

# 准一维纳米材料场发射模拟软件的研制\*

邵俊文, 王伟良, 岳成刚, 秦锡洲, 夏 彧, 李志兵  
(中山大学物理科学与工程技术学院//光电材料与技术国家重点实验室, 广东 广州 510275)

**摘 要:** 研制了准一维纳米材料场致电子发射模拟软件, 该软件基于一个纳米材料场致电子发射的双电流模型, 自洽地计算电势、电荷密度、费米能级的分布和发射电流。最后给出了一个算例, 计算了单根硼纳米线的场致电子发射, 得到的结果与文献一致。

**关键词:** 纳米材料; 场发射; 模拟

**中图分类号:** O462.4 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579(2012)01-0055-05

## Software Developed for Simulating Field Electron Emission from One Dimensional Nano Materials

SHAO Junwen, WANG Weiliang, YUE Chenggang, QIN Xizhou, XIA Yu, LI Zhibing

(State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies//School of Physics and Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

**Abstract:** The software for simulating field electron emission from one dimensional nano materials, including its physical background, the algorithm and a demonstration, was developed. The field emission from individual boron nanowire was calculated and the result is consistent with experimental result reported by other group.

**Key words:** nano material; field emission; simulation

由于宽带隙半导体材料通常有较大的热导率和较高的饱和漂移速度, 它们极有希望用来制造大功率密度及能在高温和各种恶劣环境中工作的纳微电子器件。近年来, 人们合成了各种各样的宽带隙半导体纳米线, 如 GaN、ZnO、SiC<sup>[1-3]</sup>。实验发现它们具有优异的场致电子发射性能。我们研制了基于能态密度用有限元方法模拟准一维纳米材料场致电子发射的软件。本文介绍这个软件的理论模型、算法和使用方法。最后给出一个算例。

### 1 理论模型

本软件是基于李志兵等<sup>[4-5]</sup>提出的纳米材料场致电子发射双电流模型。由于纳米线内部是晶体结构<sup>[6]</sup>, 我们认为仍然具有类似于块材的能带结构。

而由于纳米线有很大的比表面积, 把材料表面中的定域态也考虑进来。我们假设, 在空间上定域态均匀地分布在表面厚度为  $\lambda$  的薄层中 (此  $\lambda$  可认为是定域态的扩展宽度)。则在外界电压作用之下, 导带、价带和表面态都向下移动, 负电荷将在纳米线上积累。电荷密度为

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_s(\mathbf{r}) + \rho_c(\mathbf{r}) \quad (1)$$

定域态中的电荷密度  $\rho_s(\mathbf{r})$  仅在上述表面薄层中不为零, 在表面薄层中

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \frac{-e}{\lambda} \int_{E_f^*}^{E_c} g_s(E - E_c) f(E - E_f) dE \quad (2)$$

其中  $f(E - E_f)$  为费米狄拉克分布,  $E_f$  为纳米线的费米能级,  $E_f^*$  为其中性费米能级,  $E_c$  为导带底。单位面积的定域态数目  $g_s(E - E_c)$ 。  $e$  为单位电荷。

\* 收稿日期: 2011-07-01

基金项目: 科技部纳米研究重大科学研究计划资助项目 (2007CB35501); 国家自然科学基金资助项目 (11104358)

作者简介: 邵俊文 (1986 年生), 男, 博士生; 通讯作者: 李志兵; E-mail: stslzb@mail.sysu.edu.cn



点，单位为 eV。态密度单位为  $m^{-3} eV^{-1}$ 。除了可以设置导带、价带这种与能量平方根成正比的态密度之外，还可以设置高斯分布或均匀分布，用来表示表面的定域态。

2) 从 VASP 的计算结果中导入。

如图 3，用户须指出材料的介电常数、迁移率、中性费米能级。态密度则可从 VASP 计算出的 DOSCAR 中导入。本软件会将这些数据保存成材料数据文件供以后使用。

