

排列形状及阵列数目对纳米导线 阵列场发射性能的影响*

罗 敏¹⁾ 王新庆^{1)†} 葛洪良^{1)‡} 王 森³⁾ 徐亚伯³⁾ 陈 强^{1)‡} 李利培¹⁾
陈 磊¹⁾ 管高飞¹⁾ 夏 娟¹⁾ 江 丰¹⁾

1) 中国计量学院物理系 杭州 310018)

2) 中国计量学院磁学重点实验室, 杭州 310018)

3) 浙江大学物理系 杭州 310027)

(2006 年 3 月 10 日收到, 2006 年 4 月 11 日收到修改稿)

为了进一步研究纳米导线阵列的排列形状以及阵列数目对其场发射行为的影响, 利用镜像悬浮球模型对正方形以及六边形排列的纳米导线阵列的场发射行为进行计算与模拟, 近似的得到纳米导线阵列的场发射增强因子满足如下的变化趋势: $\beta = \frac{h}{\rho} \left(\frac{1}{1+W} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+W} \right)^2 + 3$, 其中 h 为纳米导线的高度, ρ 为纳米导线的半径, W 是以 R 为自变量的函数, R 为纳米导线阵列的间距. 结果显示纳米导线阵列的排列形状对其场发射性能的影响较小, 而阵列间距则是影响场发射性能的关键因素: 当 $R < R_0$ 时, 场发射增强因子随着阵列间距的减小而急剧减小; 当 $R > R_0$ 时, 场发射增强因子基本不变, 其中 R_0 为导线阵列场发射的最佳间距. 进一步研究表明改变纳米导线阵列的数目基本不会改变阵列的场发射性能随间距的变化趋势, 但是随着阵列数目的增加, R_0 会有一定程度的减小, 场发射增强因子也会降低.

关键词: 纳米导线, 场发射, 增强因子, 阵列数目

PACC: 7210, 7220H, 7390

1. 引 言

纳米导线具有独特的准一维结构, 使其在作为场发射器件、纳米电子器件、纳米导线以及纳米传感器等方面都具有潜在的应用前景^[1-5]. 特别是在场发射领域具有其他材料所不可比拟的优势, 目前对各类纳米导线在场发射方面的研究已经成为国内外研究的热点^[5-8], 而且有望最先实现产业化. 纳米导线具有非常大的长径比 (10^2-10^3) 以及纳米量级的曲率半径 (0.1—100nm), 可以使尖端附近的局域电场得到较大的增强, 使电子能够通过隧道效应比较容易通过大大变薄的势垒而逸出表面, 形成场发射电子^[9, 10]. 因此纳米导线可以在较小的电压下获得较大的发射电流密度, 使其在场发射方面具有巨大的潜在应用前景, 有望成为下一代在场发射电子

源、场发射平面显示器以及场发射器件等领域广泛应用的场发射体^[11, 12].

虽然纳米导线具有优异的场发射特性, 但由于影响其场发射性能的因素很多, 包括纳米导线的长径比、极板间距、纳米导线间距以及真空系统内的残余气体等^[8-12], 使纳米导线在场发射方面的理论研究显得滞后. 很多研究利用计算机对纳米导线的场发射进行模拟并求解拉普拉斯方程, 再根据计算结果拟合出关于纳米导线场发射因子的公式, 都得到了场增强因子与纳米导线长径比密切相关的结论: $\beta \propto (h/\rho)$. Buldum 等^[9]利用数值求解 Laplace's 方程并利用自洽场势垒电子结构计算方法求电势, 结果表明纳米碳管自身的结构以及尖端局域电子态对场发射性能有重要的影响. Zheng 等^[10]利用量子力学模型研究单根纳米碳管的场发射性能, 结果发现在碳管的顶端会发生强烈的电场穿透效应, 使势垒

* 国家自然科学基金(批准号 20571067)资助的课题.

† E-mail: wxqnano@cjl. edu. cn

急剧降低,最终可以获得较低的工作电压以及较高的发射电流密度.此外,还有从局域电子态的诱发和特征以及在电场作用下的行为等方面开展的理论研究工作^[13-15],分别对开口和封闭单壁纳米碳管的发射势垒以及发射性能进行了模拟计算,而且研究发现开口的单壁纳米碳管的场发射性能明显好于封闭的单壁纳米碳管.在以前的工作中^[16],我们建立了镜像悬浮球模型对单根纳米导线的场发射性能进行模拟计算,得到了单根纳米导线的场发射增强因子随自身结构变化以及随极板间距的变化趋势.

