

Д. С. БЫЧЕНОК, Г. Я. СЛЕПЯН

ТЕОРИЯ АВТОЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК: МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ И ПРОВЕРКА ПРИМЕНИМОСТИ МОДЕЛИ ФАУЛЕРА – НОРДГЕЙМА

The results of calculations of field emission in one dimension case using the method of integral equations are presented. Analytical (Fowler – Nordheim model of electron emission) and numerical solutions are compared and analyzed.

Метод интегральных уравнений, основанный на использовании функций Грина, широко применяется для расчета сечений ядерных реакций (уравнения Дайсона), в теории антенн (уравнения Халлена и Леонтовича – Левина), в электродинамике макроскопических тел [1], микро- и наноразмерных объектов, в частности углеродных нанотрубок [2], в квантовой химии нанотрубок [3] для моделирования точечных дефектов (уравнения Липпмана – Швингера). В данной работе мы предлагаем использовать формализм интегральных уравнений для численного расчета автоэлектронной эмиссии. В настоящее время для моделирования автоэлектронной эмиссии обычно используется модель Фаулера – Нордгейма, описывающая туннелирование из металла в одномерном случае. Применение же данной модели к реальным трехмерным объектам не всегда корректно, и в большинстве случаев требуется компьютерное моделирование. Нами сформулированы интегральные уравнения автоэлектронной эмиссии, сравниваются результаты аналитического и численного решений в одномерном случае, а также показана неприменимость модели Фаулера – Нордгейма для расчета эмиссии из наноразмерных объектов, в частности углеродных нанотрубок (УНТ).

Автоэлектронная эмиссия. Модель Фаулера – Нордгейма

В модели Фаулера – Нордгейма рассматривается туннелирование плоской электромагнитной волны через одномерный остроугольный барьер

$$V(z) = \begin{cases} 0, z < 0, \\ V_0 - eEz, z > 0, \end{cases} \quad (1)$$

где V_0 – высота барьера, E – напряженность электрического поля, e – заряд электрона. Выражение для волновой функции в области $z > 0$ (для больших значений z) в рамках данной модели имеет вид [4, 5]:

$$\psi(z) = T(Ai(-\eta) - iBi(-\eta)), \quad (2)$$

где

$$\eta = \left(\frac{2meE}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(z + \frac{\varepsilon_f - V_0}{eE} \right), \quad (3)$$

где $\varepsilon_f = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ – энергия электрона, k – волновой вектор, E – напряженность электрического поля, Ai , Bi – функции Эйри 1-го и 2-го рода соответственно, а выражение для T записывается следующим образом:

$$T = \frac{2}{\sqrt{2\pi}(Ai(-\eta)|_{z=0} + iBi(-\eta)|_{z=0}) - i \frac{\left(\frac{2meE}{\hbar^2}\right)^{1/3}}{\left(\frac{2m\varepsilon_f}{\hbar^2}\right)^{1/2}} \left(\frac{dAi(-\eta)}{d\eta} \Big|_{z=0} + i \frac{dBi(-\eta)}{d\eta} \Big|_{z=0} \right)}. \quad (4)$$

В области $z < 0$ волновая функция принимает вид

$$\psi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{ikz} + Re^{-ikz}), \quad (5)$$

где

$$R = \frac{Ai(-\eta)|_{z=0} - iBi(-\eta)|_{z=0} + i \frac{\left(\frac{2meE}{\hbar^2}\right)^{1/3}}{\left(\frac{2m\varepsilon_f}{\hbar^2}\right)^{1/2}} \left(\frac{dAi(-\eta)}{d\eta} \Big|_{z=0} - i \frac{dBi(-\eta)}{d\eta} \Big|_{z=0} \right)}{Ai(-\eta)|_{z=0} - iBi(-\eta)|_{z=0} - i \frac{\left(\frac{2meE}{\hbar^2}\right)^{1/3}}{\left(\frac{2m\varepsilon_f}{\hbar^2}\right)^{1/2}} \left(\frac{dAi(-\eta)}{d\eta} \Big|_{z=0} - i \frac{dBi(-\eta)}{d\eta} \Big|_{z=0} \right)}.$$

Выражение для проницаемости барьера на большом расстоянии от скачка потенциала записывается следующим образом:

$$D = 2 \frac{\left(\frac{2meE}{\hbar^2}\right)^{1/3}}{\left(\frac{2m\epsilon_f}{\hbar^2}\right)^{1/2}} |T|^2. \quad (6)$$

Непосредственно формула (6) часто используется для расчета автоэлектронной эмиссии в УНТ [6, 7]. С помощью метода интегральных уравнений оценим применимость данной формулы в этом случае.

