*01.1;06.1;13.2*

# Полевая эмиссия в нанотрубке длиной в несколько нанометров

© *Н.Р. Садыков, Р.С. Храбров, И.А. Пилипенко*

Снежинский физико-технический институт Национального исследовательского ядерного университета „МИФИ“, Снежинск, Челябинская обл., Россия
E-mail: n.r.sadykov@rambler.ru

*Поступило в Редакцию 6 апреля 2022 г.*
*В окончательной редакции 23 мая 2022 г.*
*Принято к публикации 2 июля 2022 г.*

Рассмотрена задача полевой эмиссии в углеродной нанотрубке, длина которой изменялась от нескольких нанометров до десятков нанометров. Получена функция прохождения частиц в предположении, что разность потенциалов на концах нанотрубок равна $U = 2-3.5$ V. На основе полученной функции прохождения частиц вычислен эмиссионный ток. Установлена зависимость функции Нордгейма от длины наночастиц. Рассмотрен предельный переход для коэффициента пропускания автоэмиссии с поверхности катода при отсутствии на ней наночастиц. Установлена линейная зависимость огибающих тока $I$ от напряженности поля $W$.

**Ключевые слова:** полевая эмиссия, нанотрубки, функции Нордгейма.

DOI: 10.21883/PJTF.2022.16.53205.19216

В случае полевой эмиссии требуются большие значения напряженности электрического поля (порядка $E = 10^9-10^{10}$ V/m), что приводит к возникновению сильных механических напряжений. Поэтому в случае полевой эмиссии материал иглы должен быть механически прочным, чтобы оставаться неповрежденным. В качестве таких механически прочных материалов можно рассматривать удлиненные карбины [1–4], двумерные структуры: нанотрубки и наноленты [5–7], где поперечные размеры вытянутых карбинов могут быть на три-четыре порядка меньше продольных. Это приводит к малым значениям фактора деполяризации вдоль наночастиц (к высокому аспектному отношению — отношению длины $L$ к диаметру нанотрубки $2R$), что в свою очередь ведет к тому, что электрическое поле вблизи наконечника углеродных нанотрубок (УНТ) в $\beta \approx L/(2R)$ раз превышает среднее значение поля [8]. При исследовании полевой эмиссии используются пучки однослойных УНТ [9,10]. Современные теории полевой электронной эмиссии берут свое начало в работе Фаулера и Нордгейма (FN) 1928 г. [11,12]. Сегодня теория FN описывается целым семейством различных форм уравнений Фаулера−Нордгейма [13].

В настоящей работе исходя из функции прохождения электронов, полученной на основе теоретических результатов и результатов численных расчетов, рассчитана величина тока через уединенную УНТ с металлическим типом проводимости (соответствует случаю неплотно упакованных УНТ). Установлена линейная зависимость тока $I$ от напряженности поля $W$, а также линейная зависимость огибающих функции $I/W^2$ от обратного значения напряженности поля $1/W$.

Чтобы определить ток при полевой эмиссии с острия наночастиц, базируясь на формуле Ландауэра, необходимо знать функции прохождения частицы от анода к катоду. Функция прохождения получена на основе теоретических результатов (рис. 1, $a$) и результатов численных расчетов (рис. 1, $b$) в предположении, что нанотрубка длиной $L_1$ находится на поверхности металлического катода с уровнем Ферми $U = U_1 = E_{\mathrm{F}}$ (более подробно см. [14]). В расчетах, приведенных на рис. 1, сплошные кривые соответствуют УНТ длиной $L_1 = 3.5$ (*1*), 3.0 (*2*), 2.5 (*3*), 2.0 nm (*4*) при напряженности поля $W = 10^9$ V/m; штриховые кривые отвечают УНТ длиной $L_1 = 7$ (*5*), 6 (*6*), 5 (*7*), 4 nm (*8*) при напряженности поля $W = 0.5 \cdot 10^9$ V/m; пунктирные кривые соответствуют УНТ длиной $L_1 = 14$ (*9*), 12 (*10*), 10 (*11*), 8 nm (*12*) при напряженности поля $W = 0.25 \cdot 10^9$ V/m (напряжения на концах нанотрубок равнялись $U = WL_1 = 3.5$, 3.0, 2.5, 2.0 V). При изменении длины нанотрубок в интервале $2 \leqslant L_1 \leqslant 14$ nm аспектное число в случае нанотрубок $(m, 0)$ типа „зигзаг“, где $m = 7$, будет лежать в интервале $3.65 \leqslant \beta \leqslant 25.5$. Пренебрегая наличием сил зеркального изображения, предположим, что потенциальная энергия $U(z)$ при наличии электрического поля $W \neq 0$ в области $z \geqslant L_1$ будет иметь вид $U_{ext} = -|e|Wz$, а внутри нанотрубки $(0 \leqslant z \leqslant L_1)$ потенциальную энергию (внутри мелкой потенциальной ямы) аппроксимируем прямоугольной формой (более подробно см. [14])

