

单晶 LaB₆ 尖锥几何结构 对场发射性能影响的 CST 模拟

肖怡新¹ 张忻^{1*} 刘洪亮¹ 冯琦¹ 赵吉平¹ 张久兴^{1,2}

(1. 北京工业大学材料科学与工程学院, 新型功能材料教育部重点实验室 北京 100124;

2. 合肥工业大学材料科学与工程学院 合肥 230009)

Influence of Sharpness of Single Crystalline LaB₆ Cone on Field Emission Characteristics: A CST Simulation Study

Xiao Yixin¹, Zhang Xin^{1*}, Liu Hongliang¹, Feng Qi¹, Zhao Jiping¹, Zhang Jiuxing^{1,2}

(1. Key Laboratory of Advanced Functional Materials, Ministry of Education, College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China;

2. School of Materials Science and Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract The field emission of single crystalline LaB₆ tip was mathematically modeled with a truncated cone capped with a hemisphere, theoretically analyzed in Fowler-Nordheim equation, and numerically simulated with CST software. The impact of the cone-angle and spherical radius of the LaB₆ tip on the field emission behavior was investigated. The simulated results show that the tip radius significantly affects the field emission behavior. For example, as the tip radius decreases, the field emission current increased, simply because of the intensifying emission field. The conical-shaped emission electron beam spreads out from the tip apex. With a cone angle of 40°, a height of 2 mm and a hemisphere radius of 0.1 μm, the optimized total emission current was 25.5 μA at a field of 7.22 × 10⁷ V/cm. We suggest that the simulated results may be of some technological interest in application of LaB₆ emitter.

Keywords Single crystal Lanthanum hexaboride, Field emission, Tip, CST

摘要 单晶 LaB₆ 尖锥有望成为理想的场致电子发射阴极, 采用三维粒子模拟软件 Computer Simulation Technology (CST) 对尖锥曲率半径在 0.1 ~ 10 μm 范围内的系列单晶 LaB₆ 尖锥阴极的场致发射特性进行了模拟。研究表明, 单晶 LaB₆ 尖锥的电子发射轨迹为倒立锥形, 锥尖处电位线最密集且场强最大, 且随锥尖曲率半径的减小, 锥尖处场强增大, 发射电流增大。当 LaB₆ 尖锥的锥角 40°, 锥高 $H_t = 2$ mm, 锥尖曲率半径 $R_t = 0.1$ μm 时, 尖锥获得最佳场发射性能: 电场强度 $E = 7.22 \times 10^7$ V/cm, 发射电流 $I = 25.5$ μA。为具有优良场发射性能的单晶 LaB₆ 尖锥场发射阴极的几何结构设计和加工提供了理论指导。

关键词 单晶六硼化镧 场致发射 尖锥 CST

中图分类号: O462.4

文献标识码: A

doi: 10.13922/j.cnki.cjovst.2018.02.11

场致发射冷阴极近年来得到了广泛关注和快速发展^[1], 与其它发射阴极相比较最突出的优势是: 发射电流密度大、能耗更低、效率更高、发射响应速度更快、阴极尺寸更小。尖锥型场发射阴极比较常

规的主要有钨尖和硅尖^[2-3], 但二者制作过程复杂且功函数高 (LaB₆: 2.6 eV; Si: 4.14 eV; Mo: 4.4 eV)^[4], 从而导致尖锥均匀性差, 发射电流有限。单晶 LaB₆ 与其他材料相比的优势是: 无晶界影响、杰

收稿日期: 2017-09-07

基金项目: 国家自然科学基金项目(51371010); 北京市教育委员会科技计划面上项目(KM201510005001)