Вывод интегрального уравнения для расчета проницаемости барьера

Получим общие уравнения для расчета автоэлектронной эмиссии из трехмерного объекта, в качестве которого можно, например, рассматривать углеродную нанотрубку. Предположим, что известно решение уравнения

$$(H_0 - \epsilon_0)\Psi_0(\mathbf{r}) = 0,$$

где H_0 – гамильтониан системы; ϵ_0 – энергия заданного состояния электронов в исследуемом объекте; $\Psi_0(\mathbf{r})$ – волновая функция электронов исследуемого объекта.

Уравнение Шредингера для объекта во внешнем электрическом поле запишем в виде

$$(H_0 - \epsilon)\Psi(\mathbf{r}) = -V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где $V(\mathbf{r})$ – разность потенциалов системы с включенным полем и без него.

Пусть известна функция Грина для данной системы, т. е. известно решение уравнения

$$(H_0 - \epsilon_0)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

тогда уравнение (7) может быть преобразовано в интегральное уравнение

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \int_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon)V(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')dV', \quad (8)$$

для решения которого можно воспользоваться численными методами.

Таким образом, зная волновую функцию $\Psi_0(\mathbf{r})$ невозмущенной системы (т. е. при отсутствии внешнего поля) и вид потенциала $V(\mathbf{r})$ на границе объекта, можно рассчитать волновую функцию системы во внешнем поле.

Имея численное решение уравнения (8), можно рассчитать плотность тока по формуле

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi \frac{d\Psi^*}{dz} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dz} \right],$$

аппроксимируя производные в ней конечными разностями. Проницаемость потенциального барьера может быть записана в виде

$$D = j/j_0,$$

где $j_0 = j|_{\Psi=\Psi_0} = \frac{\hbar}{2\pi m} k = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\epsilon_f}{2m}}$, ϵ_f – энергия электрона.

В частном случае модели Фаулера – Нордгейма уравнение (8) примет вид

$$\Psi(z, k) = \Psi_0(z, k) + \int_0^\infty G_0(z, z', k)V(z')\Psi(z', k)dz', \quad (9)$$

где $\Psi_0(z, k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikz}$, $G_0(z, z', k) = \frac{m}{i\hbar^2} \frac{e^{ik|z-z'|}}{k}$ соответствуют значениям для свободной частицы.

Заменим в (9) интеграл на конечную сумму

$$\Psi(z_j, k) = \Psi_0(z_j, k) + \sum_{i=1}^n G_0(z_j, z_i, k)V(z_i)\Psi(z_i, k)\Delta z_i \quad (10)$$

и потребуем, чтобы (9) удовлетворялось в дискретном числе точек $z = z_j$, общее количество которых n .

Выражение (10) примет вид

$$\sum_{z_i} ([\delta_{ij} - G_0(z_j, z_i, k)V(z_i)\Delta z_i]\Psi(z_i, k)) = \Psi_0(z_j, k), \quad (11)$$

т. е. интегральное уравнение (9) сведено к матричному уравнению (11), которое решается стандартными методами.

Перейдем к сравнению результатов аналитических и численных расчетов. Сразу отметим, что использование в (11) бесконечно убывающего барьера (1) дает значения проницаемости, зависящие от области интегрирования. Поэтому для расчетов использовался конечный потенциальный барьер

$$V(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ V_0 - eEz, & z > 0, \\ 0, & z > \frac{V_0}{eE}. \end{cases}$$

Проницаемость такого треугольного барьера высотой $V_0 = 12,5$ эВ, рассчитанная путем решения уравнения (11) в области $(-2 \cdot 10^{-10} < z < 13 \cdot 10^{-10})$ при $n = 75$ для напряженности поля $E = 1 \cdot 10^{10}$ В/м и энергии Ферми $\epsilon_f = 8$ эВ, оказалась равной $D = 0,0026$. В то же время формула (6) дает значение

$D = 0,0028$. Таким образом, имеется хорошее совпадение, но проницаемость барьера, рассчитанная численно, немного меньше найденной аналитически (6). Это объясняется приближенным видом формулы (6).