$$U(z) = \begin{cases} U_1, & z < 0, \\ U_{2a}, & 0 \leqslant z \leqslant L_1, \\ -|e|Wz, & z > L_1. \end{cases} \qquad (1)$$

В расчетах полагалось, что $U_1 = -4$ eV, $U_2 = -6.4$ eV. Исходя из потенциала (1) запишем решение уравнения Шредингера

$$\psi(z) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z}, & z < 0, \\ A_2 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-ik_2 z}, & 0 \leqslant z \leqslant L_1, \\ C\chi(z), & z \geqslant L_1, \end{cases} \qquad (2)$$

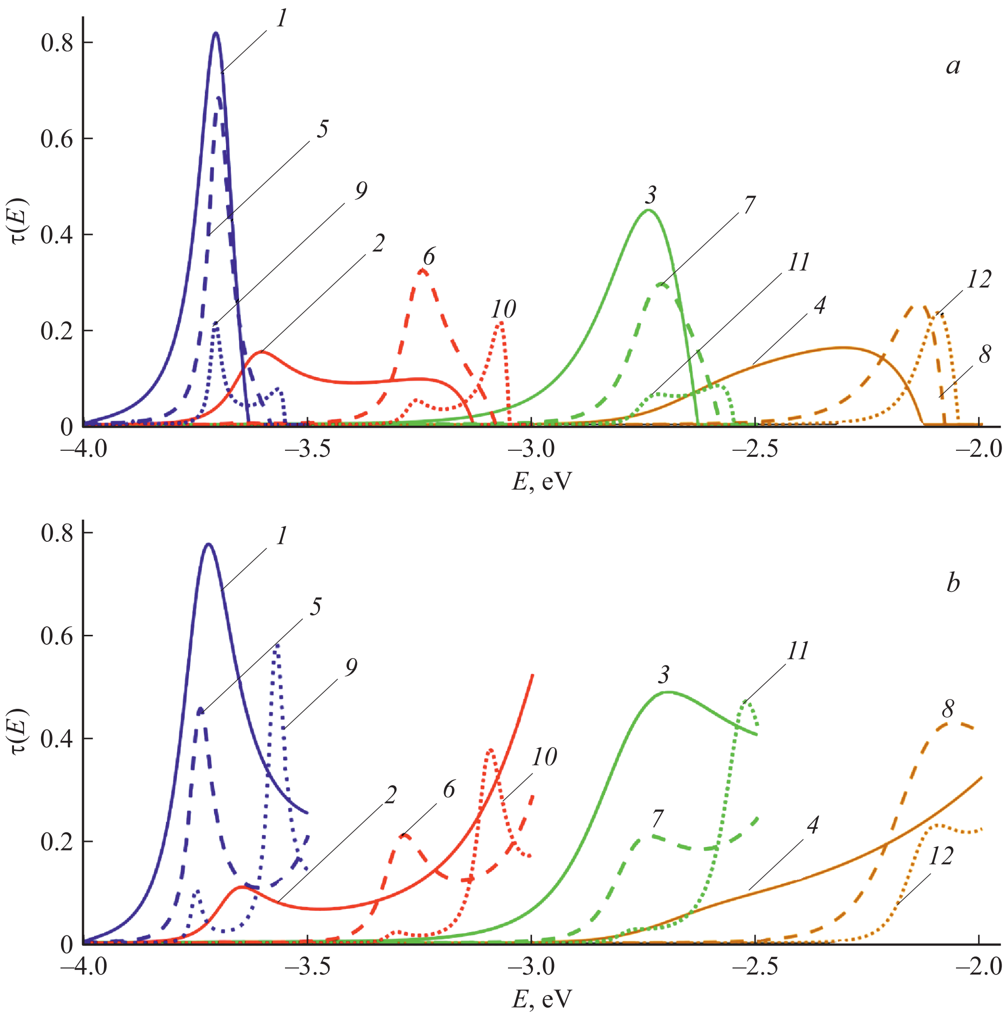


**Рис. 1.** Зависимость функции прохождения от энергии электронов $E$.

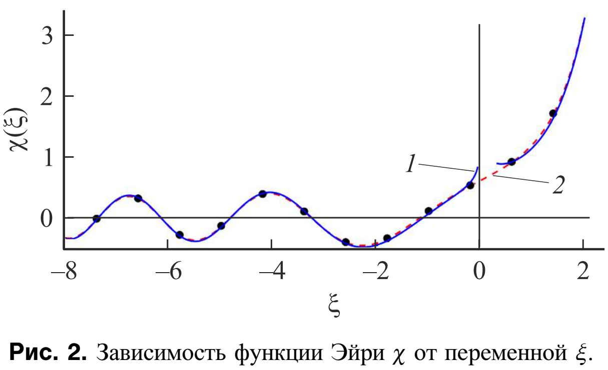


**Рис. 2.** Зависимость функции Эйри $\chi$ от переменной $\xi$.

где $k_1 = \sqrt{2m|E - U_1|}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m|E - U_{2a}|}/\hbar$. Функция Эйри $\chi(z)$ является решением уравнения $\partial^2\psi/\partial\xi^2 - \xi\psi = 0$, где $\xi = (2m|e|W/\hbar^2)^{1/3}(L_2 - z)$, $L_2 = -E/(|e|W)$, $E$ — энергия частицы.

Функция прохождения, изображенная на рис. 1, *a*, вычислялась, когда функция Эйри (кривая *1* на рис. 2) была получена аналитически (методом перевала [15], должно выполняться условие $|\xi| \gg 1$)

