

单根纳米导线场发射增强因子的计算^{*}

王新庆¹⁾ 王 森^{1)†} 李振华²⁾ 杨 兵¹⁾ 王凤飞¹⁾ 何丕模¹⁾ 徐亚伯¹⁾

¹⁾ 浙江大学物理系, 杭州 310027)

²⁾ 浙江大学力学系, 杭州 310027)

(2004 年 5 月 14 日收到, 2004 年 6 月 15 日收到修改稿)

利用镜像电荷模型, 对静电场中单根纳米导线尖端的电势和电场进行计算, 得到纳米导线发射体尖端场增强因子表达式为 $\beta_0 = h/\rho + 3.5$. 若考虑极板间距对场增强因子的影响, 则场增强因子的表达式调整为 $\beta = \frac{h}{\rho} + 3.5 + A\left(\frac{h}{d}\right)^3$, 其中 h, ρ 分别为纳米导线的长度和半径, d 为极板间距, A 为常数. 结果表明纳米导线的长径比对场增强因子的影响最显著, 而极板间距对纳米导线的场增强因子只有微弱影响, 随极板距离的增加而减小.

关键词: 纳米导线, 场发射, 增强因子, 极板间距

PACC: 7210, 7220H, 7390

1. 引言

纳米导线具有独特的准一维结构以及优异的物理化学特性, 引起了科学家的广泛重视和研究, 使其在作为场发射器件、场效应三极管、纳米电子器件以及纳米传感器等方面都具有潜在的应用前景^[1-5]. 通常用于场发射的纳米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($1-100\text{nm}$), 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较容易通过大大变薄的势垒而逸出表面, 形成场发射电子. 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, 有望在场发射电子源、场发射平面显示器以及场发射器件等方面得到应用^[6-9].

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, 使纳米导线在场发射方面的理论研究显得滞后. 目前理论方面的研究主要集中在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^[10-14], 都得到了场增强因子与纳米导线长径比密切相关的结论: $\beta \propto (h/\rho)$, 其中 h 和 ρ 分别为纳米导线的高度和半径. 但是以上结论都建立在极板间距远远大于纳米导线长度的前提下, 所以有必要研究极板间距对纳米导线作为发射体的场增强因子的影响.

本文利用镜像电荷法, 对竖立在阴极表面的单根纳米导线的场发射因子进行计算, 在不考虑极板间距影响时, 得到纳米导线场增强因子的表达式为 $\beta_0 = (h/\rho) + 3.5$; 若考虑极板间距对纳米导线场增强因子的影响, 对场增强因子进行修正, 得到 $\beta = \frac{h}{\rho} + 3.5 + 1.202\left(\frac{h}{d}\right)^3$, 其中 d 为极板间距. 结果表明纳米导线的长径比对其场增强因子有很大影响, 而极板间距对纳米导线的场增强因子只有微弱影响.

2. 计算与讨论

2.1. 镜像电荷模型的建立

设纳米导线的形状为冠以半球的圆柱, 并竖立在负极板上处于强度为 E_m 的匀强电场中, 处于待发射状态, 纳米导线的半径和长度分别为 ρ 和 h ,

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 60271009)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: miaowang@css.zju.edu.cn

纳米导线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 $V_a = E_m d$.

由于电场的作用使纳米导线上的感应电荷绝大部分都处于顶端半球及其附近,又由于纳米导线直径很小,因此可以将顶端(包括半球及其以下长度等于半径的一小段圆柱)简化为带电量为 $-Q$ 的圆球,同时由于纳米导线的直径很小,球下部分基本可以认为是接地的一维导线,用以保证纳米导线与负极板具有相同的电势. 通过唯一性定理,可以判断接地导线的存在只会影响球以下导线及其附近的电势和电场分布,基本上不会改变球顶端的电势与电场的分布. 进一步简化可以得到如图 1 所示纳米导线场发射模型,其中虚线代表接地线的作用,即保证球的电势与阴极一致而又不影响虚线及其邻近空间的电势分布. 纳米导线场发射性能的研究主要是集中在场发射体尖端的电子行为,因此可以认为该模型适用于研究纳米导线的场发射特性.

