

05;06;11

## Влияние экранировки на эмиссионные характеристики холодных полевых катодов на основе углеродных нанотрубок

© Г.С. Бочаров,<sup>1</sup> А.В. Елецкий<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский энергетический институт,  
111250 Москва, Россия  
e-mail: www.mpei.ru

<sup>2</sup> Российский научный центр „Курчатовский институт“,  
123182 Москва, Россия  
e-mail: www.kiae.ru

(Поступило в Редакцию 21 сентября 2004 г.)

Анализируется влияние экранирования углеродных нанотрубок (УНТ) в массиве полевого эмиттера на эмиссионные характеристики холодного катода на основе УНТ. Разработан численный метод решения уравнения Лапласа для катодов сложной геометрии, позволяющий определить зависимость коэффициента усиления от расстояния между нанотрубками для массивов, содержащих до 225 эмиттеров. Представлены численные результаты исследования эффекта экранировки нанотрубок, который проявляется в виде зависимости коэффициента усиления электрического поля от среднего расстояния между эмиттерами. Установлено оптимальное расстояние между УНТ, обеспечивающее максимальное значение плотности тока эмиссии при заданном значении приложенного напряжения. Установлена роль краевых эффектов в явлении экранирования УНТ.

### Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают необычными физико-химическими свойствами, благодаря которым они являются привлекательным объектом фундаментальной науки, а также имеют широкие перспективы прикладного использования [1–4]. Одно из наиболее интересных применений УНТ связано с возможностью их использования в качестве эмиттеров для приборов, действие которых основано на полевой автоэлектронной эмиссии [5–7]. Такая возможность обусловлена хорошей электропроводностью УНТ, а также их высоким аспектным отношением (до  $\sim 1000$ ), благодаря которому напряженность электрического поля в окрестности вершины нанотрубки в сотни раз превышает соответствующую среднюю по объему напряженность электрического поля, создаваемого внешним источником. Указанные особенности УНТ приводят к аномально высокому значению тока холодной электронной эмиссии при сравнительно низком напряжении, приложенном к УНТ.

Вольт-амперная характеристика (ВАХ) индивидуальной нанотрубки обычно хорошо описывается классическим выражением Фаулера–Нордгейма [8], которое включает в себя туннелирование электронов через барьер, образованный кристаллической структурой проводника и внешним электрическим полем. Однако при анализе рабочих характеристик катодов на основе УНТ необходимо учитывать, что эмиссионный ток массива, содержащего большое количество УНТ, не является арифметической суммой токов индивидуальных нанотрубок. Это обусловлено несколькими физическими причинами. Во-первых, в силу естественного статистического разброса параметров индивидуальных нанотрубок и резко нелинейной зависимости тока эмиссии от

приложенного напряжения характер ВАХ эмиттера в области относительно малых напряженностей электрического поля существенно отличается от зависимости Фаулера–Нордгейма [9,10].

Другой фактор, определяющий различия между ВАХ индивидуальной УНТ и большого массива, связан с эффектом экранирования УНТ [11]. Указанный эффект проявляется в зависимости коэффициента усиления электрического поля для индивидуального эмиттера от расстояния до соседних эмиттеров в массиве. Для характеристики степени увеличения напряженности электрического поля вблизи вершины УНТ используется коэффициент усиления электрического поля  $\beta$ , который определяется соотношением

$$\beta = \frac{E_{\max}}{E_{\text{av}}}, \quad (1)$$

где  $E_{\max}$  — максимальное значение напряженности электрического поля вблизи вершины УНТ;  $E_{\text{av}}$  — среднее значение напряженности электрического поля, определяемое как отношение приложенного напряжения к величине межэлектродного расстояния (предполагается, что межэлектродное расстояние  $H$  значительно превышает высоту нанотрубки  $h$ ).

Эффект экранировки отсутствует в случае индивидуальной изолированной нанотрубки либо в случае, когда расстояние между индивидуальными нанотрубками в массиве достаточно велико. В этом случае коэффициент усиления электрического поля определяется геометрией индивидуальной нанотрубки и достигает своего максимального возможного значения. По мере уменьшения расстояния между соседними нанотрубками коэффициент усиления электрического поля снижается, и при переходе массива нанотрубок в плоскую поверхность

(расстояние между УНТ равно нулю) значение коэффициента усиления электрического поля приближается к единице.