但是目前在纳米导线场发射性能研究方面主要集中在单根纳米导线的场发射性能的研究和探索,对于纳米导线阵列场发射性能方面的实验研究也取得了一定的进展,大量的实验发现纳米导线阵列的间距会严重影响纳米导线的场发射性能^[17-20].Teo, Nilsson 等^[17,19]分别对制备的纳米碳管阵列的场发射性能进行了测试,结果显示纳米碳管阵列间距为碳管高度的二倍时,纳米碳管的场发射性能最佳.而 Suh^[20]用多空氧化铝制备纳米碳管阵列,测试表明当导线间距与高度相等时,纳米导线碳管的场发射性能最好.为了很好地解释上述现象,我们利用镜像悬浮球模型^[21,22]对纳米碳管阵列的场发射性能进行了模拟计算,得到了和实验基本一致的结论.纳米碳管的间距对其场发射性能影响非常剧烈,当阵列间距与碳管高度相当时纳米碳管阵列场发射性能最佳.同时利用计算机对纳米碳管阵列的场发射行为进行数值模拟^[8],得到了和理论计算相似的结果.

本文继续利用镜像悬浮球模型,研究按正方形及六边形排列的纳米导线阵列的场发射性能随各种条件的变化趋势,计算结果显示可将场发射增强因子表示为 $\beta = \frac{h}{\rho} \left(\frac{1}{1+W} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+W} \right)^2 + 3$,其中 W 是以 R 为自变量的函数, R 为纳米导线的间距.结果显示纳米导线阵列的形状对其场发射性能的影响较小,而阵列间距是影响场发射性能的关键因素.进一步研究表明随着阵列数目的增加,最佳阵列间距会在一定程度上的减小同时场发射增强因子也会减小,而改变纳米导线阵列的矩阵数目基本不会改变阵列的场发射性能随间距的变化趋势.

2. 计算与讨论

采用和以前相同的镜像悬浮球模型^[16,21,22],具体如图 1 所示.其中假设所有纳米导线都是金属性

的,且与负极板相连可以认为电势为零,而阳极板电势设为 V_a ,满足 $V_a = E_m d$.但是实际上目前为止用作场发射器件的纳米导线大多数都是半导体,与我们讨论的情况有些不同,但是由于纳米导线的长度与电场板极之间的距离相差太大,基本不会影响该模型的建立以及后续的模拟计算.纳米导线阵列以正方形及六边形排列,间距为 R (如图 2).对于一般的准一维纳米材料来说,由于 $R \gg \rho$, $h \gg \rho$,在纳米导线阵列场发射性能的计算和模拟的过程中,只考虑 ρ/R , ρ/h 一次项的贡献,而忽略高阶项的作用.

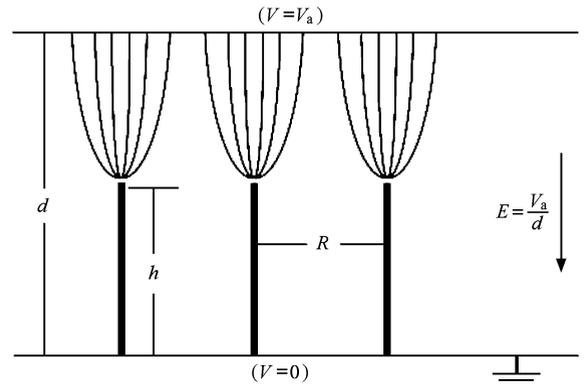


图 1 纳米导线的镜像悬浮球模型

在不考虑极板间距影响的条件下,以 O 为原点代表计算镜像球的中心位置,分别建立坐标系,则两层小球的坐标分别定义为 $(xR, yR, 0)$ (xR, yR, h) .如图 2 所示,根据余弦定理得到 (x, y) 点镜像球距离 O 的距离为 $R T(x, y) = RT(x, y)$,其中正方形为 $T(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2}$,而六边形为 $T(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2 + xy}$.假设 $h = NR$,利用以前的计算方法^[21,22],考虑所有镜像电荷对 O 附近点 (r, θ, φ) 电势的作用,可以得到两层带电小球对计算小球的电势贡献为

$$\varphi(r, \theta) = \frac{-Q}{4\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{r}{2h} \right) + \frac{-QK}{4\pi\epsilon_0 R} + E_m h + \frac{-P}{4\pi\epsilon_0 r^2} \cos\theta + E_m r \cos\theta,$$

