

Изучение влияния геометрических параметров на эмиссионные свойства углеродных нанотрубок с металлической проводимостью

**Н.И. Сеницын, О.Е. Глухова,
Г.В. Торгашов, З.И. Буянова,
И.Г. Торгашов**

Введение

С открытием углеродных нанотрубок интерес к изучению их свойств стремительно растет. Это вызвано совершенствованием технологий синтеза нанотрубок в макроскопическом объеме и большими перспективами практического применения. Пленки с углеродными нанотрубками (УНТ) уже применяются в качестве базового материала для конструирования сверхминиатюрных электровакуумных приборов, где нанотрубки используются в качестве автоэммиттеров.

Известно, что наноструктурные объекты отличаются наличием размерных эффектов и зависимостью физических свойств от строения. Проводимость УНТ, например, определяется хиральностью (m,n) : трубки типа armchair (m,m) обладают металлической проводимостью, а тип проводимости остальных обуславливается ориентацией гексагонов вдоль оси трубки (если разность $m-n$ не кратна трем, трубка относится к полупроводникам) [1].

В связи с этим необходимо изучать электронную структуру и энергетику УНТ различной хиральности с целью выявления закономерностей в проявлении тех или иных свойств трубок в зависимости от строения.

Цель данной работы – исследование эмиссионной способности УНТ типа armchair в зависимости от линейных параметров клетки трубок: от длины и диаметра. Теоретическое прогнозирование изменения эмиссионной способности с линейными параметрами осуществляется по изменению ионизационного потенциала, который во многом определяет работу выхода УНТ.

Углеродные нанотрубки как автоэмиссионный материал

Занимая до некоторой степени промежуточное положение между графитом и фуллеренами, углеродные нанотрубки по многим свойствам полностью отличаются и от графита, и от фуллеренов и могут рассматриваться как новый материал, обладающий уникальными физико-химическими характеристиками. Что касается вакуумной микроэлектроники, то в ней интерес, проявляемый к углеродным нанотрубкам, связан в настоящее время прежде всего с возможностью получения с них значительной и стабильной полевой эмиссии электронов даже в условиях технического вакуума. Ав-

торы статьи изучают свойства нанотрубок со времени открытия ими автоэмиссии с них в 1993 году [2, 3]. Основным объектом наших экспериментальных исследований в области автоэмиссии являются углеродные нанотрубные пленки, в которых нанотрубки расположены перпендикулярно к подложке. Для получения таких пленок были разработаны оригинальные каталитические технологии на основе CVD процессов. В настоящее время идет активное внедрение пленочных нанотрубных катодов в приборах знаковосинтезирующей и СВЧ электроники.

С момента открытия автоэмиссии из углеродных нанотрубок до настоящего времени идет дискуссия о работе выхода электронов из них [4, 5]. В эксперименте автоэмиссионные токи часто были намного выше, чем рассчитанные по формуле Фаулера-Нордгейма. Поэтому работа выхода на основе экспериментальных данных получалась намного ниже работы выхода графита. Особенно это было заметно на углеродных пленках с высокими (длинными) нанотрубками. На рис.1 приведено изображение углеродной пленки с высокими нанотрубками, полученное на растровом электронном микроскопе.

На рис.2 приведены изображения коротких (а) и длинных (б) нанотрубок, полученные на просвечивающем электронном микроскопе.

На рис.3 представлены вольтамперные характеристики автоэлектронной эмиссии углеродных пленок с короткими и длинными нанотрубками.

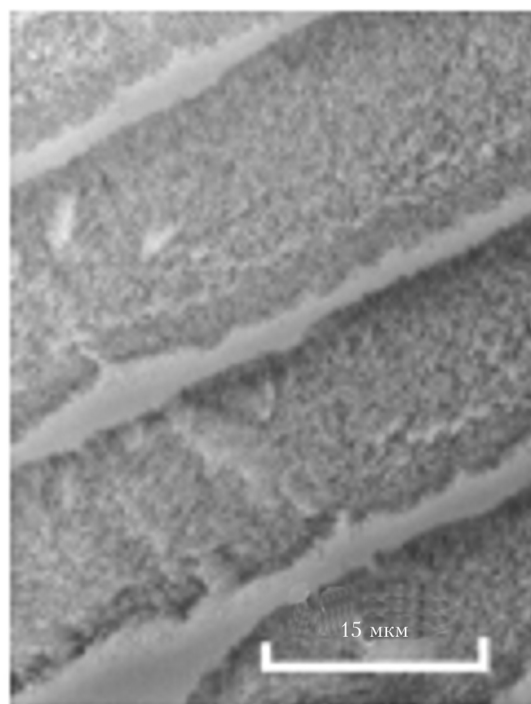


Рис.1. Фотография со сканирующего электронного микроскопа. Фрагмент углеродной нанотрубной пленки

