

**W. LENKOW, E. REĆKO**

*Wyższa Szkoła Pedagogiczna w Częstochowie, Instytut Fizyki Al. Armii Krajowej 13/15*

## **Numeryczne wyznaczenie rozkładu pola elektrycznego na powierzchni gładkiego emitera polowego. Przybliżenie SSC**

### **1. Wstęp**

Możliwość określenia wielkości pola elektrycznego i jego rozkładu przy powierzchni ostrzowego emitera polowego ma duże znaczenie we wszystkich zagadnieniach, związanych z polową emisją elektronową i jonową, w szczególności w badaniach procesu parowania polowego i jonizacji polowej metodami mikroskopii jonowej (FIM) i sondy atomowej pojedynczych jonów (APFIM) [1,2,3]. W ciągu ostatnich 40 lat podano kilka propozycji analitycznego określenia rozkładu natężenia pola, od relatywnie prostych aproksymacji parabolicznej czy hiperbolicznej [4,5], po złożone modele, kombinujące potencjały kuli i stożka lub kuli i hiperboloidy obrotowej, szczególnie dobrze aproksymujące szerokokątowy rozkład pola na powierzchni emitera polowego poddanego intensywnej obróbce termicznej, najczęściej stosowanej w polowym mikroskopie elektronowym [6,7].

W wyniku rozwoju, w okresie ostatnich 15 lat, metod lokalnych badań polowych oraz mikroskopii jonowej i sondy atomowej, zaczęto powszechnie stosować regularne emitery polowe o promieniach krzywizny rzędu kilkudziesięciu nm, uzyskiwane najczęściej drogą polerowania elektrolitycznego w ściśle kontrolowanych warunkach [8,9]. Uzyskiwane w ten sposób emitery, najczęściej poddane delikatnej obróbce termicznej i procesowi umiarkowanego lub intensywnego parowania polowego, mają morfologię nie dającą się opisać prostymi formami wspomnianych wcześniej aproksymacji.

W prezentowanej pracy, podjęto próbę numerycznego obliczania natężenia pola elektrycznego przy powierzchni emitera, aproksymowanego odcinkiem kuli na podstawie stożkowej lub walcowej. Ten typ aproksymacji może stanowić dobre, pierwsze przybliżenie, publikowanych w ciągu ostatniej dekady morfologicznych form wierzchołkowej części emiterek stosowanych w FIM i APFIM [10,11].

## 2. Instrumentarium komputerowe i programowe

Całość obliczeń została wykonana przy użyciu mikrokomputera IBMPC/AT 386 z koprocesorem matematycznym CYRIX 387-25, wyposażonego w dyski twarde HDD 50 – 120 MB. Jako urządzenie peryferyjne użyto ploter Roland DXY 880A. Obliczenia wykonano przy użyciu programu „OPTEL 1.0” [12], przeznaczonego do modelowania zagadnień z zakresu makroskopowej optyki elektronowej i jonowej. Został on opracowany w OBREP w Warszawie. Autorami programu są: W. Jeute, B. Zawadzka, D. Strojewski.

### Użyta metoda modelowania

Pole elektryczne opisywane jest dwuwymiarowym różniczkowym równaniem Laplace'a:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0 \quad (1)$$

Równanie to jest rozwiązywane metodą różnicową tzw. metodą pięciopunktową [13,14]. Istota jej polega na zamianie równania różniczkowego odpowiadającym mu równaniem różnicowym. Równanie to otrzymuje się przez zastąpienie pochodnych ich przybliżeniami, określonymi przez wyrażenia różnicowe skończone. Rozwiązanie tego zagadnienia prowadzi do równania:

$$U_1 + U_2 + U_3 + U_4 - 4U_0 + \frac{4}{2r_0}(U_2 + U_4) = 0 \quad (2)$$

poza osią symetrii oraz

$$U_1 + U_3 + 4U_2 - 6U_0 = 0 \quad (3)$$

na osi symetrii, gdzie:  $U_1, U_2, U_3, U_4, U_0$  — wartości potencjału w odpowiednich punktach obszaru. W rezultacie otrzymuje się układ równań algebraicznych, który rozwiązuje się metodą iteracyjną. Polega ona na wielokrotnym obliczeniu  $U_0$  dla każdego z węzłów sieci. Proces iteracji powtarza się aż do uzyskania błędu mniejszego od zadanej liczby. W naszym przypadku liczba iteracji wynosiła od 750 do 1000. Dokładność rozwiązania zależy od dwóch czynników:

- od błędu aproksymacji równania różniczkowego równaniem różnicowym  $\varepsilon_1$
- od błędu rozwiązania układu równań różnicowych  $\varepsilon_2$

Pierwszy błąd został oszacowany na:

$$\varepsilon_1 < \frac{M_4 h^2 \phi^2}{24} \quad (4)$$

gdzie:  $M_4$  — maksymalna wartość bezwzględna pochodnych czwartego rzędu rozwiązania dokładnego

$\phi$  — promień koła, w który wpisany jest badany obszar

$h$  — stała sieci

Błąd ten można zmniejszać przez zwiększenie liczby węzłów sieci. Błąd rozwiązania układu równań  $\varepsilon_2$  maleje ze wzrostem liczby iteracji. Ilość iteracji potrzebna do zmniejszenia tego błędu o rząd wielkości jest proporcjonalna do  $1/h$ .

W celu wyznaczenia rozkładu pola elektrycznego należy wprowadzić dane określające brzeg obszaru (śląd przekroju elektrod), jego maksymalne rozmiary oraz wartość potencjału na brzegu obszaru. Program, w oparciu o dane, tworzy zbiór węzłów sieci obliczeniowej i wyznacza wartość potencjałów w oczkach sieci. Maksymalna ilość węzłów sieci obliczeniowej wynosi 6000. Można powiększyć dokładność obliczeń wcześniej wykonywanych przez zorganizowanie nowej sieci obliczeniowej dla fragmentu analizowanego obszaru. Niezbędne dane są automatycznie pobierane z rozkładu bazowego. Program oblicza współrzędne linii ekwipotencjalnych o zadanym skoku. Wyniki są przedstawione w postaci graficznej.

### 3. Rezultaty

#### 3.1. Konfiguracja emiterów i kąt zbieżności

Obliczenia przeprowadzono dla emiterów będących złożeniem wycinka kuli na podstawie stożkowej o połówkowym kącie zbieżności  $\alpha$  równym  $0^\circ$ ,  $5^\circ$  i  $25^\circ$  i o promieniu krzywizny wierzchołka  $r$  wynoszącym 15 i 61 nm, przy zmienianej w szerokich granicach długości podstawy emitera  $l$ .

Dla celów porównawczych wykonano także częściowe obliczenia dla emitera w kształcie paraboloidy obrotowej o promieniu krzywizny wierzchołka 61 nm. Rys. 1 przedstawia schemat konfiguracji obliczanego obiektu. Badany emiter na potencjale  $+V$ , otoczony jest sferycznym ekranem o promieniu  $R = 0,1$  m i potencjale 0 (rys. 1a). Rys. 1b i 1c przedstawia schemat geometrii emitera odpowiednio dla konfiguracji parabolicznej i stożkowo sferycznej.

Na rys. 2 przedstawiono kątowy rozkład natężenia pola elektrycznego przy powierzchni emitera w odniesieniu do pola na jego osi symetrii  $E_o$ . Obliczenia przeprowadzono dla  $r = 61$  nm,  $l = 12.800$  nm,  $\alpha = 0, 5, 25^\circ$  oraz dla paraboloidy obrotowej. Połówkowy kąt środkowy  $\phi$  zmieniano w granicach  $0 - 80^\circ$ .