* 联系人: E-mail: zhxin@bjut.edu.cn

出的化学稳定性以及良好的热稳定性和优异的导电性能,其有望成为场发射阴极的理想材料^[5]。作为场发射阴极要求发射体尖锥具有小的曲率半径,但 LaB₆ 本身的化学稳定性和硬脆特性导致其小曲率半径尖锥加工极其困难,目前常用的方法有湿法腐蚀法、高温氧作用反应离子(RIE)腐蚀法、电化学腐蚀法^[6-8],但这些加工方法得到的尖锥最小曲率半径各不相同,基本在 0.1~10 μm 范围内,由此也导致场电子发射性能的差异,但关于尖锥曲率半径与场发射性能之间的关联规律尚未见报道。

三维粒子模拟软件 Computer Simulation Technology(CST)作为研究真空电子器件场发射阴极发射特性的有效工具,在碳纳米管冷阴极结构仿真、栅网结构碳纳米管冷阴极仿真等方面研究已有报道^[9-11]。本研究拟采用 CST 软件模拟单晶 LaB₆ 尖锥场发射阴极在电场中的电子发射轨迹以及阴极几何结构(尖锥曲率半径、锥角、尖锥高度等)对场发射性能的影响,为高场发射性能单晶 LaB₆ 尖锥阴极的几何结构设计和加工提供理论指导。

1 设计与仿真

CST 软件模拟单晶 LaB₆ 尖锥场发射过程中,发射模型选择 Field-induced 模型,发生过程中电流密度与电场之间的关系如 Fowler-Nordheim 公式^[12]

$$J(0) = \frac{AE^2}{\Phi t^2(y)} \exp\left(-B \frac{\Phi^{3/2}}{E} v(y)\right) \quad (1)$$

式中 J 为电流密度(A/cm²); E 为电场强度; Φ 为功函数(eV); y 为与功函数势垒有关的肖特基函数; $v(y)$ 为诺德汉姆椭圆函数; $t(y)$ 为诺德汉姆椭圆函数; A 、 B 为与发射体功函数有关的常数。一般情况下,诺德汉姆椭圆函数 $v(y)$ 和 $t(y)$ 有如下的近似关系

$$v(y) = 0.95 - y^2 \quad (2)$$

$$t^2(y) = 1.1 \quad (3)$$

$$y = 3.79 \times 10^{-4} \frac{E^{1/2}}{\Phi} \quad (4)$$

在 CST 模拟过程中,式(1)简化后如下

$$J_s = \alpha E^2 e^{-b/E} \quad (5)$$

$$a = \frac{A}{\Phi t^2(y)} \quad (6)$$

$$b = B \Phi^{3/2} v(y) \quad (7)$$

式中 J_s 为电流密度; E 为电场强度; a 为场发射阴极场致发射线性因子(A/V²); b 为指数因子(V/

m)。在模拟过程中, a 、 b 参数的取值会对场致发射电流密度模拟结果产生重要影响,因此,本研究中将根据式(1)~式(7)确定 CST 模拟单晶 LaB₆ 尖锥冷阴极场致发射参数 a 、 b 。为了使粒子仿真更接近实际电子运动轨迹,模拟结果更准确可靠,为此基于本课题组前期实验测得的单晶 LaB₆ 尖锥冷阴极二极管场致发射电流^[13]在两极结构的仿真模型中调节 a 、 b 参数,使仿真数据与实验结果相匹配,最终确定 a 、 b 参数值为

$$a = 5.39 \times 10^{-7} \quad b = 4.39 \times 10^8 \quad (10)$$

另外,模拟过程中单晶 LaB₆ 尖锥阴极功函数(Φ)取值 2.6 eV^[14],外加电压取值 1000 V, $a = 5.39 \times 10^{-7}$, $b = 4.39 \times 10^8$ 。根据单晶 LaB₆ 尖锥阴极实际场发射性能测试样品几何结构参数(包括曲率半径、锥角、尖锥高度)和测试实验相关参数(包括阴极阳极板间距 $L_{eg} = 200 \mu\text{m}$,真空度为 3.4×10^{-4} pa),设定的 CST 模拟基本参数为:尖锥阴极锥底半径 $R_b = 0.5 \sim 1.5 \text{ mm}$,尖锥阴极曲率半径 $R_t = 0.1 \sim 10 \mu\text{m}$,尖锥阴极的角度 $p_{hi} = 40^\circ \sim 70^\circ$,尖锥阴极的高度 $H_t = 0.5 \sim 2.5 \text{ mm}$,阴极阳极板间距 $L_{eg} = 200 \mu\text{m}$,阳极板厚度 $d_1 = 100 \mu\text{m}$ 。基板和阴极电压为 0 V,阳极电压为 1000 V。完整的场发射二级结构模型如图 1 所示。