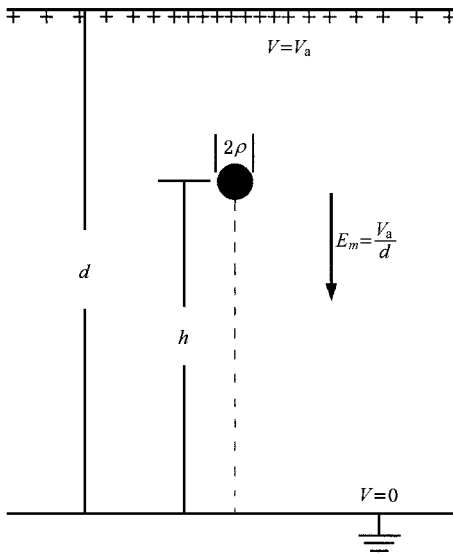


图 1 纳米导线场发射简化模型

2.2. 纳米导线场增强因子的计算

首先不考虑极板间距对纳米导线场发射性能的影响(即 $d \rightarrow \infty$),先重复 Miller^[15]的镜像法来求球外的电势分布. 基于唯一性定理,必须保证球面和负极板的电势为零. 为此,引入一对镜像点电荷 $-Q$ 与 $+Q$,一对方向垂直于极板的镜像电偶极矩 $-P$,以及与实际阴阳极板电荷相反的镜像面电荷(所有这些正负电荷的位置对于阴极板位置都对称,而阴极板总面电荷为零.)如图 2 所示. 以球的中心为

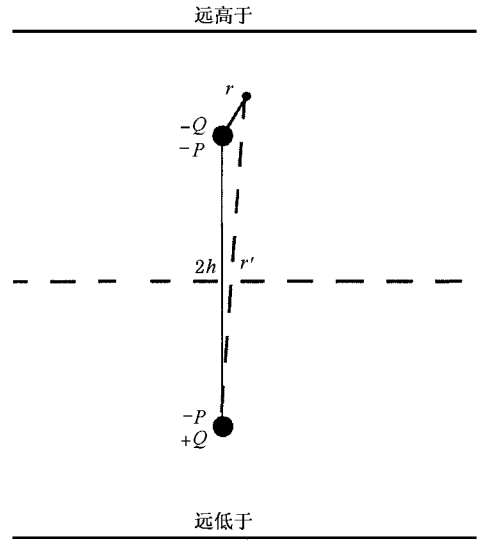


图 2 不考虑极板间距影响时纳米导线的镜像电荷模型

原点, 竖直向上的方向为 z 轴, 建立坐标系. 在球坐标系下, 靠近球面的点 (r, θ) 的电势可以表示为

$$\varphi(r, \theta) = \left\{ \left[-Q/r - (P \cos \theta)/r^2 + Q/r' - (P \cos \theta')/r'^2 \right] + E_m(h + r \cos \theta) \right\} / 4\pi\epsilon_0, \quad (1)$$

其中 (r', θ') 为点 (r, θ) 在镜像电荷 $+Q$ 为坐标原点的坐标系中的坐标, 且具有如下关系:

$$r'^2 = (2h)^2 + r^2 + 2(2h)r \cos \theta, \\ r' \cos \theta' = r \cos \theta + 2h.$$

如果 r 很小(达到 ρ 的量级), 对上式进行 r/h 的一阶近似, 可得

$$1/r' \simeq [1 - (r \cos \theta)2h]/2h, \\ \cos \theta' \simeq [1 - (r^2 \cos^2 \theta)/4h^2].$$

代入(1)式, 得到在电荷 $-Q$ 附近的电势为

$$\varphi(r, \theta) \simeq \left[-Q(1 - r/2h) \right] / (4\pi\epsilon_0 r) + E_m h - (P \cos \theta) / (4\pi\epsilon_0 r^2) + E_m r \cos \theta. \quad (2)$$

为了保证纳米导线表面($r = \rho$)的电势为零, 代入(2)式, 可得

$$Q = 4\pi\epsilon_0 E_m h \rho (1 + \rho/2h), \quad P = 4\pi\epsilon_0 E_m \rho^3.$$

在纳米导线顶端处的场强为

$$E_a = - \left[\frac{\partial \varphi(r, \theta = 0)}{\partial r} \right]_{r=\rho} \\ = - \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 \rho^2} - \frac{2P}{4\pi\epsilon_0 \rho^3} - E_m \\ = - E_m \left(\frac{h}{\rho} + 3.5 \right),$$

因此可以得到在纳米导线顶端的场发射因子表达式为

$$\beta_0 = E_a/E_m = h/\rho + 3.5. \quad (3)$$

如果不考虑极板间距的影响,得到的纳米导线顶端场发射增强因子的表达式为 $\beta_0 = h/\rho + 3.5$,与同等条件下其他计算的结果相符合^[16],表明本文建立的接地镜像电荷模型是合理的.