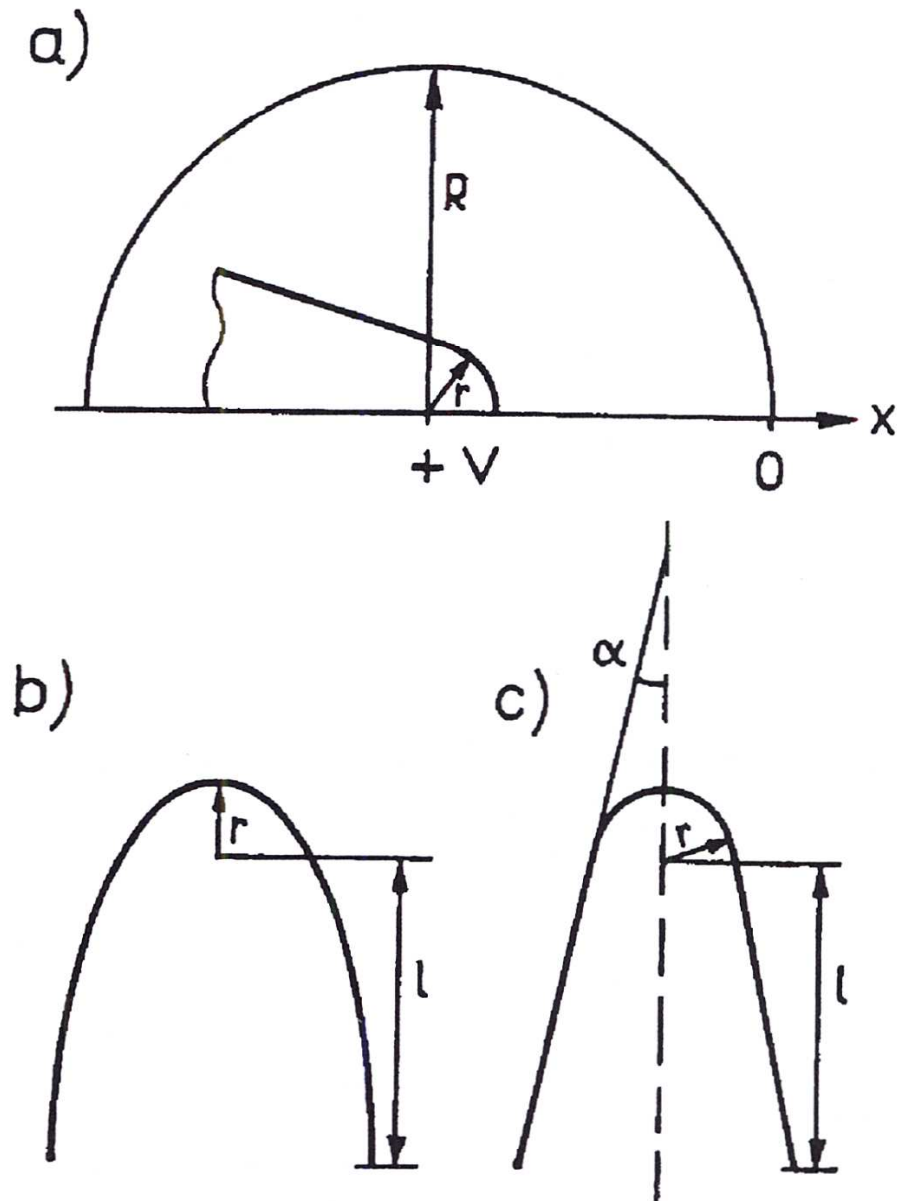
Jak widać nawet dla najbardziej krytycznej formy emitera ( $\alpha = 25^\circ$ ) można oczekiwać stałości pola w obszarach oddalanych od wierzchołka emitera o kąt  $\phi = 10^\circ$ . W dalszym ciągu pracy zawsze wyznaczano natężenie pola na osi emitera.