其中 $K = \sum_{x=0}^L \sum_{y=1}^L \left[\frac{U}{T(x, y)} - \frac{U}{\sqrt{T^2(x, y) + (2N)^2}} \right]$, U 是常数(正方形: $U = 4$, 六边形: $U = 6$).根据静电场理论,静电场中导体表面电势为零,则有

$$\frac{-Q}{4\pi R\epsilon_0} 4K + \frac{-4Q}{4\pi R\epsilon_0} + \frac{4Q}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{R^2 + 4h^2}}$$

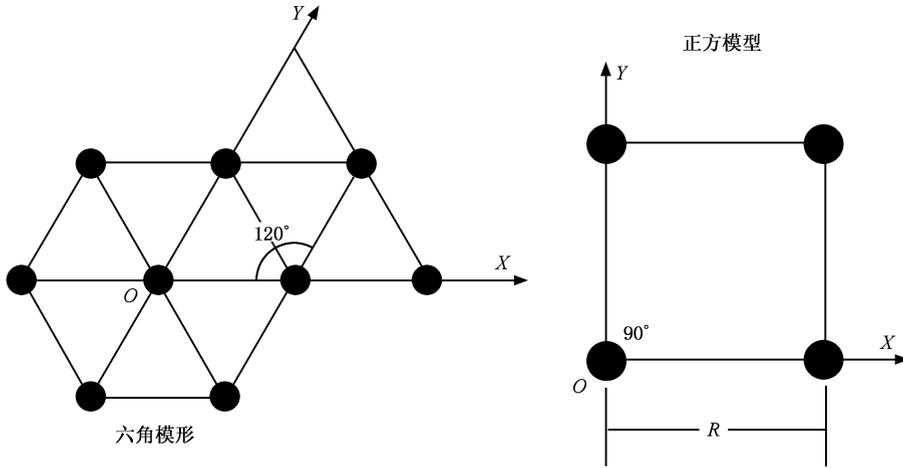


图 2 正方形及六边形纳米导线阵列的计算模型

$$+ \frac{-Q}{4\pi r \epsilon_0} \left(1 - \frac{r}{2h}\right) + E_m h \Big|_{(r=\rho)} = 0,$$

$$\frac{-P}{4\pi \epsilon_0 r^2} \cos\theta + E_m r \cos\theta \Big|_{r=\rho} = 0.$$

解上述方程,可得

$$Q = 4\pi \epsilon_0 E_m h \rho \left(1 + W - \frac{\rho}{2h}\right),$$

$$P = 4\pi \epsilon_0 E_m \rho^3,$$

其中 $W \left(\equiv \frac{\rho K}{R}\right)$ 也是 R 的函数. 又因为 $\rho/2h \ll 1 < 1$

+ W (根据 $\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots$) 忽略高阶项的影响上式可以近似为

$$Q = 4\pi \epsilon_0 E_m h \rho \left(\frac{1}{1+W}\right) \left(1 + \frac{\rho}{2h(1+W)}\right),$$

$$P = 4\pi \epsilon_0 E_m \rho^3.$$

代入电势的表达式在纳米导线顶端处的场强为

$$E_a = - \left[\frac{\partial \phi(r, \theta = 0)}{\partial r} \right]_{r=\rho}$$

$$= - E_m \left(\frac{h}{\rho} \left(\frac{1}{1+W}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+W}\right)^2 + 3 \right),$$

对六边形及正方形排列的纳米导线阵列来说,场增强因子均可以表示为

$$\beta = \frac{h}{\rho} \left(\frac{1}{1+W}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+W}\right)^2 + 3.$$