2.3. 极板间距对纳米导线场发射增强因子的影响

当考虑极板间距对纳米导线场发射性能影响时,则镜像电荷模型如图 3 所示,必须考虑一系列次邻近对称镜像电荷对增强因子的作用.首先只考虑 4 个邻近电荷对纳米导线顶端附近电势的作用,如图 3 中对于 A, B 两个镜像电荷产生的电势应为

$$\frac{-Q}{4\pi\epsilon_0 r_A} + \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r_B}, \text{ 其中 } r_A, r_B \text{ 可以表示为}$$

$$r_A^2 = (2d)^2 + r^2 - 2(2d)r\cos\theta,$$

$$r_B^2 = (2d - 2h)^2 + r^2 - 2(2d - 2h)r\cos\theta.$$

因为所计算电势是在纳米导线顶端附近,可取 r 远小于 d 和 h ,忽略高阶项,则可以得到

$$1/r_A \doteq [1 + (r\cos\theta)/2d]/2d,$$

$$1/r_B \doteq [1 + (r\cos\theta)/2d + h/d]/2d.$$

同理可以得到

$$1/r_C \doteq [1 - (r\cos\theta)/2d]/2d,$$

$$1/r_D \doteq [1 - (r\cos\theta)/2d - h/d]/2d.$$

因此对于次邻近 4 个镜像电荷对电势的贡献为

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{-Q}{r_A} + \frac{Q}{r_B} + \frac{-Q}{r_C} + \frac{Q}{r_D} \right] = 0$$

(由于次近邻镜像电荷的对称性,它们偶极子对电势的贡献可以相互抵消).因此可以认为在只考虑一阶项的条件下,纳米导线顶端场增强因子的表达式也遵从(3)式; $\beta = \beta_0 = h/\rho + 3.5$.

下面考虑高阶项对纳米导线场增强因子的影响来寻求增强因子的表达式.一般纳米导线的长径比数量级可达 10^2-10^3 ,而长度数量级为 $10\mu\text{m}$,实验中极板间距的数量级为 $100\mu\text{m}$.以前的计算忽略了 $(r/h)^2$ 以及高阶项,现在对于这些实际的数量级,保留到 $(h/d)^3$,只忽略 $(h/d)^4$ 以上高阶项的作用,这样可以得到以下的近似:

$$\frac{1}{r_A} \doteq \frac{1}{2d} \left[1 + \frac{r}{2d} \cos\theta \right],$$

$$\frac{1}{r_C} \doteq \frac{1}{2d} \left[1 - \frac{r}{2d} \cos\theta \right],$$

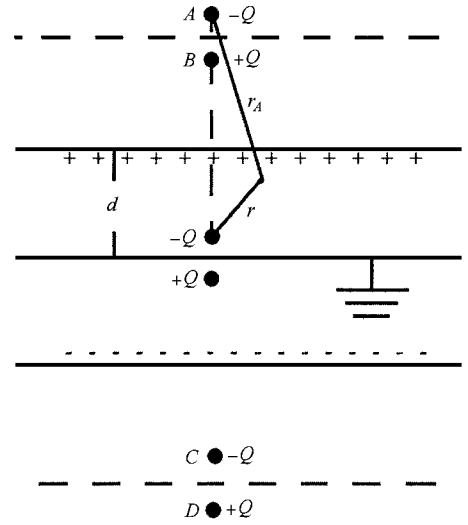


图 3 考虑极板间距影响时纳米导线的镜像电荷模型

$$\frac{1}{r_B} \doteq \frac{1}{2d} \left[1 + \frac{h}{d} + \left(\frac{h}{d} \right)^2 - \frac{3}{2} \left(\frac{h}{d} \right)^3 + \frac{r}{2d} \cos\theta \right],$$

$$\frac{1}{r_D} \doteq \frac{1}{2d} \left[1 - \frac{h}{d} + \left(\frac{h}{d} \right)^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{h}{d} \right)^3 - \frac{r}{2d} \cos\theta \right],$$

则 4 个次邻近镜像电荷的影响应该表示为

$$\begin{aligned} & \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \left[-\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} - \frac{1}{r_C} + \frac{1}{r_D} \right] \\ &= \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d} \left(\frac{h}{d} \right)^2, \end{aligned}$$