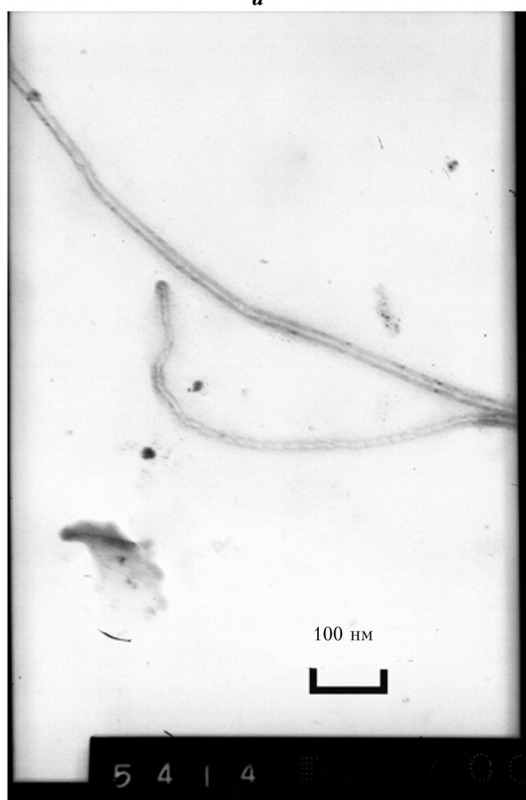
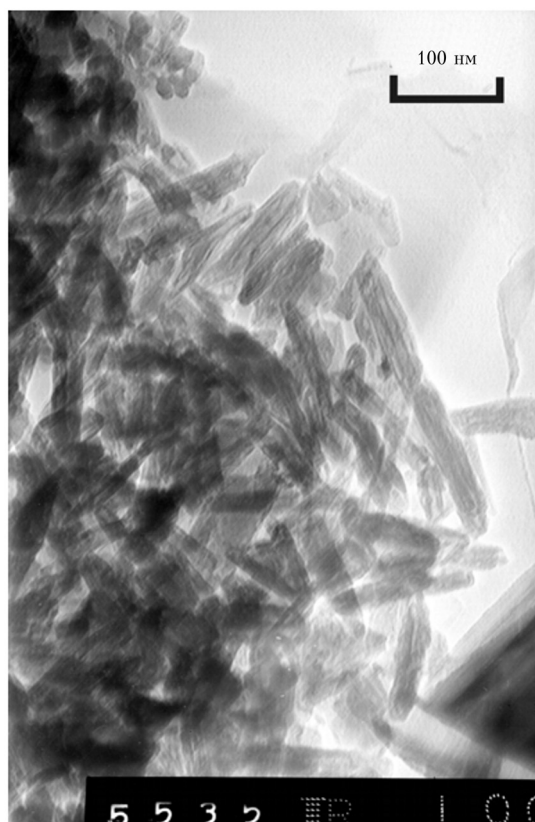


Рис.2. Фотографии с просвечивающего электронного микроскопа: а – короткие нанотрубки; б – длинные нанотрубки

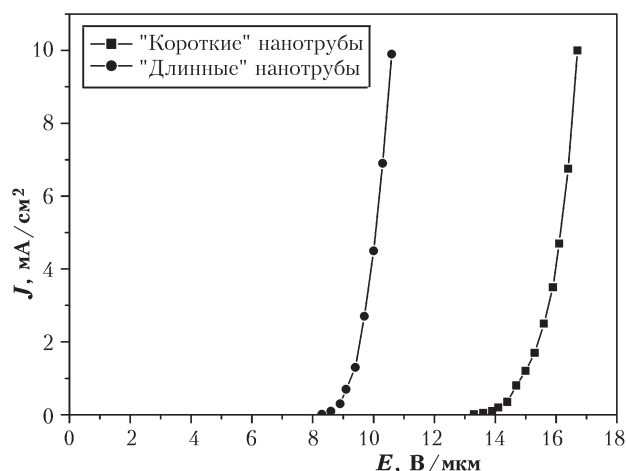


Рис.3. Вольтамперные характеристики автоэмиссии с углеродных нанотрубных пленок: расстояние анод–катод – 200 мкм

В следующих разделах статьи приводятся теоретические исследования потенциала ионизации, а значит и работы выхода тонких однослойных нанотрубок различных геометрических размеров.

Метод расчета потенциала ионизации однослойных углеродных нанотрубок по квантовой модели

Метод сильной связи хорошо известен и успешно применяется для изучения многоатомных молекул и кристаллов [6–9]. Предложенная в [9] модификация параметров метода (атомных термов, межатомных матричных элементов гамильтониана) позволяет рассчитывать атомную и электронную структуры углеродных кластеров (фуллеренов, нанотрубок, наноторов, эндоэдральных соединений и др.) при различных локальных изменениях каркаса и в случае относительного движения компонент соединения.

Координаты атомы трубки генерируется заданием трех линейных параметров (трехпараметрический метод [10]): одним из ребер шестиугольника, большей и меньшей диагоналями гексагона. Такой способ «выкладывания» тубуса УНТ из атомов углерода позволяет легко и быстро вычислять координаты атомов трубки произвольной хиральности (m, n) .

Полная энергия кластера E представляется суммой:

$$E = E_{\text{rep}} + E_{\text{bond}}, \quad (1)$$

где E_{rep} – феноменологическая энергия, E_{bond} – энергия заполненных электронных уровней. Феноменологическая энергия, учитывающая межэлектронное и межядерное взаимодействия, представляется суммой парных отталкивательных потенциалов [9]

$$E_{\text{rep}} = \sum_{i < j} V_{\text{rep}}(|r_i - r_j|), \quad (2)$$