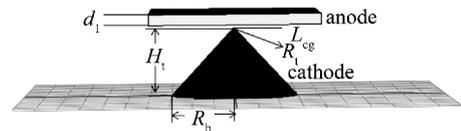


图 1 单晶 LaB₆ 尖锥场发射阴极结构模型

Fig. 1 Schematic representation of the field emission of sharp LaB₆ cone

2 结果与讨论

2.1 场发射尖锥阴极发射电子的运动轨迹及电位线分布

通过 CST 模拟得到电子发射轨迹和发射体表面电位线分布,有助于直观了解尖锥的场致发射电子的情况及其表面的电场强度的分布。CST 软件采用上述设定的阴极结构模型,模拟得到阴极发射出的电子的运动轨迹、尖锥端部的电位线分布、场强分布如图 2 所示。由图 2(a)中给出的电子发射轨迹可以看出,单晶 LaB₆ 尖锥阴极的场致发射电子主要来源于锥尖的端部,阴极表面发射出的电子大部分

集中在锥尖,这是由于锥尖位置的场强更大(图2(c)所示),更容易让电子克服材料内部电场束缚而逸出形成发射电子。图2(b)给出了尖锥附近电位线的模拟结果,从图中可以看出,越接近尖锥的尖端位置,电位线的密度越密,表明尖端部位的电场强度高于其他部位,这也说明场致发射电子来源于锥尖位置的电子数量更大。

2.2 场发射尖锥阴极的锥角和高度对发射性能的影响

通过改变尖锥锥角得到了锥角对尖锥电场强度和发射电流的影响,如图3所示。从图中可以看出,尖锥阴极表面场强大小与尖锥阴极锥角有着一定的关系,锥角减小场强不断增大,而且发射电流也随之不断增大。这是由于锥角的减小,导致锥尖位置的电场强度增大,从而引起场发射阴极场致发射线性因子 $\rho = E/V$ (V 为阳极电压)的增大,所以发射电流增大。图4给出了锥高对尖端电场强度和收集电流影响的模拟结果,从图中可以看出,在尖锥曲率半径和锥角不变的情况下,尖锥阴极的高度在0.5~2.5 mm范围内对场强和发射电流的影响很小。在本研究范围内,尖锥阴极角度为 40° 和锥高为2 mm时获得了最大电场强度 E 约为 7.22×10^7 V/cm,相应的最大发射电流约为 $25.5 \mu\text{A}$ 。

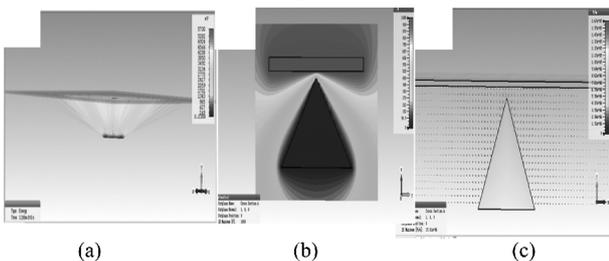


图2 (a) LaB_6 场发射电子的运动轨迹; (b) LaB_6 场发射尖锥的电场分布图; (c) LaB_6 场发射尖锥电位线分布图

Fig. 2 Simulated (a) emission electron trajectory, (b) field profile and (c) potential distribution of around the LaB_6 tip