Точность метода определяется порядком матрицы n и контролируется численно посредством решения уравнения (11) при различных значениях n . На рис. 1 изображена зависимость рассчитанной проницаемости барьера от количества точек n . При увеличении n наблюдается стремление решения к некоторому пределу (так называемая «внутренняя сходимость»).

На рис. 2 представлен квадрат модуля волновой функции, полученный при решении уравнения (11) и по формулам (2) – (4). Как видно из рисунка, в области $z < 0$ волновая функция имеет вид стоячей волны, а в области $z > 0$ экспоненциально уменьшается. Хорошее соответствие между аналитическими и численными результатами позволяет заключить, что предел внутренней сходимости численного алгоритма соответствует решению исходной одномерной задачи.

Также становится очевидной неприменимость формулы (6) для расчета автоэлектронной эмиссии в нанотрубчатых материалах. Это связано с тем, что для корректного описания эмиссии из УНТ необходимо использовать в качестве $\Psi_0(\mathbf{r})$ не плоские волны, как это делается в модели Фаулера – Нордгейма, а волновые функции УНТ в приближении сильной связи, состоящие из суперпозиции p_π -орбиталей атомов углерода элементарной ячейки [3]. Также следует учесть, что энергетический спектр УНТ представляет собой набор одномерных зон, каждая из которых характеризуется целочисленным номером q . Энергия внутри каждой зоны весьма сложным образом зависит от аксиального квазиимпульса электрона k . Индекс q ассоциируется с поперечным квазиимпульсом. Закон дисперсии электронов для УНТ типа «кресло» (n, n), вектор хиральности которой $\mathbf{C} = n(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ – базисные векторы кристаллической решетки графена, имеет вид [8]:

$$\epsilon_0^q(k) = \pm t \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)}, \quad -\pi < ka < \pi \quad (q = 1, \dots, 2n),$$

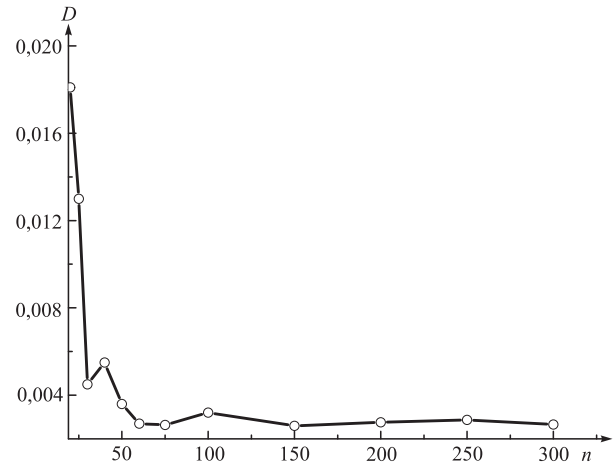


Рис. 1. Зависимость проницаемости барьера от порядка n матрицы, аппроксимирующей интегральный оператор в (8)

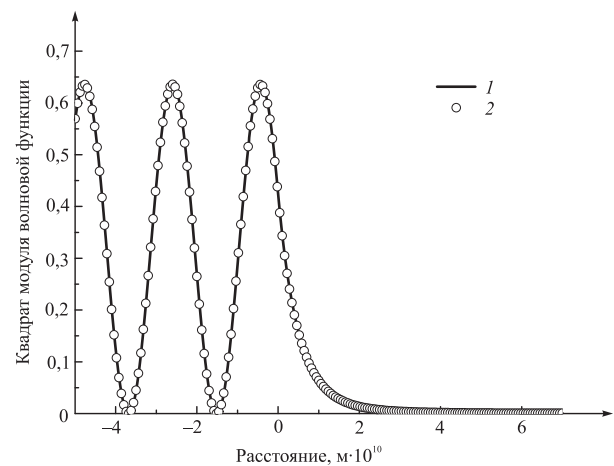


Рис. 2. Квадрат модуля волновой функции, рассчитанный путем решения (10) – 1 и по формулам (2) – (5) – 2

