵向同时漂移和扩散, 束团在很短的时间内 (< 1 ps) 从均匀分布变成高斯分布. 为了更好的研究束团的连续变化情况, 我们使用束团半高宽 (FWHM) 作为束团的长度和宽度, 它的定义为束团密度为密度最大值一半时的宽度. 图 7 是横、纵向半高宽与漂移时间 t 的关系, 其中 “no poisson” 代表不考虑空间电荷力的情况, “with poisson” 代表考虑了空间电荷力的情况. 从图中我们可以看出, 束团的纵向半高宽

在 30 ps 内变为 1 μm , 而横向半高宽几乎不变. 同时我们发现, 在模拟采用的束团密度情况下, 空间电荷力的影响很小, 可以忽略不计. 这一结论与文献 [11] 中的分析是一致的.

4 结论

本文采用自编的 MATLAB 蒙特卡罗程序模拟了二次电子在金刚石中的输运. 模拟结果表明, 二次电子迁移率 μ 对金刚石的温度 T 和外加电

场 F 非常敏感, 而受低浓度范围内 ($< 10^{17}/\text{cm}^{-3}$) 的杂质浓度 N_A 的影响不大. 模拟所得的二次电子的饱和速度和无外加电场时的迁移率分别为 $v_s = 1.88 \times 10^7 \text{ cm/s}$, $\mu_0 = 3732 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. 通过对整个二次电子束团的输运性质的模拟, 发现束团的横向半高宽变化不大. 并且束团电荷密度在应用要求的范围内时, 空间电荷力可以忽略不计. 本文的研究有助于我们深入理解金刚石薄膜二次电子倍增光阴极中的物理过程, 为 DAP 的设计提供重要的参考.

-
- [1] Neil G R, Bohn C L, Benson S V, Biallas G, Douglas D, Dylla H F, Evans R, Fugitt J, Grippo A, Gubeli J, Hill R, Jordan K, Li R, Merminga L, Piot P, Preble J, Shinn M, Siggins T, Walker R, Yunn B 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 662
- [2] Gruner S M, Bilderback D, Bazarov I, Finkelstein K, Krafft G, Merminga L, Padamsee H, Shen Q, Sinclair C, Tigner M 2002 *Rev. Sci. Instrum.* **73** 1402
- [3] Balewski K, Brinkmann R, Derbenev Y, Floettmann K, Wesolowski P, Gentner M, Husmann D, Steier C 2000 *Nucl. Instrum. And Meth. A* **441** 274
- [4] Dowell D H, Bazarov I, Dunham B, Harkay K, Hernandez-Garcia C, Legg R, Padmore H, Rao T, Smedley J, Wan W 2000 *Nucl. Instrum. And Meth. A* **622** 685
- [5] Ben-Zvi I, Chang X, Johnson P D, Kewisch J, Rao T 2004 C-AD *Accelerator Physics Report C-A/AP/149*, Brookhaven National Lab
- [6] Chang X, Ben-Zvi I, Burrill A, Hulbert S, Johnson P, Kewisch J, Rao T, Smedley J, Segalov Z, Zhao Y 2005 in *Proceedings of 2005 Particle Accelerator Conference*, USA, May 16–20, 2005 p2251
- [7] Chang X, Ben-Zvi I, Burrill A, Grimes J, Rao T, Segalov Z, Smedley J 2007 in *Proceedings of Particle Accelerator Conference* USA, June 25–29, 2007 p2044
- [8] Chang X, Ben-Zvi I, Burrill A, Kewisch J, Muller E, Rao T, Smedley J, Wang E, Wang Y, Wu Q 2009 in *Proceedings of 2009 Particle Accelerator Conference*, Canada, May 4–8, 2009 p691
- [9] Chang X, Wu Q, Ben-Zvi I, Burrill A, Kewisch J, Rao T, Smedley J, Wang E D, Muller E M, Busby R, Dimitrov D 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 164801
- [10] Chang X 2005 *Ph.D. Thesis* (Stony Brook University) (USA)
- [11] Rameau J D, Smedley J, Muller E M, Kidd T E, Johnson P D 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 137602
- [12] Jacoboni C, Reggiani L 1983 *Rev. Mod. Phys.* **55** 645
- [13] Jensen K L, Yater J E, Shaw J L, Myers R E, Pate B B, Butler J E, Feygelson T 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 044509
- [14] Ridley B K 1999 *Quantum Processes in Semiconductors* (Clarendon: Oxford) p107
- [15] Ferry D K 2000 *Semiconductor Transport* (Taylor, Francis: London)
- [16] Deferme W, Bogdan A, Bogdan G, Haenen K, DeCeuninck W, Nesladek M 2004 *Phys. Status Solidi A* **204** 3017
- [17] Nava F, Canali C, Jacoboni C, Reggiani L, Kozlov S 1980 *Solid State Commun.* **33** 475

A Monte Carlo simulation of secondary electron transport in diamond

Li Peng[†] Xu Zhou Li Ming Yang Xing-Fan

(*Institute of Applied Electronics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

(Received 6 May 2011; revised manuscript received 18 August 2011)

Abstract

The diamond-amplifier photocathode (DAP) offers a new widely applicable way to generate high average-current, high brightness, and low thermal emittance electron beams. Physical processes with multiple parameters are important for the design of a reliable and efficient DAP. To perform a study in-depth, a 2D Monte Carlo model in MATLAB frame is built to simulate the secondary electron transport in diamond. This simulation gives some proofs that the drift velocity is sensitive to diamond temperature and electric field applied, but not sensitive to the low impurity density ($< 10^{17} / \text{cm}^{-3}$). As an appropriate result, the saturation velocity of secondary electron reaches 1.88×10^7 cm/s, and mobility without applied field is $3732 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. In addition, some properties of a secondary electron bunch transported in diamond are discussed, which indicate that the effect of space charge under our considered electron cloud density is small.

Keywords: diamond-amplifier photocathode, Monte Carlo method, secondary electron transport

PACS: 85.60.Ha, 79.20.Hx, 87.55.Kh, 72.20.Dp

[†] E-mail: burnlife@sina.com