3. 结果与讨论

通过计算得到与理论分析相同的结果^[23],单根纳米导线的场发射因子是最大的,由于纳米导线之间强烈的相互作用,所以单根纳米导线尖端的增强

因子的表达式认为是 $\beta_0 = h/\rho + 3.5$. 对于纳米导线阵列来说,由于纳米导线之间的同种电荷的库仑排斥作用,需要将上式单根纳米导线的公式调整为 $\beta = \frac{h}{\rho} \left(\frac{1}{1+W}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+W}\right)^2 + 3$, 其中 $W \left(\equiv \frac{\rho K}{R}\right)$ 是以 R 为自变量的函数. 针对阵列数目为 50 的正方形与六边形的纳米导线阵列,图 3 中分别给出 K 随导线间距 R 的变化曲线. 图中显示当 R 趋向于无穷大时, $\lim_{R \rightarrow \infty} K = 0$, 则 $\lim_{R \rightarrow \infty} W = 0$, 这又是单根纳米导线的情况. 而上面纳米导线阵列的场发射增强因子的公式在这种情况下也变为 $\beta = h/\rho + 3.5$, 与单根纳米导线的情况相符合: $\beta_0 = h/\rho + 3.5$ ^[16].

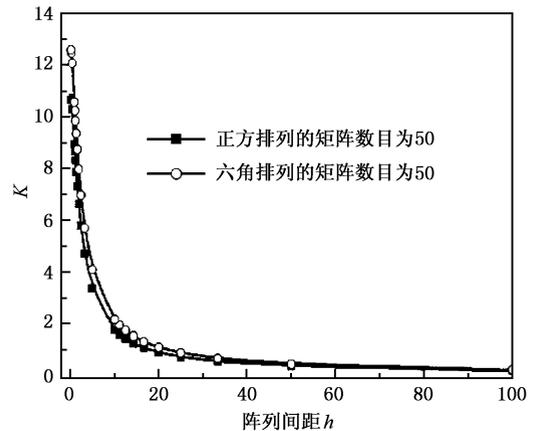


图 3 K 随阵列间距的变化曲线

如图 4 及图 5 所示,对于以正方形、六边形排列的纳米导线阵列,其中考虑了几种不同阵列数目的纳米导线阵列,每一种情况都给出了场发射增强因子随阵列间距的变化情况. 从图中可以看出导线间

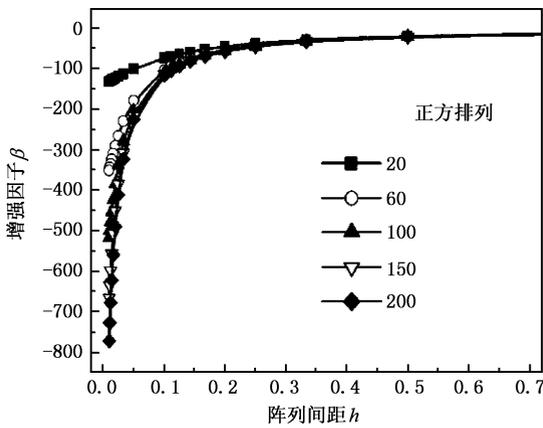


图 4 正方形排列的不同数目纳米导线阵列增强因子随阵列间距的变化曲线

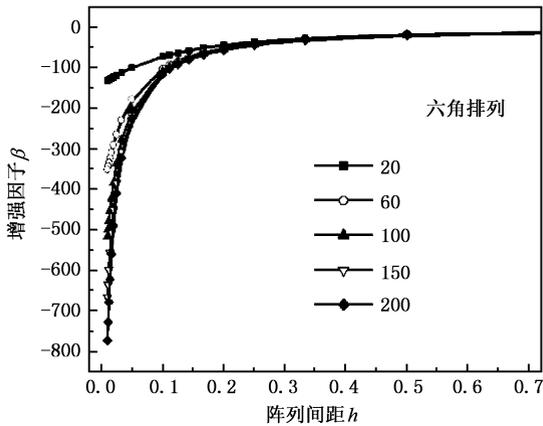


图 5 六边形排列的不同数目纳米导线阵列增强因子随阵列间距的变化曲线

距对纳米导线阵列的场增强因子有显著的影响： $R < \frac{1}{3}h$ 场发射增强因子随阵列间距的减小而急剧减小； $R > \frac{1}{3}h$ 场发射增强因子基本上保持不变，近似等于单根的场发射增强因子 β_0 。当纳米导线排列比较密集时，纳米导线顶端的带电小球会发生相互强烈的库仑排斥作用，在很大程度上削弱和降低了导线尖端的实际电场强度，使场发射性能降低，场增强因子变小；反之当阵列排列较稀疏时，虽然纳米导线的场发射因子不会有太大变化，但是随导线间距的增大，没有足够数目的纳米导线得到足够大的场发射电流密度。只有 $R = \frac{1}{3}h$ 时，既可以保证得到较大的尖端电场使电子得以顺利发射，又有足够数目的纳米导线来保证获得较高的发射电流密度。通过