2.3 场发射尖锥阴极的曲率半径对发射性能的影响

为了进一步分析尖锥阴极的锥尖曲率半径对发射性能的影响,在CST模拟中设定发射体高度 $H_t = 2\text{ mm}$, $R_b = 1\text{ mm}$, $\rho_{hi} = 40^\circ$,曲率半径 R_t 从 $0.1 \sim 10\ \mu\text{m}$ 范围内变化。图5给出了不同曲率半径单晶

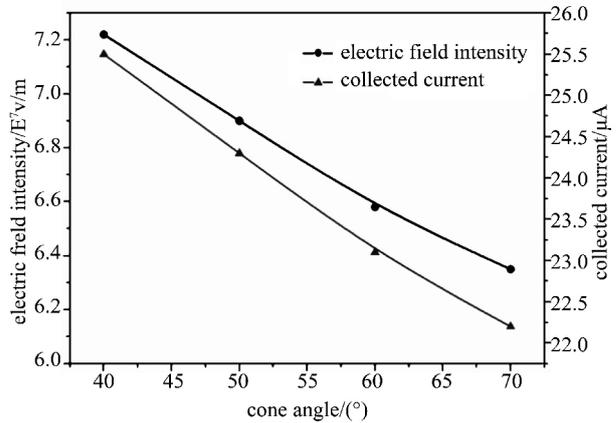


图3 锥角对尖端电场强度和收集电流的影响

Fig. 3 Influence of the cone angle on the field strength and emission current

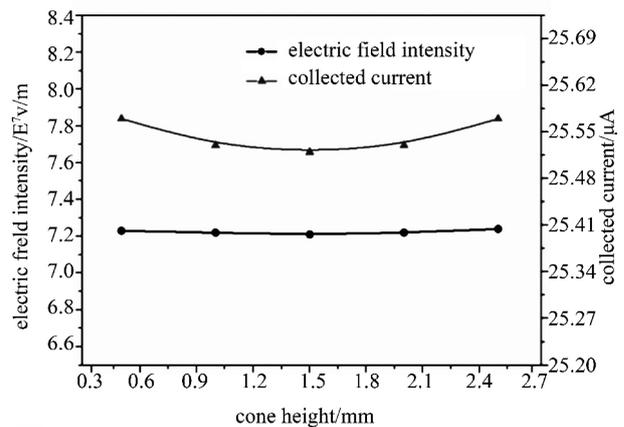


图4 锥高对尖端电场强度和收集电流的影响

Fig. 4 Impact of the tip height on the field intensity and emission current

LaB_6 尖锥阴极附近场强和阳极板收集到的发射电流,可以看出随着曲率半径从10减小到 $0.1\ \mu\text{m}$,尖锥附近场强不断增大,阳极板收集到发射电流也不断增大。从图5可以看出,发射电流大小主要与尖锥的曲率半径有关,曲率半径减小,尖锥表面场强急剧增大,从而导致了F-N发射电流剧烈增大,分析其原因,是因为曲率半径的增大导致场增强因子的增大。且从图5可以看出,当尖锥曲率半径从 0.1 增大 $1.0\ \mu\text{m}$ 时,尖锥附近的场强和尖锥的发射电流大小随锥尖曲率的增大急速减小。当曲率半径从 1.0 增加到 $10\ \mu\text{m}$ 时,尖锥附近的场强和尖锥的发射电流大小随锥尖曲率的变化变得平缓。由此可见,尖锥曲率半径越小,尖锥附近场强越大,阳极板收集到的场发射电流越大。因此,理论上尖锥的

曲率半径越小,场发射电流越大。但阴极在实际工作中,尖锥尖端处气体的吸附和解吸容易让尖锥阴极产生中毒现象,曲率半径越小这种现象越明显,尖锥越容易遭到破坏。所以场发射尖锥的曲率半径也不是越小越好,而要综合考虑阴极的材质、工作环境以及工作电流等因素。