$$\chi_1(\xi) = \begin{cases} \dfrac{-i}{2\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \exp\left[i\left(\dfrac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \dfrac{\pi}{4}\right)\right], & \xi < 0, \\ \dfrac{-i}{2\sqrt{\pi}\xi^{1/4}} \exp\left(\dfrac{2}{3}\xi^{3/2}\right), & \xi > 0. \end{cases} \tag{3}$$

С учетом функции Эйри (3) получим выражение для функции прохождения в зависимости от энергии частицы и из условия неразрывности функции $\psi(z)$ и производной функции $\partial\psi/\partial z$ из (2) (условие неразрывности плотности тока $j = i\hbar(\psi\partial\psi^*/\partial z - \psi^*\partial\psi/\partial z)/(2m)$) в точках разрыва $z = 0$, $z = L_1$ (более подробно см. [14])

$$\tau = \left|\frac{C}{A_1}\right|^2 \frac{1}{k_1}\left(|\chi|^2 \frac{d\eta}{dz}\right)\Bigg|_{z > L_2}$$

$$= \frac{2\kappa k_2}{k^2 + k_2^2} \frac{2k_1k_2}{k_1^2 + (k_2^2 - k_1^2)\sin^2(k_2L_1 - \varphi_0)} D(y),$$

$$D = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m|E|^3}}{3\hbar} \frac{1}{|e|W}\Theta(y)\right],$$