В силу эффекта экранировки при анализе эмиттеров на основе УНТ возникает необходимость компромисса между большим фактором усиления электрического поля, который достигается при больших расстояниях между индивидуальными эмиттерами, и большой плотностью тока эмиссии, которая может быть достигнута только при достаточно плотном расположении УНТ в массиве. Тем самым возникает задача количественного учета эффекта экранировки УНТ в условиях работы полевого эмиссионного катода и установления оптимального среднего расстояния между эмиттерами, которое соответствует максимальному значению плотности эмиссионного тока. Цель данной работы состоит в численном исследовании эффекта экранирования УНТ и установления оптимального расстояния между нанотрубками, обеспечивающего максимальное значение плотности тока эмиссии. С этой целью развит подход к задаче численного расчета пространственного распределения напряженности электрического поля в окрестности наконечника нанотрубки, входящей в состав массива, при различных расстояниях между нанотрубками. Развитый метод решения уравнения Лапласа в условиях сложной геометрии позволяет определить влияние эффекта экранировки УНТ на эмиссионные характеристики катода и оценить оптимальное значение расстояния между индивидуальными нанотрубками.

## Метод исследования

Анализ влияния эффекта экранировки на эмиссионные свойства УНТ проводился с помощью созданной в работе программы математического моделирования SAFANT (Simulation Amplification Factor Nanotubes), которая рассчитывает пространственное распределение потенциала и напряженности электрического поля вблизи вершины нанотрубки, находящейся на плоской подложке в массиве УНТ. Это дает возможность определить значение коэффициента усиления электрического поля  $\beta$  при различных значениях среднего расстояния между эмиттерами.

Программа решает уравнение Лапласа

$$\Delta\varphi = 0 \quad (2)$$

для потенциала электрического поля  $\varphi(x, y, z)$  в окрестности нанотрубки. Граничное условие для уравнения (2) соответствует ситуации, когда проводящие нанотрубки расположены на плоской бесконечной проводящей заземленной подложке перпендикулярно ее поверхности, так что электрический потенциал нанотрубок равен нулю. Потенциал второго электрода, который также представляет собой бесконечную пластину, расположенную на расстоянии  $H$  от подложки, равен  $U_0$ . При этом предполагается, что межэлектродное расстояние  $H$  значительно превышает характерную высоту нанотрубки  $h$ ,

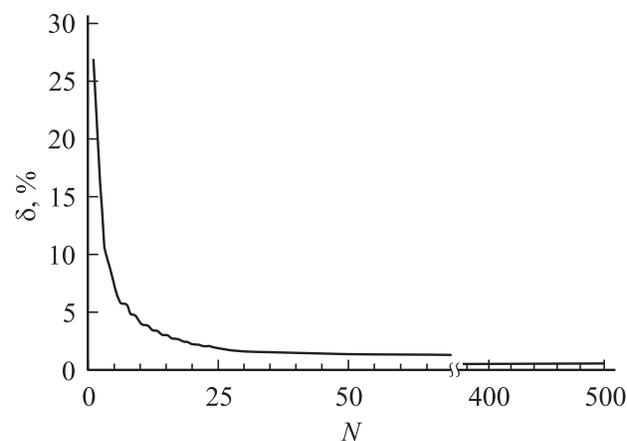
так что пространственное распределение электрического потенциала в основной области промежутка не подвержено влиянию нанотрубок. Нанотрубка представляется в виде протяженного цилиндра, замкнутого плоской вершиной. В программе предусмотрена возможность варьирования геометрических параметров индивидуальных УНТ, чтобы учесть естественный статистический разброс их эмиссионных характеристик. Кроме того, предложенная модель описания УНТ позволяет рассматривать различное взаимное расположение нанотрубок на подложке, чтобы учесть взаимное экранирующее влияние соседних УНТ на их эмиссионные характеристики. Подобный подход позволяет при умеренных затратах машинного времени адекватно описывать структуру как индивидуальной УНТ, так и массива, состоящего из значительного количества нанотрубок. В силу сложной геометрии задачи аналитически решить уравнение Лапласа (2) не представляется возможным, поэтому для решения данной задачи используется численный метод [9].

В качестве численного метода решения уравнения (2) с указанными выше граничными условиями был выбран итерационный метод. В результате условие выхода из итерационной процедуры имеет вид

$$\max(|\varphi^{(n+1)} - \varphi^{(n)}|) \leq \varepsilon, \quad (3)$$

где  $\varphi^{(n)}, \varphi^{(n+1)}$  — потенциал электрического поля при  $(n)$  и  $(n+1)$  итерационной процедуре;  $\varepsilon$  — заданная точность решения.