考虑到其他电荷的影响,则对电势的贡献为 $\frac{Q}{4\pi\epsilon_0}$

$$\frac{A}{d} \left(\frac{h}{d} \right)^2 \text{ 其中}$$

$$A = \left(1 + \left(\frac{1}{2} \right)^3 + \left(\frac{1}{3} \right)^3 + \left(\frac{1}{4} \right)^3 + \dots \right) \doteq 1.202,$$

则在计算电荷附近的电势应为

$$\begin{aligned} \varphi(r, \theta) &= -\frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{r}{2h} \right) + \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \\ &\times \left[\frac{1}{d} \left(\frac{h}{d} \right)^2 A \right] \\ &+ E_m h + \frac{-P}{4\pi\epsilon_0 r^3} \cos\theta + E_m r \cos\theta. \end{aligned}$$

在纳米导线表面电势为零,代入上式,则有

$$Q = 4\pi\epsilon_0 E_m h \rho \left[1 + \frac{\rho}{2h} + A \frac{\rho}{d} \left(\frac{h}{d} \right)^2 \right],$$

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

所以可以得到导线尖端的场增强因子公式为

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{h}{\rho} + 3.5 + A \left(\frac{h}{d} \right)^3 \\ &= \beta_0 + A \left(\frac{h}{d} \right)^3. \end{aligned} \quad (4)$$

3. 结果与讨论

利用简单的镜像电荷模型,得到了纳米导线顶端场增强因子的表达式($\beta_0 = h/\rho + 3.5$),与其他人的结果^[16]($\beta_0 = h/\rho + 3$)相类似,但稍大于其他人的结果,主要是由于模型假设所有的电荷都处于纳米导线的顶端,实际上在纳米导线的侧壁也会有少量的电子存在.但是从增强因子的表达式分析,镜像模型对于计算纳米导线的场增强因子还是合理、有效的.利用该模型也能合理地解释长径比对场增强因子的重要影响.纳米导线的长径比越大,就会有越多的待发射电子聚集在纳米导线的顶端,使局域电场得到进一步增强,获得更大的场发射因子.设纳米导线的长径比为零,则一维纳米导线将蜕变为零维的纳米颗粒.若不考虑极板间距的影响,则增强因子的表达式将变为 $\beta_0 = 3.5$,与其他人的计算结果也符合^[16],说明该镜像电荷模型也适用于纳米颗粒材料.若考虑极板间距对纳米颗粒材料的场发射性能的影响,利用镜像电荷模型,同样可以得到场增强因子的表达式为 $\beta = 3.5 + 1.202\left(\frac{h}{d}\right)^3$.

计算表明极板间距对纳米导线的场发射性能有微弱的影响,这与 Miller 的结果($\beta = \left(\frac{h}{\rho} + 2\right)\left(\frac{d-h}{d}\right)$)有很大差异^[15],主要是由于 Miller 关于宏观场强的定义 $E'_m = \frac{V}{d-h}$ 与本文的定义($E_m = \frac{V}{d}$)不同,因此可以看出 Miller 关于场增强因子的公式实际上没有给出与 d 之间的关系.在考虑极板间距的影响时,本文包括了原电荷、最近邻以及次近邻等镜像电荷对电场分布的影响,最终得到场增强因子的表达式为 $\beta = \frac{h}{\rho} + 3.5 + 1.202\left(\frac{h}{d}\right)^3$.若极板间距取为 $5h$,则场增强因子表达式可以调整

为 $\beta = \frac{h}{\rho} + 3.5 + 0.01$. 因此明显看出极板间距对场增强因子有微弱影响,场增强因子随极板距离的减小而增加.与纳米导线长径比的影响原理相类似,极板间距越小,则有更多的电力线移向从纳米导线尖端到上极板的空间内,这样可以在一定程度上使尖端电场得到增强.

场发射性能的重要指标包含:开启电压、阈值电压、场增强因子以及场发射电流密度等.由本文的计算看出极板间距对纳米导线的场增强因子影响很小,因此在实验中可以通过调节极板间距来降低纳米导线的开启电压及阈值电压.由于电压与极板间距呈正比, $V = Ed$,对于某一种纳米导线而言,其实现电子发射需要的电场是一固定值(或范围值),因此减小极板间距可以得到更小的开启电压和阈值电压.基本上不会改变纳米导线发射体尖端的场增强因子.计算表明减小极板间距对纳米导线场增强因子的影响很小,但是可以获得较低的阈值电压和开启电压,因此计算极板间距对场发射因子的影响具有现实意义.