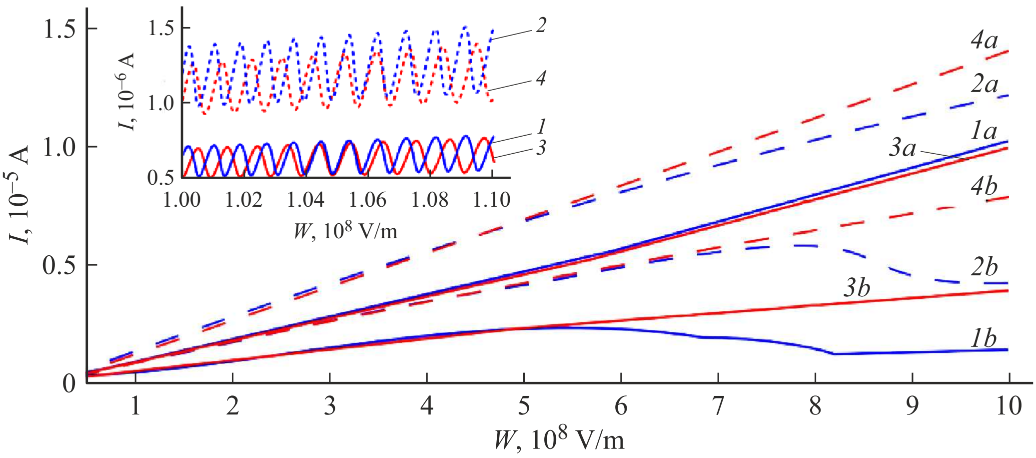


**Рис. 3.** Токи через УНТ при различных напряжениях $U$ на концах нанотрубок.

$$\Theta(y) = (1-y)^{3/2}, \quad y = \frac{L_1}{L_2},$$

$$\eta = \frac{2}{3}|\xi|^{2/3}, \quad \varphi_0 = \arctan(\kappa/k_2),$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m|e|W(L_2-L_1)}}{\hbar}\left|1 - \frac{1}{4\xi^{3/2}|_{z=L_1}}\right|. \qquad (4)$$

В работе [14] при выводе выражения для функции прохождения величина $\kappa$ в отличие от (4) равнялась $\kappa = \sqrt{2m|e|W(L_2-L_1)}/\hbar$, что приводило к тому, что в работе [14] коэффициент прохождения был больше единицы. Наличие слагаемого $1/4\xi^{3/2}|_{z=L_1}$ у величины $\kappa$ из (4) объясняется тем, что в системе уравнений при вычислении величины $(\partial\chi/\partial z)|_{z=L_1}$ не учитывалось влияние предэкспоненциальной части у величины $\chi$ из (3). Величины $k_1$, $k_2$, $\xi$ определены после выражения (2). В (4) величина $C/A_1$ вычисляется в соответствии с методом Крамера [15] для системы линейных уравнений из неизвестных $B_1$, $A_2$, $B_2$, $C$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2,$$

$$A_1k_1 - B_1k_1 = A_2k_2 - B_2k_2,$$

$$A_2e^{ik_2L_1} + B_2e^{-ik_2L_1} = C\chi(L_1),$$

$$iA_2k_2e^{ik_2L_1} - iB_2k_2e^{-ik_2L_1} = C\left(\frac{\partial\chi}{\partial z}\right)\Big|_{z=L_1}, \qquad (5)$$

где при выводе функции прохождения из равенства (4) учтено, что имеет место $|\chi|^2\,\big|_{z>L_2} = 4\pi|\xi|^{1/2}$.

Функция прохождения, изображенная на рис. 1, *b*, вычислялась, когда в качестве решения уравнения Шредингера $\partial^2\psi/\partial\xi^2 - \xi\psi = 0$ мы использовали линейную комбинацию функций Эйри первого $Ai(\xi)$ и второго $Bi(\xi)$ родов ([15], с. 116) (кривая *2* на рис. 2), полученных численно с помощью пакета программ MATLAB.

В работе ток при полевой эмиссии с острия наночастиц вычислялся по формуле Ландауэра [16,17] (подробнее см. [14]) с использованием функции прохождения частицы от анода к катоду (рис. 1). На рис. 3 приведена зависимость огибающих тока $I$ в уединенной УНТ от напряженности поля $W$ при постоянном значении напряжения $U$ на концах УНТ, где $5\cdot10^7 \leqslant W \leqslant 10^9$ V/m, $U = WL_1$, $L_1$ — длина нанотрубки. На рис. 3 сплошные кривые соответствуют случаю, когда функция прохождения аппроксимировалась асимптотическим решением (3), а штриховые кривые отвечают случаю, когда решению функции Эйри соответствует кривая *2* на рис. 1. На рис. 3 кривые *1a*, *1b*, *2a*, *2b* соответствуют напряжению $U = 3.5$ V на концах нанотрубок, а кривые *3a*, *3b*, *4a*, *4b* — напряжению $U = 3.0$ V. На вставке приведена аналогичная зависимость тока от напряженности поля в интервале $10^8 \leqslant W \leqslant 1.1\cdot10^8$ V/m, кривые *1–4* соответствуют огибающим (*1a*, *1b*)–(*4a*, *4b*). Область изменения напряженности поля $5\cdot10^7 \leqslant W \leqslant 10^9$ V/m означает, что при напряжении $U = 3.5$ V на концах нанотрубок их длина менялась в интервале $3.5 \leqslant L \leqslant 70$ nm, а при $U = 3.0$ V длина нанотрубок менялась в интервале $2.0 \leqslant L \leqslant 40$ nm.

