

ОПТИМИЗАЦИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ДИОДА С ХОЛОДНЫМ КАТОДОМ НА ОСНОВЕ МАССИВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Д. В. Поздняков¹, А. В. Борздов¹, В. М. Борздов¹, В. А. Лабунов²

¹Белорусский государственный университет, pozdneyakov@bsu.by

²Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, labunov@its.bsuir.edu.by

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время металлические углеродные нанотрубки (МУНТ) рассматриваются известными специалистами в области электроники в качестве наиболее перспективного материала, из которого можно изготавливать холодные катоды для функционирующих на эффекте автоэлектронной эмиссии приборов, обладающих уникальными электрическими характеристиками. Их уникальность обуславливается высоким аспектным отношением (отношением высоты нанотрубки H к ее радиусу r), благодаря которому напряженность электрического поля в окрестности конца нанотрубки может в сотни и даже тысячи раз превышать соответствующую среднюю по объему напряженность электрического поля, создаваемого внешним источником [1]. Это, в свою очередь, приводит к чрезвычайно высокому току эмиссии при сравнительно низком напряжении, приложенном к МУНТ, что ставит эмиттеры на основе МУНТ вне конкуренции среди приборов, действие которых основано на полевой автоэлектронной эмиссии. К приборам этого типа относятся, в первую очередь, диодные и триодные структуры, представляющие собой диоды, триоды, катодно-лучевые осветительные лампы, рентгеновские трубки, дисплеи [1–6]. Таким образом, разработка эмиттеров на основе МУНТ ведет к созданию нового широкого класса электронных приборов, отличающихся аномально малыми размерами и низким напряжением питания [1–9].

Все вышесказанное обуславливает особую важность как экспериментального, так и теоретического изучения электрических характеристик эмиттеров на основе МУНТ, вызванную, в первую очередь, острой необходимостью оптимизации конструктивно-технологических параметров этих эмиттеров с целью получения максимальной плотности эмиссионного тока при минимальных напряжениях в приборе. В связи с этим целью настоящей работы стала оптимизация такой простейшей приборной структуры как диод с плоско-параллельными электродами, в которой катод представляет собой массив вертикально ориентированных МУНТ, выстроенных в заданном порядке на металлической подложке [3, 8, 9].

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

В процессе оптимизации ограничимся рассмотрением таких предельных значений топологических параметров диодов, которые, в свою очередь, не выходят за рамки более-менее разумных с конструктивно-технологической точки зрения величин.

Как и в работе [9] рассмотрим одностенные (5,5) нанотрубки с открытым концом. Выбор таких нанотрубок обусловлен требованием максимального значения аспектного отношения при их заданной длине. Выбирать нанотрубки еще меньшего радиу-

са нецелесообразно, поскольку (4,4) нанотрубки, и тем более (3,3) нанотрубки с минимально возможным радиусом, в отличие от (5,5) нанотрубок, гораздо сложнее синтезировать [1]. Для открытого конца характерна более высокая напряженность электрического поля в его окрестности по сравнению с закрытым концом, к тому же вероятность выхода электронов из открытого конца МУНТ немного больше вероятности их выхода из закрытого конца [9].

Высота нанотрубок должна быть как можно больше [1], но при этом они должны быть вертикально ориентированными и не взаимодействовать друг с другом [5]. На основании анализа аспектных отношений для нанотрубок, исследованных в работах [5–7], можно сделать вывод о том, что их высота порядка 10^2 нм удовлетворяет указанным требованиям. Поэтому положим, что $H = 0.1$ мкм. Очевидно, что расстояние от концов нанотрубок до анода L должно быть как можно меньше, но при этом разброс значений их длины не должен существенно влиять на ВАХ диода. Кроме того, экранирование анодом заряда на концах нанотрубок должно быть настолько слабым, что использование последних оказывается все еще выгоднее, чем применение микроострий из металлов с меньшей по сравнению с МУНТ работой выхода электронов. Анализ результатов работ [1–3, 5–7] указывает на необходимость выбора оптимального значения L порядка 10^2 нм. В связи с этим положим, что $L = 0.1$ мкм.

Ограничимся рассмотрением наиболее интересного с практической точки зрения случая комнатных температур ($T = 300$ К).

В итоге, единственным варьируемым параметром остается расстояние между нанотрубками S .

Для нахождения потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ вне МУНТ (область, не занятая электронами π -орбиталей атомов углерода) численно решалось уравнение Лапласа (мы пренебрегли зарядом электронов, создающих туннельный ток)

$$\Delta\varphi = 0 \quad (1)$$

Для области в углеродной нанотрубке, занятой электронами π -орбиталей атомов углерода, численно решалось уравнение Пуассона

$$\nabla(\epsilon\epsilon_0\nabla\varphi) = \rho, \quad (2)$$

в котором избыточная плотность заряда электронов в МУНТ ρ определялась в приближении локальной плотности исходя из условия, что расстояние между уровнем Ферми и уровнем вакуума является величиной постоянной внутри МУНТ (условие термодинамического равновесия).

Следует отметить, что, несмотря на пренебрежение зарядом электронов, создающих туннельный ток, и использование приближения локальной плотности, зависимости $\varphi(\mathbf{r})$ при различных значениях H , L , S и приложенного к электродам диода напряжения V получаются практически идентичные аналогичным зависимостям, полученным в работе [9] путем численного самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера.