对不同数目的导线阵列的场发射增强因子的对比可以看出，阵列数目对场发射增强因子有一定的影响。当阵列间距一定时，场发射增强因子会随着阵列数目的增加而不断减小，但是场发射增强因子随间距的变化趋势也基本不变。

继续考虑当阵列数目较小时正方形及六边形的纳米导线阵列的场发射增强因子随阵列间距的变化趋势，得到了与上面类似的结论（如图 6 及图 7 所示）。随着阵列数目的增加场发射增强因子的变化相对剧烈（变小），但是总体上不会影响场发射增强因子随阵列间距的变化趋势。图中显示，阵列间距仍是纳米导线场发射性能的关键因素：当 $R < 2h$ 时，场发射增强因子随着阵列间距的减小而急剧减小；当 $R > 2h$ 时，场发射增强因子基本保持不变。考虑到场发射电流密度，认为 $R = 2h$ 时纳米导线阵列的场发射性能最佳。结合图 4 及图 5 可以认为随着阵列数目的增加，纳米导线阵列场发射性能的最佳的阵列间距却不断减小，即阵列的场发射性能的导线间距从 $2h$ 向 $\frac{1}{3}h$ 过渡。对于一般的场发射器件来说，各种纳米导线的数目都是很大的，因此对于利用纳米导线作为场发射器件时，将纳米导线的间距控制在导线高度一半左右时，器件的场发射性能最佳。

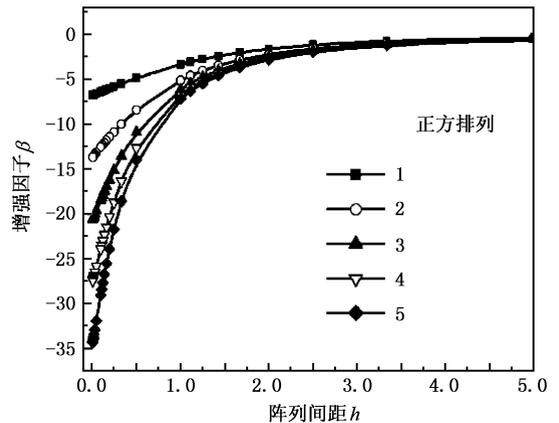


图 6 正方形排列数目较少时导线阵列增强因子随阵列间距的变化曲线

在实验中对纳米导线阵列的场发射性能进行测试也发现由于电场屏蔽作用，得到了一致的结论：阵列间距可以在很大程度上影响它们的场发射性能。当导线间距过大时，场发射电流密度较小，得到的场发射图形或信号比较弱，反之若间距较小，场发射增强因子会急剧减小。大量的实验^[17-19]直接对制备的纳米碳管阵列进行场发射性能测试，由于实验条件