Из рис. 3 видно, что токи, соответствующие штриховым кривым, больше токов, соответствующих сплошным кривым. Это объясняется тем, что в случае сплошных кривых при вычислении величины тока по формуле Ландауэра [16,17] интегрирование не ведется по $\xi$ в интервале $|\xi| < 1$ (в этом интервале на рис. 2 кривая *1* функции Эйри $\chi(\xi)$ из (3) не определена), т. е. область интегрирования уменьшается.

В таблице приведена зависимость функции Нордгейма $\theta(y)$ [11] и функции $\Theta(y)$, где аргумент $y$ для функции $\Theta(y)$ вычисляется в соответствии с формулой (4). Функция $\Theta(y)$, которая входит в выражение (4) для функции прозрачности $D$, выполняет роль, аналогичную функции Нордгейма $\theta(y)$, причем для $\Theta(y)$ аргумент функции $y = L_1/L_2 = |e|WL_1/|E|$ зависит как от энергии заряженной частицы, так и от

Зависимость от $y$ функции Нордгейма $\theta(y)$ и функции $\Theta(y)$

| Функция | $y$ | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 0 | 0.1 | 0.2 | 0.3 | 0.4 | 0.5 | 0.6 | 0.7 | 0.8 | 0.9 | 1 |
| $\theta(y)$ | 1 | 0.98 | 0.94 | 0.87 | 0.79 | 0.68 | 0.58 | 0.45 | 0.31 | 0.16 | 0 |
| $\Theta(y)$ | 1 | 0.85 | 0.72 | 0.59 | 0.46 | 0.35 | 0.25 | 0.16 | 0.09 | 0.03 | 0 |

длины нанотрубок и напряженности поля. Из таблицы следует, что значение функции $\Theta(y)$ в интервале $0 < y < 1$ значительно меньше, чем у функции Нордгейма. Такая закономерность частично компенсирует малое значение аспектного числа рассматриваемых в работе нанотрубок. Зависимость функции прозрачности $D$ от функции $\Theta(y)$ должна привести к значительному увеличению тока при полевой эмиссии по сравнению со случаем полевой эмиссии с поверхности металла при прочих одинаковых условиях. Результаты по полевой эмиссии могут быть получены, если воспользоваться более точной моделью двухточечной и четырехточечной элементарных ячеек (континуальная модель $kp$-типа [18–20], где для УНТ типа „зигзаг" и нанолент с „кресельными" краями волновые функции электрона могут быть выражены через функции Эрмита [18,19].

Из результатов расчетов следует, что в случае полевой эмиссии в нанотрубках с длиной в интервале от нескольких нанометров до ста нанометров существует линейная зависимость огибающих тока от напряженности поля $W$ в интервале $0.5 \cdot 10^8 \leqslant W \leqslant 0.5 \cdot 10^9$ V/m, что соответствует функциональной зависимости $I = AW[1 + f(W)]$, где $W = U_1/L_1$. Линейная зависимость существует также в случае зависимости тока от напряженности поля в координатах Фаулера–Нордгейма и в случае зависимости $I/W^2$ от величины $1/W$ в интервале $10^{-9} \leqslant 1/W \leqslant 10^{-8}$ m/V, где в расчетах для величины напряжения на концах УНТ выполнялось $U_1 =$ const. Такая закономерность объясняется тем, что длина УНТ $L_1 < 1\,\mu$m, когда при электронном транспорте в наноматериалах не выполняется баллистический механизм.