Для нахождения коэффициента прохождения электронами области между нанотрубкой и анодом в [9] рассматривалось одномерное движение электронов и использовалось приближение ВКБ. Мы тоже ограничились приближением одномерного движения носителей заряда, но, в отличие от [9], мы численно решали уравнение Шредингера вне МУНТ

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\Psi}{dz^2} = (E - \Phi + e\varphi_r(z))\Psi, \quad (3)$$

где $\hbar$ – постоянная Планка, m_0 – масса покоя электрона, e – элементарный заряд, E – энергия электрона относительно уровня Ферми, Φ – работа выхода электрона из МУНТ, Ψ – волновая функция, φ_r – потенциал на расстоянии $r = 0,339$ нм от оси нанотрубки, равном ее радиусу. А также численно решали волновое уравнение

$$-\frac{d^2\Psi}{dz^2} + \left[\frac{d^2}{dz dE_k} (k^2(E + e\varphi_r(z))) \right] \left[\frac{d}{dE_k} (k^2(E + e\varphi_r(z))) \right]^{-1} \frac{d\Psi}{dz} = k^2(E + e\varphi_r(z))\Psi, \quad (4)$$

описывающее движение электронов в МУНТ без учета их спина. Это уравнение представляет собой обобщение уравнения Клейна–Гордона для произвольного соотношения между кинетической энергией носителя заряда $E_k = E + e\varphi_r$ и его волновым вектором k . На конце МУНТ волновые функции сшивались исходя из условия непрерывности плотности вероятности и плотности тока вероятности.

Следует отметить, что при аналогичных взятым в работе [9] расчетных параметрах нами были получены зависимости плотности туннельного тока j от средней по объему напряженности электрического поля практически совпадают с зависимостями, приведенными в [9], что подтверждает адекватность использованных нами физико-математических моделей.

На рисунке 1 представлены рассчитанные зависимости плотности тока j от напряжения между электродами V при условии, что значения топологических параметров и температуры равны приведенным выше значениям, а величина Φ составляет 4,85 эВ [10].

На представленном рисунке кривые ограничены сверху максимальной мощностью, рассеиваемой анодом, равной 1 МВт/м². Результаты расчетов в случаях $S < 0,2$ мкм и $S > 0,3$ мкм не приведены, поскольку все полученные при таких условиях зависимости $j(V)$ лежат правее трех изображенных на рисунке кривых во всей области изменения V .

Из рисунка 1 видно, что оптимальное расстояние между нанотрубками $S \approx 0,25$ мкм, что в 2,5 раза больше высоты нанотрубки H .

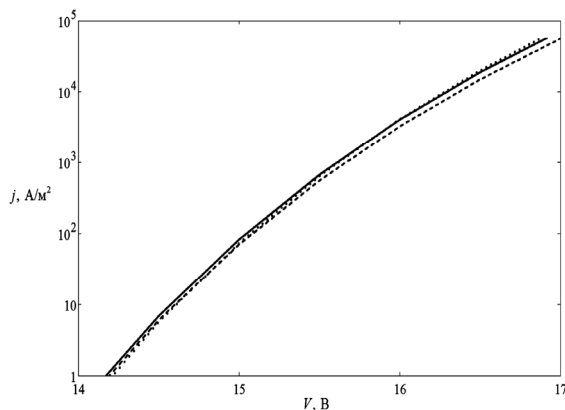


Рис. 1. Зависимости $j(V)$. Пунктирная кривая – $S = 0,20$ мкм, сплошная кривая – $S = 0,25$ мкм, штриховая кривая – $S = 0,30$ мкм

Как показали наши дальнейшие исследования, в том числе с учетом результатов работ [8, 9], при $L \geq H$ оптимальное расстояние между нанотрубками S_{opt} лежит в диапазоне от $2,5H$ до $3,5H$ и определяется их радиусом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, оптимизирован диод с холодным катодом на основе массива одностенных (5,5) нанотрубок с открытым концом и плоско-параллельными электродами. Установлено, что оптимальное расстояние между нанотрубками S_{opt} равно $2,5H$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Елецкий, А. В. Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства / А. В. Елецкий // УФН. 2002. Т. 172. № 4. С. 401.
2. Nilsson, L. Scanning field emission from patterned carbon nanotube films / L. Nilsson [et al.] // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. № 15. P. 2071.
3. Oh, T. S. Field-emission characteristics of carbon nanotube paste layers / T. S. Oh [et al.] // J. Appl. Phys. 2005. V. 98. № 8. P. 084313.
4. Heo, S. H. Transmission-type microfocus x-ray tube using carbon nanotube field emitters / S. H. Heo, A. Ihsan, and S. O. Cho // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90. № 18. P. 183109.
5. Sinha, N. Electromechanical interactions in a carbon nanotube based thin film field emitting diode / N. Sinha [et al.] // Nanotechnology. 2008. V. 19. № 2. P. 025701.
6. Wu, J. Fabrication and field emission properties of triode-type carbon nanotube emitter arrays / J. Wu [et al.] // Nano Lett. 2009. V. 9. № 2. P. 595.
7. Zhao, G. Fabrication and characterization of single carbon nanotube emitters as point electron sources / G. Zhao [et al.] // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 89. № 19. P. 193113.
8. Kim, D. Numerical study on the field emission properties of aligned carbon nanotubes using the hybrid field enhancement scheme / D. Kim, J. E. Bouree, S. Y. Kim // Appl. Phys. A. 2006. V. 83. P. 111.
9. Chen, G. Screening effects on field emission from arrays of (5,5) carbon nanotubes: quantum-mechanical simulation / G. Chen [et al.] // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. № 19. P. 195412.
10. Lim, S. Ch. Contact resistance between metal and carbon nanotube interconnects: effect of work function and wettability / S. Ch. Lim [et al.] // Appl. Phys. Lett. 2009. V. 95. № 26. P. 264103.