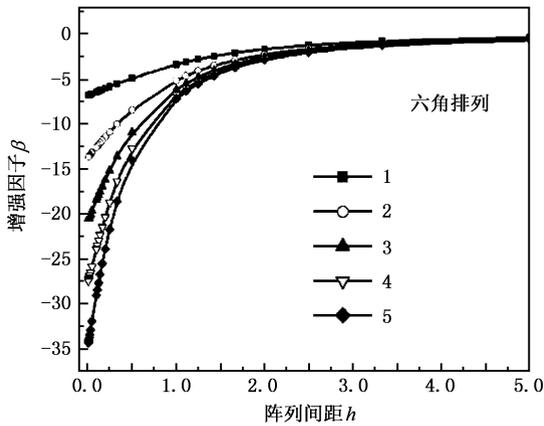


图7 六边形排列数目较少时导线阵列增强因子随阵列间距的变化曲线

及其他因素的影响使纳米碳管阵列在高度上以及导线间距上不能达到完全一致,因此得到了一个相对的近似值,当碳管间距是高度的2倍时纳米碳管阵列的场发射性能最佳.而 Suh 等^[20]用多空氧化铝制备纳米碳管阵列并利用 Ar^+ 对制备的导线阵列进行离子铣削,得到高度一致的纳米导线阵列,测试表明当导线间距与碳管高度相当时,纳米导线阵列的场发射性能最好.以氧化铝模板制备的纳米导线的间距基本上是一致的,他们得到了与我们计算结果相类似的结论,即当纳米碳管阵列的阵列间距相差不大时,纳米导线阵列的场发射性能可以得到优化.此外,我们还用计算机对纳米碳管阵列的场发射行为进行数值模拟^[8],得到了和上面理论计算相似的结果.但是由于实际实验中,存在各种样品以及测量上的误差,导致测量值和我们的数值模拟理想情况产生一定的偏差.

同时,研究了阵列排列形状对纳米导线阵列场发射性能的影响,具体的实验结果见图8.图8中具体比较了阵列数目为50和400的正方形以及六边形的场发射增强因子的变化情况.结合图4、图5、图6及图7,可以看出排列形状对纳米碳管阵列的场发射增强因子的影响是比较小的.由于纳米导线的六边形排列在一定程度上较正方形密集,因此六边形

排列的纳米导线阵列的场发射增强因子的变化情况在一定程度上比正方形的要剧烈一些,但是随着阵列数目的增加,这种趋势将变得不明显(数目为400时,变化曲线基本上重合).由此可见,阵列数目以及排列形状对纳米导线阵列场发射性能的影响很小,而间接证明了阵列间距对纳米导线阵列场发射性能研究的重要性.

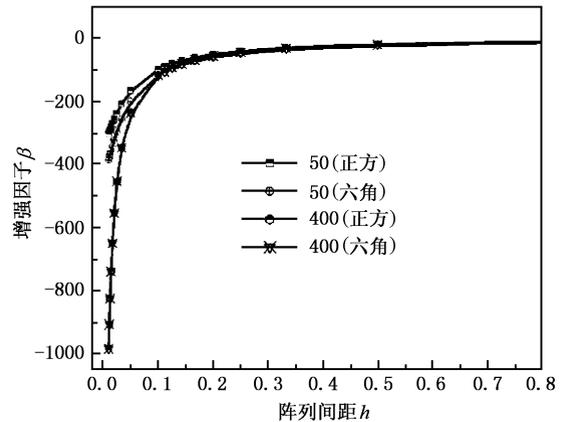


图8 阵列形状对纳米导线场发射增强因子的影响

4. 结 论

利用镜像悬浮球模型讨论了导线间距、阵列数目以及排列形状对纳米导线阵列的场增强因子的影响,得到如下表达式: $\beta = \frac{h}{\rho} \left(\frac{1}{1+W} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+W} \right)^2 + 3$, 其中 W 是以 R 为自变量的函数.结果显示纳米导线阵列间距对其场发射因子有着非常显著的影响,而阵列数目以及排列形状对纳米导线阵列的场发射增强因子的影响程度较小,基本不会改变场发射增强因子随阵列间距的变化趋势.对于一般的场发射器件来说,结合实际情况各种纳米导线的数目都是很大的,考虑到场发射电流密度等场发射性能,认为当纳米导线阵列间距为导线高度一半左右时,纳米导线阵列的场发射性能最佳,场发射器件的性能得到优化.