Выбор значения  $\varepsilon$  в существенной степени зависит от количества итераций, проделанных программой. Связь между количеством итераций и погрешностью вычисления  $\varepsilon$  представлена на рис. 1, откуда следует, что с ростом числа итераций точность расчета, естественно, возрастает. Приемлемая для нас точность вычислений на уровне 1–2% достигается при числе итераций порядка 50. Это число итераций использовалось нами



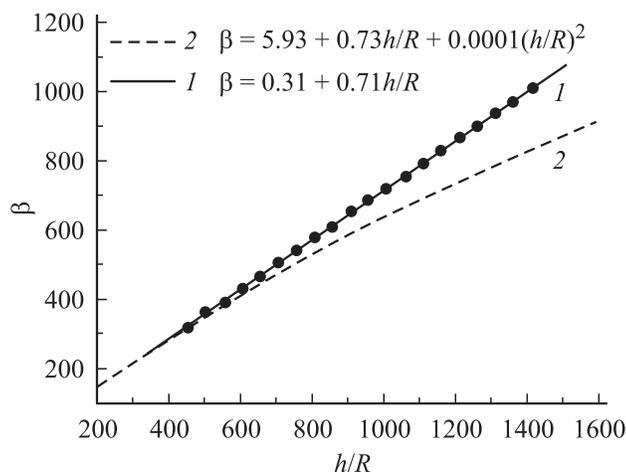
**Рис. 1.** Зависимость максимальной погрешности расчета потенциала электрического поля на основании уравнения Лапласа от числа итераций ( $N$ ).  $\delta$  — относительная погрешность.

в дальнейших расчетах. Таким образом, разработанная программа SAFANT позволяет получить распределение электрического поля в окрестности нанотрубки, находящейся в массиве УНТ, что дает возможность определить пространственное распределение потенциала в зависимости от разброса индивидуальных параметров УНТ, а также от расстояния между УНТ в массиве. Это позволяет подойти к расчету эмиссионных характеристик катодов на основе УНТ и с учетом эффекта экранировки установить оптимальное расстояние между нанотрубками, обеспечивающее максимальное значение плотности эмиссионного тока.

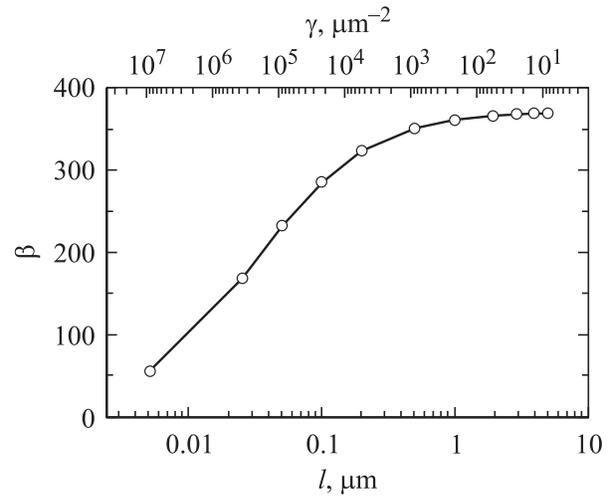
## Результаты и обсуждение

С целью демонстрации возможностей программы и в качестве теста были выполнены расчеты зависимости коэффициента усиления электрического поля вблизи наконечника индивидуальной нанотрубки  $\beta$  от ее аспектного отношения  $\alpha = h/R$  ( $R$  — радиус нанотрубки). Полученная зависимость сравнивается на рис. 2 с аналогичной зависимостью, установленной в работе [12], где индивидуальная нанотрубка моделировалась системой поставленных друг на друга одинаковых проводящих сфер. Как видно, при высоких аспектных отношениях наблюдается расхождение между полученными здесь данными и результатами расчета [12], что объясняется различными подходами к моделированию структуры нанотрубки.

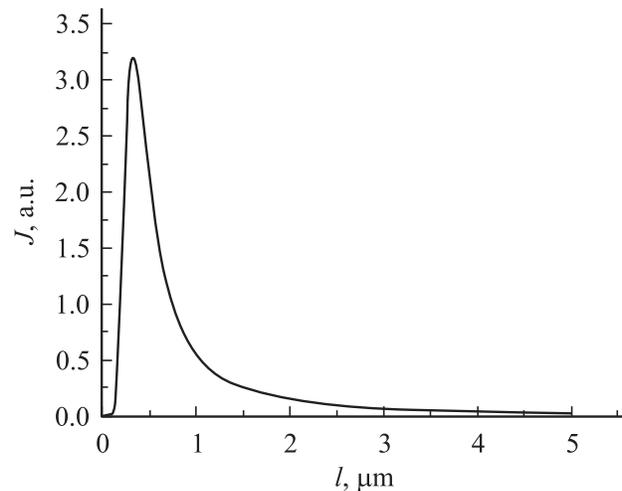
Влияние эффекта экранировки соседних нанотрубок на эмиссионные свойства катода на основе УНТ вычислялось для квадратного массива, состоящего из 225 регулярно расположенных одинаковых нанотрубок, имеющих форму цилиндра с плоской вершиной диаметром  $d = 1$  нм и высотой  $h = 1$  мкм. Нанотрубки рас-