#### 3.2. Zależność rozkładu pola elektrycznego od geometrii emitera w aproksymacji SSC

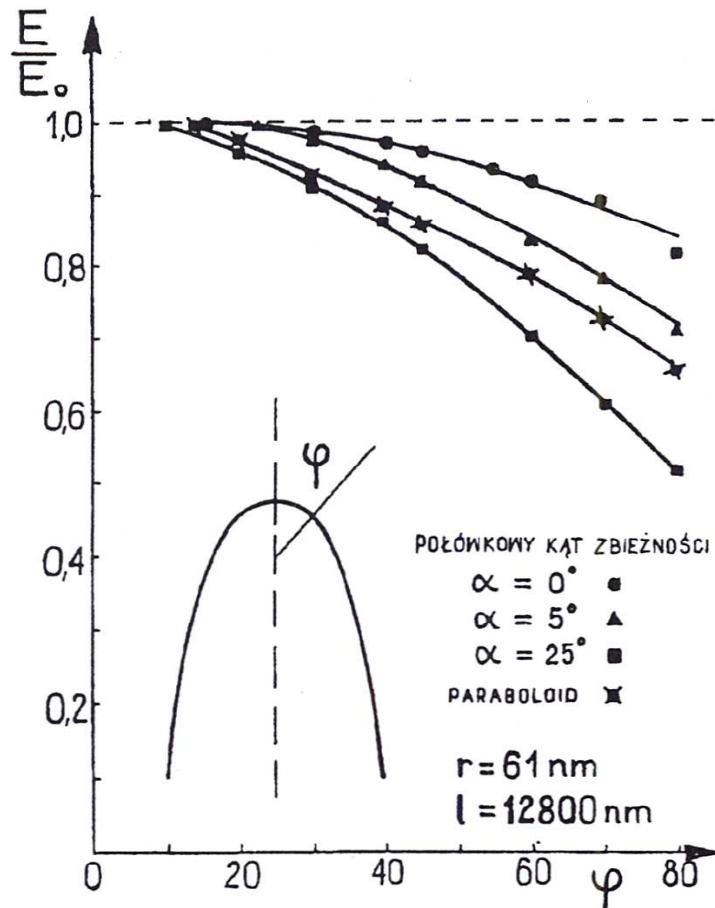
Na rys. 3 przedstawiono zależność  $\frac{E_o}{E_h}$ , gdzie  $E_o$  — natężenie pola na wierzchołku emitera,  $E_h$  — natężenie pola osiowego dla hemisfery, w funkcji logarytmu sumy długości i promienia emitera.

Badania przeprowadzono dla dwóch granicznych promieni emitera  $r = 15$  i 61 nm, dla połówkowych kątów zbieżności bazy  $0^\circ$  (hemisfera na cylindrze),  $5^\circ$  oraz  $25^\circ$ . Przy-

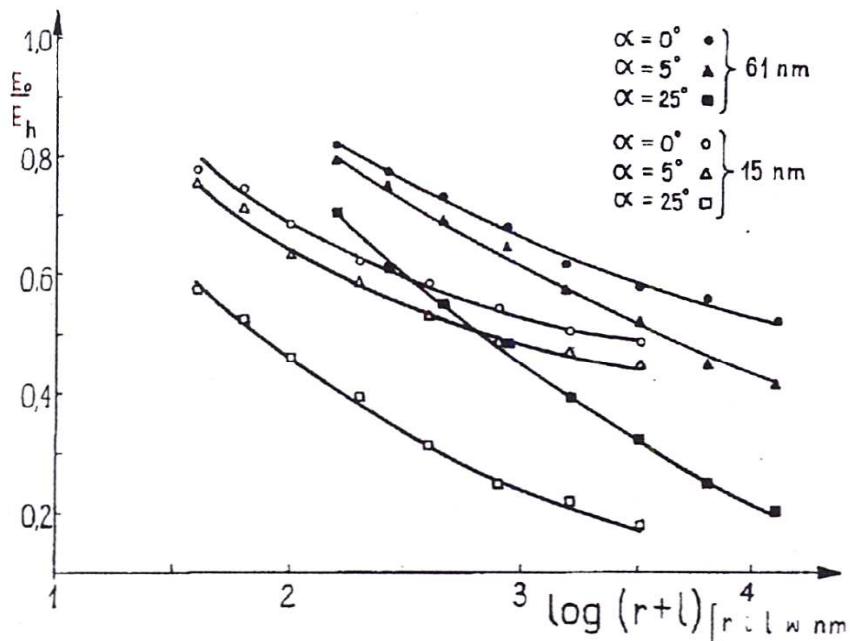
jęty model będziemy określać dalej jako przybliżenie SSC (sphere segment on cone). Długość podstawy  $l$  zmieniano do wartości powyżej 200  $r$ . Doskonale widoczny jest ekranujący wpływ podstawy emitera, szczególnie dla emiterek o małym promieniu krzywizny i dużym kącie zbieżności.