- [1] Duan X , Niu C , Sahi V , Chen J , Parce J W , Empedocles S , Goldman J L 2003 *Nature* **425** 274
- [2] Goldberger J , He R , Zhang Y , Lee S , Yan H , Choi H J , Yang P 2003 *Nature* **422** 599
- [3] Hsieh C T , Chen J M , Lin H H , Shih H C 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 3383
- [4] Yamashita T , Hasegawa S , Nishida S , Ishimaru M , Hirotsu Y , Asahi H 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 082109
- [5] Song L , Liu S , Zhang G M , Liu L F , Ma W J , Liu D F , Zhao X W , Luo S D , Zhang Z X , Xiang Y J , Shen J , Zhou J J , Wang G , Zhou W Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 422
- [6] Zhou G , Duan W H 2005 *J. Nanosci. Nanotechno.* **5** 1421
- [7] Zhang Z X , Hou S M , Zhao X Y , Zhang H , Sun J P , Liu W M , Xue Z Q , Shi Z J , Gu Z N 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 434(in Chinese)[张兆祥、侯士敏、赵兴钰、张浩、孙建平、刘惟敏、薛增泉、施祖进、顾镇南 2002 物理学报 **51** 434]
- [8] Wang X Q , Wang M , Ge H L , Chen Q , Xu Y B 2005 *Physica E* **30** 101
- [9] Buldum A , Lu J P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 236801
- [10] Zheng X , Chen G H , Li Z , Deng S , Xu N 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 106803
- [11] Zhao Q , Zhang H Z , Zhu Y W , Feng S Q , Sun X C , Xu J , Yu D P 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 203115
- [12] Li S Y , Lin P , Lee C Y , Tseng T Y 2004 *J. Appl. Lett.* **95** 3711
- [13] Zhou G , Duan W H , Gu B G 2004 *J Chem. Phys.* **121** 12600
- [14] Zhou G , Duan W H , Gu B G 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 095504
- [15] Zhou G , Wu J , Duan W H , Gu B G 2004 *Phys. Rev. B* **70** 035405
- [16] Wang X Q , Wang M , Li Z H , Yang B , Wang F F , He P M , Xu Y B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1347(in Chinese)[王新庆、王森、李振华、杨兵、王凤飞、何丕模、徐亚伯 2005 物理学报 **54** 1347]
- [17] Teo K B K , Chhowalla M , Amaratunga G A J , Mlne W I , Pirio G , Legagneux P , Wyczisk F , Pribat D , Hasko D G 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2011
- [18] Choi J H , Choi S H , Han J H , Too J B , Park C Y , Jung T , Yu S G , Han I T , Kim J M 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 487
- [19] Nilsson L , Groening O , Emmenegger C , Kuettel O , Schaller E , Schlapbach L , Kind H , Bonard J M , Kern K 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2071
- [20] Suh J S , Jeong K S , Lee J S , Han I 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2392
- [21] Wang M , Shang X F , Li Z H , Wang X Q , Xu Y B 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 797(in Chinese)[王森、尚学府、李振华、王新庆、徐亚伯 2006 物理学报 **55** 797]
- [22] Wang X Q , Wang M , Li Z H , Chen Q , Xu Y B , He P M 2005 *Ultramicroscopy* **102** 181
- [23] Mayer A , Miskovsky N M , Cutler P H , Lambin Ph 2003 *Phys. Rev. B* **68** 235401

Influence of arrangement and matrix number on the field emission from conductive nanowire array^{*}

Luo Min¹⁾ Wang Xin-Qing^{1)†} Ge Hong-Liang^{1)‡} Wang Miao³⁾ Xu Ya-Bo³⁾ Chen Qiang^{1)‡}
 Li Li-Pei¹⁾ Chen Lei¹⁾ Guan Gao-Fei¹⁾ Xia Juan¹⁾ Jiang Feng¹⁾

1) *Department of Physics, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China*

2) *Zhejiang Province Key Laboratory of Magnetism, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China*

3) *Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China*

(Received 10 March 2006 ; revised manuscript received 11 April 2006)

Abstract

In order to further study the influence of the arrangement and matrix number of the conductive nanowires array on the field emission from the array, the more practical conductive hexagonal and square nanowire arrays were simulated with the mirror image floating sphere model in this paper. From the calculation results, the field enhancement factor of conductive nanowire array was expressed as the following expression: $\beta = \frac{h}{\rho} \left(\frac{1}{1+W} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+W} \right)^2 + 3$, in which h is the height of conductive nanowire, ρ is the radius and W is a function of the independent variable R , R is the interwire distance. All calculated results indicated that the arrangement of conductive nanowires array has less influence on the field emission, while the interwire distance critically affects the field emission. As $R < R_0$, the field enhancement factor decreases rapidly with R . When $R > R_0$, the enhancement factor hardly changes, where R_0 is the optimized interwire distance. The performance of field emission from conductive nanowire array hardly changes with the matrix number of the array, which only influences on the gradient curve of the enhancement factor. R_0 would decrease to some extent with the increasing of the matrix number.

Keywords : conductive nanowire, field emission, enhancement factor, matrix number

PACC : 7210, 7220H, 7390

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 20571067).

[†] E-mail : wxqano@cjlu.edu.cn