4. 结 论

利用镜像电荷模型,对静电场中单根纳米导线尖端附近的电势和电场进行计算,得到纳米导线发射体尖端场增强因子表达式为 $\beta_0 = h/\rho + 3.5$.若考虑极板间距对纳米碳管场增强因子的影响,则可以调整纳米导线场增强因子的表达式,如(4)式.结果表明纳米导线的长径比对场增强因子的影响最显著,而极板间距对纳米导线场增强因子只有微弱影响,随极板间距的增加而增加.减小极板间距对纳米导线场增强因子的影响很小,但是可以获得较低的阈值电压和开启电压,因此计算极板间距对场发射因子的影响具有现实意义.

- [1] Duan X, Niu C, Sahi V, Chen J, Parce J W, Empedocles S and Goldman J L 2003 *Nature* **425** 274
- [2] Goldberger J, He R, Zhang Y, Lee S, Yan H, Choi H J and Yang P 2003 *Nature* **422** 599
- [3] Hsieh C T, Chen J M, Lin H H and Shih H C 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 3383

- [4] Sun L F, Xie S S, Liu W, Zhou W Y, Liu Z Q, Tang D S, Wang G and Qian L X 2000 *Nature* **403** 384
- [5] Wang M and Li Z H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 790 (in Chinese) 王森、李振华 2001 物理学报 **50** 790
- [6] Chen R S, Huang Y S, Liang Y M, Hsieh C S, Tsai D S and Tiong K K 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 1552

[7] Zhang Z X , Hou S M , Zhao X Y , Zhang H , Sun J P , Liu W M , Xue Z Q , Shi Z J and 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] Minh P N , Tuyen L T T , Ono T , Miyashita H , Suzuki Y , Mimura H and Esashi M 2003 *J. Vac. Sci. Technol. B* **21** 1705

[9] Li S Y , Lin P , Lee C Y and Tseng T Y 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 3711

[10] Zheng X , Chen G H , Li Z , Deng S and Xu N 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 106803

[11] Chang C S , Chattopadhyay S , Chen L C , Chen K H , Chen C W , Chen Y F , Collazo R and Sitar Z 2003 *Phys. Rev. B* **68** 125322

[12] Kokkorakis G C , Roumeliotis J A and Xanthakis J P 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 1468

[13] Glukhova O E , Zhibanov A I , Torgashov I G , Sinitsyn N I and Torgashov G V 2003 *Appl. Surf. Sci.* **215** 149

[14] Buldum A and Lu J P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 236801

[15] Miller H C 1967 *J. Appl. Phys.* **38** 4501

[16] Forbes R G , Edgcombe C J and Valdrè U 2003 *Ultramicroscopy* **95** 57

Calculation of the enhancement factor for the individual
conductive nanowire in field emission *

Wang Xin-Qing¹⁾ Wang Miao^{1)†} Li Zhen-Hua²⁾ Yang Bing¹⁾ Wang Feng-Fei¹⁾ He Pi-Mo¹⁾ Xu Ya-Bo¹⁾

¹⁾Department of Physics , Zhejiang University , Hangzhou 310027 , China)

²⁾Department of Mechanics , Zhejiang University , Hangzhou 310027 , China)

(Received 14 May 2004 ; revised manuscript received 15 June 2004)

Abstract

The potential and the electric field at the end of the individual nanowire under an electric field were calculated with the image charge model. With the nanowire as a field emitter , the enhancement factor was given by the expression : $\beta_0 = h/\rho + 3.5$. Taking into account the influence of the anode-cathode distance , the enhancement factor at the end of the nanowire could be adjusted based on the equation : $\beta = h/\rho + 3.5 + A(h/d)^3$, where h and ρ are the length and the radius of the nanowire respectively ; d is the anode-cathode distance and A is a constant. From the above results , it is concluded that the aspect ratio is the most important factor for the nanowire emitter and the anode-cathode distance also slightly influence the enhancement factor of the nanowire in field emission , and the enhancement factor increases with the decrease of the anode-cathode distance.

Keywords :: conductive nanowire , field emission , enhancement factor , anode-cathode distance

PACC : 7210 , 7220H , 7390

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.60271009).

[†]Corresponding author. E-mail : miaowang@css.zju.edu.cn