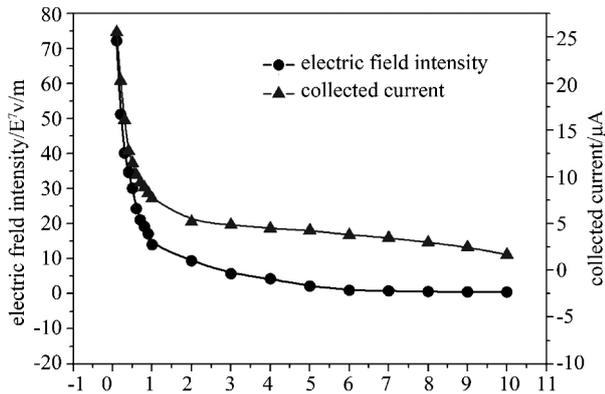


图 5 单晶 LaB₆ 尖锥不同曲率半径对尖端电场强度和收集电流的影响

Fig. 5 Dependence of the emission field on the tip radius of curvature

3 结论

采用三维粒子模拟软件 CST 对尖锥曲率半径在 0.1 ~ 10 μm 范围内的系列单晶 LaB₆ 尖锥阴极的场致发射特性进行了模拟,研究结果表明:

(1) 尖锥电子发射轨迹为倒立的锥形,电位线在锥尖位置最密集,场强最高。且随着尖锥曲率半径的减小,锥尖场强增大,发射电流增大,因此,尖锥阴极尖端部分的电子发射在场发射中起主要作用。

(2) 当锥体底部半径 $R_b = 1$ mm,锥角 40° ,锥高 $H_1 = 2$ mm,曲率半径为 0.1 μm 时,尖锥阴极获得最佳场发射性能,发射电流为 25.5 μA。

致谢

本工作得到电子十二所的大力支持,感谢电子十二所提供 CST 计算平台。

参 考 文 献

- [1] 王金淑,周美玲,电子发射材料[M].北京:北京工业大学出版社,2008:1-10
- [2] Heer,De Walt A,Chatelain A,et al. A Carbon Nanotube Field-Emission Electron Source [J]. Science,270. 5239 (1995):1179-1180
- [3] Qingliang L U. Development and Character of Preparation Methods of LaB₆ Single Crystals [J]. Materials Review, 2005,19(9):5-651
- [4] Long D X,Xu Y,Kang S J,et al. Solution Processed Vanadium Pentoxide as Charge Injection Layer in Polymer Field-Effect Transistor with Mo Electrodes [J]. Organic Electronics 2015,17:66-76
- [5] Bao L H. Floating Zone Growth and Emission Properties of Single Crystal LaB₆ Cathode [J]. Acta Phys Sin 2011,60(10):687-709
- [6] 杨 莺,陈治明.湿法腐蚀工艺研究碳化硅晶体缺陷表面形貌[J].人工晶体学报,2008,37(3):634-638
- [7] Akimoto T,Nanbu H,Ikawa E. Reactive Ion Etching Lag On High Rate Oxide Etching Using High Density Plasma [J]. Journal of Vacuum Science & Technology,1995,B13(6):2390-2393
- [8] 段 雪,邓建国,刘英坤,等.多层难熔金属的刻蚀工艺技术研究[J].真空科学与技术学报,2005,25(6):463-466
- [9] Balk M C. 3D Magnetron Simulation with CST STUDIO SUITE™ [C]. Vacuum Electronics Conference IEEE, 2011:443-444
- [10] 彭自安,朱宝华,陈其略.碳纳米管场发射特性的研究[J].真空科学与技术学报,1999,19(6):411-415
- [11] 雷 达,孟根其其格,陈雷锋.一种带栅极碳纳米管阴极阵列的场发射性能研究[J].真空科学与技术学报,2014,34(4)
- [12] Fowler R H,Nordheim L. Electron Emission in Intense Electric Fields [J]. Proceedings of the Royal Society of London,1928,119(781):173-181
- [13] 包黎红.稀土六硼化物多晶和单晶阴极材料的制备、结构与性能研究[D].北京:北京工业大学,2012:83-92
- [14] 何成旦,李鹤岐,许启晋.电子枪新型阴极的设计[J].兰州理工大学学报,2003,29(3):1-5