**Рис. 2.** Зависимость коэффициента усиления электрического поля вблизи наконечника индивидуальной нанотрубки от ее аспектного отношения, вычисленная с помощью программы SAFANT (значки; сплошная линия — интерполяция) и установленная в работе [12] (штриховая линия).

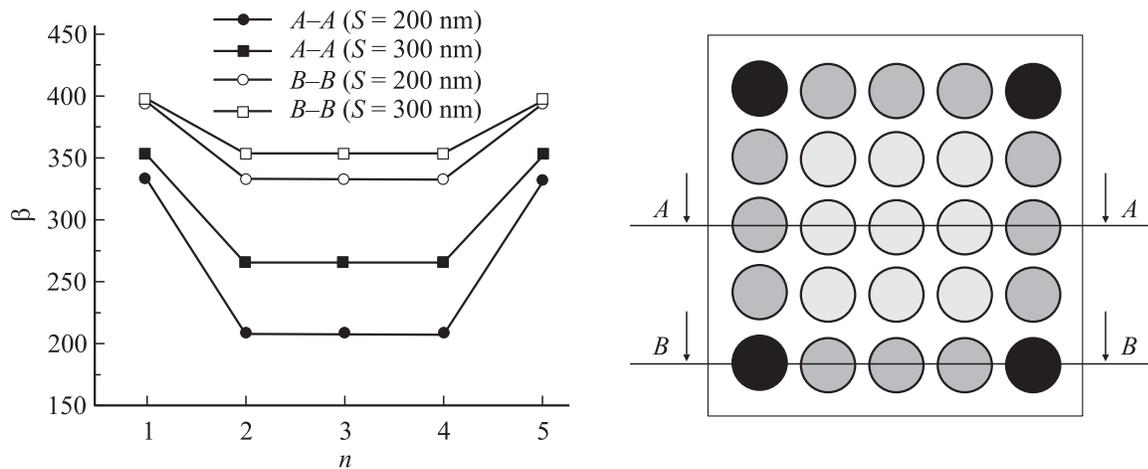


**Рис. 3.** Зависимость коэффициента усиления электрического поля вблизи наконечника нанотрубок от среднего расстояния между нанотрубками  $S$  и поверхностной плотности ( $\gamma$ ) нанотрубок в массиве.  $l$  — расстояние между эмиттерами.



**Рис. 4.** Зависимость плотности тока ( $J$ ) полевой электронной эмиссии массива нанотрубок от среднего расстояния между нанотрубками, вычисленная на основании соотношения Фаулера–Нордгейма (4) с учетом эффекта экранировки УНТ.  $l$  — расстояние между эмиттерами.

полагались в вершинах квадратов, размер которых  $S$  варьировался. Результаты расчетов приведены на рис. 3, где показана зависимость коэффициента усиления электрического поля от расстояния между эмиттерами и плотности эмиттеров в массиве. Как видно, с уменьшением расстояния между нанотрубками коэффициент  $\beta$  уменьшается, достигая минимального значения, близкого к единице, в предельном случае нулевого расстояния, который соответствует сплошной поверхности, который соответствует сплошной поверхности. При больших расстояниях между эмиттерами  $S > h/2$  величина коэффициента усиления приближается к значению, присущему индивидуальной нанотрубке.



**Рис. 5.** Коэффициент усиления индивидуальных нанотрубок, входящих в состав массива  $5 \times 5$ , вычисленный в зависимости от положения нанотрубки в массиве для различных значений среднего расстояния  $S$  между нанотрубками.  $n$  — номер нанотрубки.

Ток эмиссии индивидуальной нанотрубки  $i$  описывается известной зависимостью Фаулера–Нордгейма [7,8]

$$i = C_1 E^2 \exp\left(-\frac{C_2}{E}\right), \quad (4)$$

где  $E = \beta E_{av}$  — напряженность электрического поля вблизи наконечника нанотрубки,  $C_1$  и  $C_2$  — параметры, зависящие от геометрии и электронных свойств эмиттера.