**Rys. 1.** Schemat konfiguracji geometrycznej do obliczania natężenia pola emitera ostrzowego. a) Konfiguracja elektrod. Emiter o promieniu  $r$  jest umieszczony w centrum sfery o promieniu  $R = 0,1$  m. Umowny potencjał sfery wynosi 0. b) Schemat emitera w aproksymacji parabolicznej.  $r$  — promień krzywizny na osi emitera równy podwójnej wartości ogniskowej paraboli,  $l$  — długość podstawy emitera. c) Schemat emitera w aproksymacji SSC (sphere segment on cone),  $r$  — promień krzywizny wierzchołka emitera,  $\alpha$  — połowkowy kąt zbieżności podstawy emitera.



Rys. 2. Rozkład kątowy natężenia pola dla różnych form emitera ostrzowego. Wartość względna w odniesieniu do pola na osi emitera.



Rys. 3. Zależność natężenia pola na osi emitera  $E_0$ , w stosunku do natężenia pola półkuli  $E_h$ , od całkowitej długości emitera. Obliczenia wykonano w aproksymacji SSC dla emiterów o promieniu krzywizny 15 i 61 nm dla różnych kątów zbieżności podstawy

Dla praktycznych celów obliczeniowych, w szczególności przy zastosowaniu rachunków numerycznych do obliczenia pól elektrycznych, otrzymywanych w skomplikowanych układach elektrod, bardzo wygodnie jest posługiwać się prostą formułą empiryczną.

$$E = \frac{V}{k_e r} \quad (5)$$

gdzie:  $E$  — pole na powierzchni emitera,

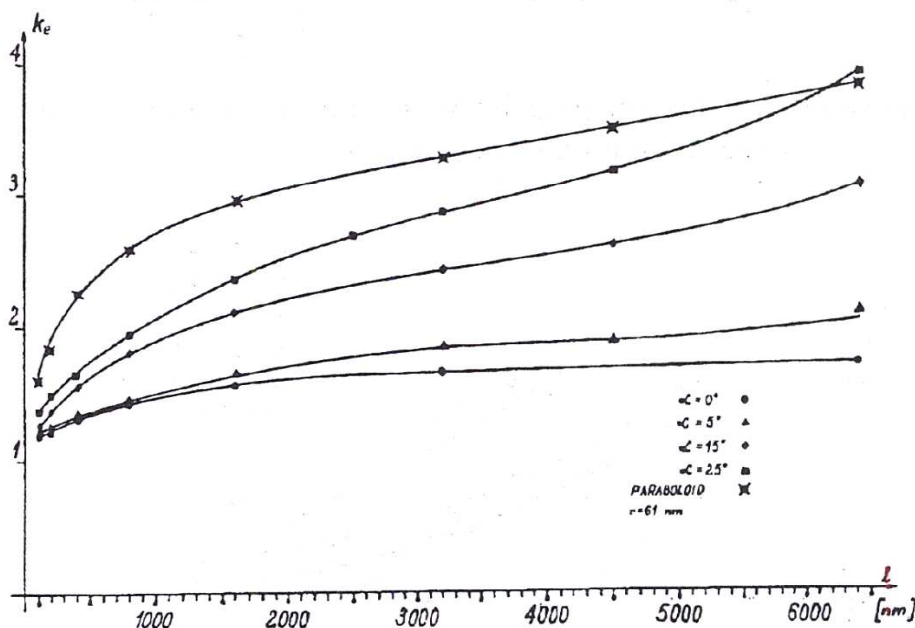
$V$  — potencjał,

$r$  — promień krzywizny wierzchołka emitera,

$k_e$  — geometryczny współczynnik pola, opisujący odstępstwo kształtu emitera ostrzowego od swobodnej kuli.

Znajomość wielkości  $k_e$ , określa przyczynek do natężenia pola pochodzący od kształtu emitera oraz konfiguracji wszystkich elektrod urządzenia, do których jest przyłożony określony układ potencjałów elektrycznych.

Na rys. 4 pokazano zależność współczynnika  $k_e$  od długości emitera  $l$ , dla promienia krzywizny  $r = 61$  nm i różnych wartości kątów  $\alpha$ . Dla porównania wyliczono także przebieg krzywej dla parabolicznej aproksymacji emitera ostrzowego.



Rys. 4. Zależność geometrycznego współczynnika natężenia pola  $k_e$  od długości emitera w aproksymacji SSC i parabolicznej dla różnych kątów zbieżności. Promień krzywizny emitera wynosi 61 nm.