### Финансирование работы

Авторы благодарят Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ" за поддержку, оказанную в рамках Программы повышения конкурентоспособности „Проект 5-100" (договор № 02.a03.21.0005.27.08.2013).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

[1] A.Yu. Kitaev, Phys. Usp., **44**, 131 (2001). DOI: 10.1070/1063-7869/44/10S/S29

[2] S. Hino, Y. Okada, K. Iwasaki, M. Kijima, H. Shirakawa, Chem. Phys. Lett., **372**, 59 (2003). DOI: 10.1016/S0009-2614(03)00360-9

[3] P.N. D'yachkov, V.A. Zaluev, E.Yu. Kocherga, N.R. Sadykov, J. Phys. Chem. C, **117**, 16306 (2013). DOI: 10.1021/jp4038864

[4] S. Eisler, A.D. Slepkov, E. Elliott, T. Luu, R. McDonald, F. Hegmann, R. Tykwinski, J. Am. Chem. Soc., **127**, 2666 (2005). DOI: 10.1021/ja044526l

[5] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes* (Imperial College Press, London, 1998).

[6] C.T. White, J. Li, D. Gunlycke, J.W. Mintmire, Nano Lett., **7**, 825 (2007). DOI: 10.1021/nl0627745

[7] K. Wakabayashi, K.-I. Sasaki, T. Nakanishi, T. Enoki, Sci. Technol. Adv. Mater., **11**, 18 (2010). DOI: 10.1088/1468-6996/11/5/054504

[8] A.B. Елецкий, УФН, **180** (9), 897 (2010). DOI: 10.3367/UFNr.0180.201009a.0897 [A.V. Eletskii, Phys. Usp., **53**, 863 (2010). DOI: 10.3367/UFNe.0180.201009a.0897].

[9] A. Vul', K. Reich, E. Eidelman, M.L. Terranova, A. Ciorba, S. Orlanducci, V. Sessa, M. Rossi, Adv. Sci. Lett., **3**, 110 (2010). DOI: 10.1166/asl.2010.1104

[10] K.B.K. Teo, E. Minoux, L. Hudanski, F. Peauger, J.-P. Schnell, L. Gangloff, P. Legagneux, D. Dieumegard, G.A.J. Amaratunga, W.I Milne, Nature, **437**, 968 (2005). DOI: 10.1038/437968a

[11] R.H. Fowler, L. Nordheim, Proc. R. Soc. Lond. A, **119**, 173 (1928). DOI: 10.1098/rspa.1928.0091

[12] T.E. Stern, B.S. Gossling, R.H. Fowler, Proc. R. Soc. Lond. A, **124**, 699 (1929). DOI: 10.1098 rspa.1929.0147

[13] R.G. Forbes, J.H.B. Deane, A. Fischer, M.S. Mousa, Jordan J. Phys., **8**, 125 (2015).

[14] Н.Р Садыков, С.Е. Жолниров, И.А. Пилипенко, ЖТФ, **91** (7), 1081 (2021). DOI: 10.21883/JTF.2021.07.50948.350-20 [N.R. Sadykov, S.E. Zholnirov, I.A. Pilipenko, Tech. Phys., **66**, 1032 (2021). DOI: 10.1134/S1063784221070148].

[15] A.F. Nikiforov, V.B. Uvarov, *Special functions of mathematical physics* (Birkhauser, Basel, 1988).

[16] R. Landauer, Phil. Mag., **21**, 863 (1972). DOI: 10.1080/14786437008238472

[17] M. Buttiker, Phys. Rev. B, **46**, 12485 (1992). DOI: 10.1103/PhysRevB.46.12485

[18] Н.Р. Садыков, Теоретическая и математическая физика, **180** (3), 368 (2014). DOI: 10.4213 /tmf8642 [N.R. Sadykov, Theor. Math. Phys., **180**, 1073 (2014). DOI: 10.1007/s11232-014-0200-z].
[19] Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин, ЖТФ, **83** (5), 1 (2013). [N.R. Sadykov, N.A. Skorkin, Tech. Phys., **58**, 625 (2013). DOI: 10.1134/S1063784213050186].
[20] N.R. Sadykov, E.T. Muratov, I.A. Pilipenko, A.V. Aporoski, Physica E, **120**, 114071 (2020). DOI: 10.1016/j.physe.2020.114071