В силу установленной выше зависимости коэффициента усиления массива, состоящего из одинаковых нанотрубок, от среднего расстояния между ними, зависимость плотности тока эмиссии  $j \sim i/S^2$  от этого параметра должна иметь немонотонный характер с максимумом при значении  $S \sim h/2$ . Результаты расчета данной зависимости показаны на рис. 4. Как видно, максимальное значение плотности тока эмиссии достигается при значении  $S \approx 0.3h$ . Это значение примерно на порядок меньше величины, полученной в работе [11], что связано с различным подходом к описанию структуры нанотрубки. Наличие максимума в зависимости плотности тока от среднего расстояния между нанотрубками указывает на необходимость при изготовлении холодных катодов на основе УНТ выбора оптимального значения расстояния между нанотрубками, которое обеспечивает оптимальные эмиссионные свойства.

Следует отметить, что в силу ограниченности времени счета объектом выполненных здесь расчетов служил массив, составленный из ограниченного числа нанотрубок. При этом предполагалось, что рассматриваемый здесь эффект экранирования относится к нанотрубкам, находящимся внутри массива, пренебрегая тем самым крайними эффектами, которые относятся к нанотрубкам, находящимся на границе массива. Очевидно, такие нанотрубки меньше подвержены эффекту экранирования, так что для них величина коэффициента усиления должна превышать соответствующее значение, присущее внутренним нанотрубкам. С целью количественного анализа

краевых эффектов были предприняты расчеты коэффициента усиления индивидуальных нанотрубок в зависимости от их положения в массиве. Результаты расчетов, представленные на рис. 5, указывают на более высокое значение коэффициента усиления для нанотрубок, находящихся на границе массива. Как видно, крайний эффект затрагивает только один, внешний, ряд нанотрубок в массиве, поэтому для массивов, содержащих  $n \gg 1$  рядов нанотрубок, роль указанного эффекта пренебрежимо мала. С увеличением расстояния между нанотрубками роль краевого эффекта, естественно, падает, что также следует из сравнения данных, приведенных на рис. 5.

## Заключение

Выполненные расчеты показывают, что эффект экранировки нанотрубок, входящих в состав полевого эмиссионного катода, существенно снижает коэффициент усиления электрического поля при расстоянии между нанотрубками, соизмеримым с их высотой. Это приводит к возникновению максимума в зависимости плотности эмиссионного тока от среднего расстояния между индивидуальными эмиттерами, наличие которого необходимо учитывать при оптимизации параметров катода на основе нанотрубок.

Работа поддержана грантом МНТЦ в рамках проекта № 2484, грантом АФГИР в рамках НОЦ „Плазма“, а также Программой поддержки научных школ РФ (школы Л.М. Бибермана).

## Список литературы

- [1] Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. San Diego: Academic Press, 1996. 224 p.
- [2] Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. Physical Properties of Carbon Nanotubes. London: World Scientific Publ., 1998. 234 p.

- [3] *Ebbesen T.W.* Carbon Nanotubes: Preparation and Properties. Boca Raton: CRC Press, 1997. 232 p.
- [4] *Елецкий А.В.* // УФН. 1997. Т. 167. № 9. С. 945–972.
- [5] *Gulyaev Yu.V.* et al. // Proc. 7<sup>th</sup> Intern. Vacuum Microel. Conf. Grenoble, 1994. P. 322. *Vacuum Sci. & Tech.* 1995. Vol. B13. N 2. P. 234–239. *Гуляев Ю.В.* и др. // Микроэлектроника. 1997. Т. 26. № 2. С. 84–89. *Chernozatonskii L.A.* et al. // 8<sup>th</sup> Intern. Vacuum Microel. Conf. Technical Digest. Portland, 1995. P. 363; *Chem. Phys. Lett.* 1995. Vol. 233. N 1. P. 63–68.
- [6] *De Heer W.A., Chatelain A., Ugarte D.* // *Science.* 1995. Vol. 270. N 23. P. 1179–1182.
- [7] *Елецкий А.В.* // УФН. 2002. Т. 172. № 4. С. 401–438.
- [8] *Gomer R.* Field Emission and Fiel's Ionization Harvard Univ. Press. 2<sup>nd</sup> ed. 1993. 221 p.
- [9] *Bocharov G.S., Eletskiy A.V., Korshakov A.V.* // *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2003. Vol. 5. N 4. P. 371–374.
- [10] *Obraztsov A.N.* et al. // *Diamond and Related Materials.* 2003. Vol. 12. N 23. P. 446–449.
- [11] *Nilsson L.* et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2000. Vol. 76. N 15. P. 2071–2073.
- [12] *Kokkorakis G.C., Modinos A., Xanthakis J.P.* // *J. Appl. Phys.* 2002. Vol. 91. N 7. P. 4580–4584.