#### 4. Krótka dyskusja i wnioski

W prezentowanej pracy, zajęto się jedynie emitarami o promieniu krzywizny od 15 do 61 nm. Dolna granica uwarunkowana jest pewnymi, ujawnionymi w czasie pracy

ograniczeniami programu „OPTEL 1.0”, górna zaś faktem, że we współczesnych badaniach z użyciem mikroskopii jonowej i sondy atomowej emiterzy o promieniach krzywizny większych niż 60 nm nie są używane do prac, wymagających szczególnie dokładnego szacowania wielkości pola. Dla tego zakresu promieni krzywizny autorzy dokonali oceny formy morfologicznej 25 emiterów, których mikrografy opublikowano w ciągu ostatnich 10 lat, dołączając do tego 15 mikrografów emiterów uzyskanych w naszym laboratorium. Na 40 ocenianych emiterów, 20 dało się opisać tylko przy użyciu aproksymacji SSC, [10, 15 – 21, 28] dla 9 można było zastosować aproksymację paraboliczną jedynie w części wierzchołkowej o długości  $l+r < 4r$  (max 250 nm) [15, 17, 22 – 25], 8 emiterów dało się aproksymować paraboloidą do długości  $4r < l+r < 10r$  (max 600 nm) [10,18,19,26 – 29], jedynie 3 emiterzy miały kształt paraboloidy do długości  $l > 20r$  [10,30,31]. Analiza wykresów na rys. 3 i rys. 4, prowadzi do wniosku, że przy realnych długościach podstawy, występujących w rzeczywistych emiterach, zastosowanie a priori aproksymacji SSC z odpowiednio dobranym kątem zbieżności prowadzi do znacznie mniejszych błędów niż zastosowanie aproksymacji parabolicznej.

Zwraca uwagę stosunkowo niska wartość współczynnika  $k_e$ , właściwa wszystkim formom emitera przedstawionym na rys. 4. W porównaniu z wartościami literaturowymi [3] wynoszącymi 5 – 7 dla pól ocenianych z relacji (5), po 7,25 dla aproksymacji parabolicznej przy stosunku  $R/r \sim 10^6$ . Spowodowane jest to faktem, że nasza kalkulacja dotyczy stosunkowo krótkiej, wierzchołkowej części emitera. W przypadku rzeczywistego emitera polowego, wpływ dalszej części podstawy, wynoszącej dziesiąte części milimetra oraz układu mocującego emiter, prowadzi do znacznego wzrostu  $k_e$ .

Dla aproksymacji parabolicznej danej zależnością

$$E_o = \frac{2V}{r \ln \left( \frac{R}{r} \right)} \quad (6)$$

gdzie:  $E_o$  — natężenie pola powierzchni emitera w kierunku jego osi

$V$  — potencjał,

należy przyjąć nieskończoną długość emitera. W naszych obliczeniach wartość  $k > 7$  osiąga się dopiero dla emitera o długości  $l > 20.000$  nm (dla promienia krzywizny  $r = 61$  nm).

Opisana w niniejszej pracy metoda kalkulowania pola elektrycznego przy powierzchni gładkiego emitera jest dość pracochłonna. Średni czas obliczenia jednego punktu krzywej, łącznie z wprowadzeniem danych i dokonaniem dodatkowych obliczeń dotyczących wyników graficznych, trzeba ocenić na jedną godzinę. Jej zaletą jest dobra dokładność oceniona na  $\pm 0,5\%$ , oraz możliwość modelowania różnych układów brzegowych, nawet pozbawionych symetrii obrotowej.