где t – интеграл перекрытия; $a = \sqrt{3}a_{c-c}$ – длина базисного вектора. Также важным фактором корректного описания эмиссии является учет геометрии УНТ. Например, если рассмотреть УНТ как сильно вытянутый эллипсоид вращения во внешнем поле напряженности E , направленном вдоль оси вращения эллипсоида, то явный вид потенциала в эллипсоидальных координатах можно аппроксимировать как

$$V(\mu, \nu) = \begin{cases} 0, \mu < \mu_0, \\ V_0 - eEa \sinh \mu \sin \nu, \mu > \mu_0, \end{cases}$$

где a – фокус эллипсоида, μ_0 – радиус УНТ, e – заряд электрона.

Учет всех приведенных факторов позволит получить универсальный способ для моделирования автоэлектронных свойств нанотрубок.

Следует отметить, что задача о туннелировании через одномерный потенциальный барьер может быть также эффективно решена в рамках квазиклассического приближения, которое применимо при условии, что длина волны де Бройля λ частиц системы много меньше характерных размеров изменения потенциала:

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1.$$

Однако в случае описания эмиссии из УНТ особенно важным является регион у края нанотрубки, в котором условие применимости квазиклассического приближения не выполняется.

* * *

Нами представлены результаты расчетов автоэлектронной эмиссии с помощью функций Грина. В одномерном случае показано наличие внутренней сходимости алгоритма – существование предела при увеличении порядка матрицы, аппроксимирующей интегральный оператор. Хорошее соответствие между теоретической моделью и численным решением позволяет заключить, что этот предел действительно является истинным решением задачи. Поскольку модель Фаулера – Нордгейма не учитывает геометрии исследуемой системы, а также ее волновых свойств, то она неприменима для расчета эмиссии из реальных нанотрубок. Метод является основой для расчета туннелирования через трехмерные потенциальные барьеры сложной формы, что позволит корректно описывать автоэлектронную эмиссию, а также электромагнитные свойства различных нанотрубок.

1. Фешбах Г., Морс Ф. М. Методы теоретической физики. М., 1960.
2. Nemilentsau A. M., Shuba M. V., Slepyan G. Ya. et al. // Phys. Rev. B. 2010. 82. P. 235424.
3. Дьячков П. Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. М., 2010.
4. Gadzhuk J. W., Plummer E. W. // Reviews of modern physics. 1973. 45. P. 487.
5. Елинсон М. И., Васильев Г. Ф. Автоэлектронная эмиссия. М., 1958.
6. Xi-Zhou Qin, Wie-Liang Wang, Ning-Sheng Xu et al. // Proc. R. Soc. A. 2011. 467. P. 1029.
7. Shi-Dong Liang, Lu Chen // PRL. 2008. 101. P. 027602.
8. Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Rysical Properties of Carbon Nanotubes. London, 1998.

Поступила в редакцию 06.07.12.

Дмитрий Сергеевич Быченко – аспирант кафедры физики конденсированного состояния. Научный руководитель – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией электродинамики неоднородных сред НИИЯП БГУ С. А. Максименко.

Григорий Яковлевич Слепян – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории электродинамики неоднородных сред НИИЯП БГУ.

УДК 621.375.826

В. Л. КОЗЛОВ

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭФФЕКТА ДОПЛЕРА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ДАЛЬНОСТИ

Method of constructing of a laser rangefinder based on the Doppler effect is offered. The Doppler signal spectrum due to the radial velocity of the laser scanning surface beam is determined for the distance measurement. The distance to the surface is uniquely determined from the Doppler signal spectrum and the angular scanning rate.

С помощью эффекта Доплера можно решать различные прикладные задачи, например, определять скорость и угол направления движения объекта, амплитуду и частоту вибраций и т. п. Однако извест-