## Literatura

- [1] E.W. Müller, T.T. Tsong, *Field Ion Microscopy. Principles and Applications*. American Elsevier Publishing Company, Inc. N.Y. 1969.
- [2] N. Ernst, G. Ehrlich *Topics in Current Physics*, vol. 40, 1986.
- [3] M.K. Miller, G.D.W. Smith *Atom Probe Microanalysis M.R.S.* Pittsburgh 1989.
- [4] R. Smith, J.M. Walls, *J. Phys. D; Appl. Phys.*, **11**, 409 (1978).
- [5] R. Coelho, J. Debeauvoir, *J. Phys. D; Appl. Phys.*, **4**, 1266 (1971).
- [6] M. Dreschler, E. Henkel, *Z. Angew. Phys.*, **6**, 341 (1954).
- [7] W.P. Dyke, J.K. Trolan, W.W. Dolan, G. Barnes, *J. Appl. Phys.*, **24**, 570 (1953).
- [8] W.E. Lenkow, S. Surma, W. Gubernator, *Acta Univ. Vratisl.*, **188**, 81, (1973).
- [9] W.E. Lenkow, R. Parnicka, K. Michnowski, *Proc. 6<sup>th</sup> Czech. Conf. Electronics Vac. Phys., Bratislava*, **1**, 75 (1976).
- [10] M.G. Burke, D.D. Sieloff, S.S. Brenner *Journ. de Phys. C7*, **47**, 459 (1986).
- [11] W. Lenkow, M.S. Glowacki, *Journ. de Phys. C7*, **47**, 47 (1986).
- [12] W. Jeute, B. Zawadzka, *O.B.R.T.T. Works*, **1**, 48 (1980).
- [13] G. Stong, G. Fix, *An Analysis of the Finite Element Method*, Prentice - Hall, INC 1973.
- [14] W.E. Milne, *Numerical Solution of Differential Equations*, New York 1953.
- [15] M. Komuro, *Proc. 27<sup>th</sup> IFES*, Tokyo, p. 189, (1980).
- [16] K. Stiller, H. Nordén, *Proc. 27<sup>th</sup> IFES*, Tokyo, p. 209, (1980).
- [17] H.O. André, H. Nordén, *Proc. 27<sup>th</sup> IFES*, Tokyo, p. 250, (1980).
- [18] M.S. Mousa, R.V. Latham, *Journ. de Phys. C7*, **47**, 139 (1986).
- [19] J. Skogsmo, P. Lindblad, H. Nordén, *Journ. de Phys. C7*, **47**, 251 (1986).
- [20] L. Karlsson, H. Nordén, *Journ. de Phys. C7*, **47**, 257, (1986).
- [21] A.J. Melmed, W.A. Schmidt, J.H. Block, M. Naschitzki, M. Lovisa, *Journ. de Phys. C7*, **47**, 333, (1986).
- [22] A. Henjered, H.O. André, H. Nordén *Proc. 27<sup>th</sup> IFES*, Tokyo, p. 106, (1980).
- [23] A. Henjered, H. Nordén *Proc. 27<sup>th</sup> IFES*, Tokyo, p. 358 (1980).
- [24] T. Arise, H. Lu, M. Nakamura, R. Yamamoto, M. Doyama *Proc. 27<sup>th</sup> IFES*, Tokyo, p. 399, (1980).
- [25] A. Cerezo, J.M. Hyde, M.K. Miller, G. Beverini, R.P. Setna, P.J. Warren, G.D.W. Smith *Surf. Sci.* **266**, (1992).
- [26] U. Rolander, *Journ de Phys. C7*, **47**, 499 (1986).
- [27] M.S. Mousa, *Surf. Sci.*, **266**, 110, (1992).
- [28] K. Stiller, *Surf. Sci.*, **266**, 402, (1992).
- [29] Q.H. Hu, J.A. Alarco, *Surf. Sci.*, **266**, 538, (1992).
- [30] M.K. Miller, J.A. Horton, *Journ. de Phys. C7*, **47**, 263, (1986).
- [31] F.A. Khalid, D.V. Edmonds, *Surf. Sci.*, **266**, 424, (1992).



W. LENKOW, E. REĆKO

## **A Numerical Calculations of the Electrical Field Distribution on the Surface of Smooth Field Emitter. SSC Approximation**

### **Summary**

The electrical field on the surface of smooth field emitter tip, have been calculated for the SSC model (sphere segment on cone) and comparatively for paraboloid model. „Optel 1.0” programme was used to computation the electrical field for emitters with tip radii 15 nm to 61 nm and half taper angles  $0^\circ$ ,  $5^\circ$ ,  $25^\circ$ . The procedure described above allows to calculate the electrical field with accuracy better than 1%. The proposed approximation is particularly suitable for sharp field emitter tips, used in FIM and APFIM.