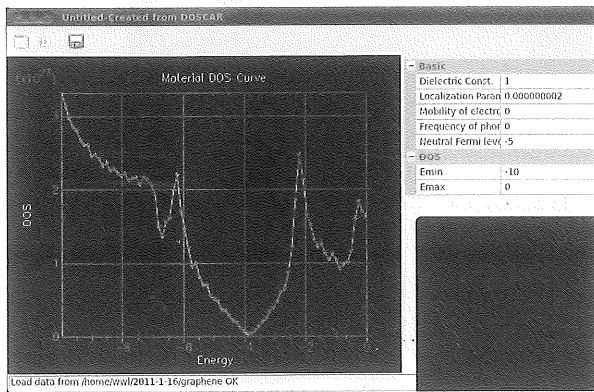


图 3 导入 graphene 材料属性的例子

Fig. 3 An example of importing the properties of graphene

### 3.2 描绘器件结构

用户可用图形界面描绘器件结构（用多边形和椭圆组合出各种形状，二维图形实际对应的是轴对称的三维结构，对称轴为  $y$  轴），同时指定每一个区域属于哪种材料。

具体步骤：

1) 从主界面（图 4）右边 Material 中选择材料文件。

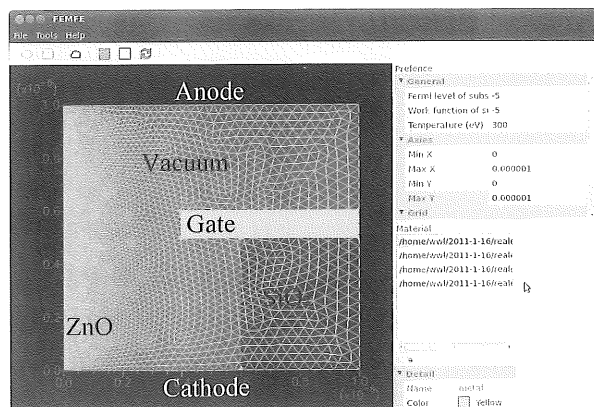


图 4 软件的主界面

Fig. 4 The interface of the software

2) 在工具栏中点选多边形或椭圆，在主窗口中绘图（每一个图形都可以通过双击打开属性对话框来微调其坐标）。

3) 在右边 Grid Count 框中填入欲划分的格点数（数字越大计算越精确，计算速度越慢）。

### 3.3 设定边条件

边条件可以在不同区域不同，各个区域的边条件若无法统一用一个表达式，可以分开多次来设置。步骤如下：

1) 在图 5 窗口上方的 range 是指定本次设置的边条件对这个范围之内边界生效；

2) 选择 Neumann 或 Dirichlet 型边条件；

3) 或选择 Dirichlet 型边条件，则需指出边界值，边界值可以是边界坐标  $x, y$  的函数。

4) 设置完点 OK，可以再打开边条件设置窗口设置另一个区域的边条件。

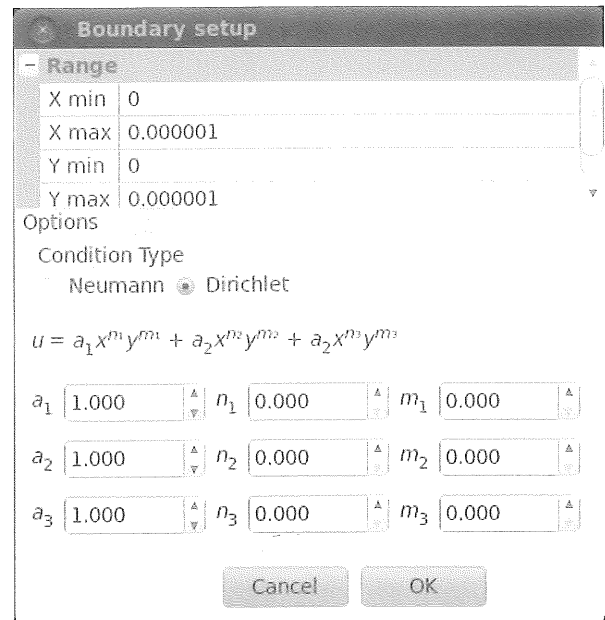


图 5 边条件设定对话框

Fig. 5 Boundary condition setting dialog

### 3.4 计算电势、电荷密度分布、费米能级、发射电流

计算完成后，输出结果 potential.out 和 Ef.dat。其中 potential.out 第一列为格点的横坐标，第二列为纵坐标，第三列为电势，第四列为电荷密度，第五列为势能（即导带底减电势）。Ef.dat 的第一列为格点的横坐标，第二列为纵坐标，第三列为费米能级。图 6、7 是与图 4 的结构相对应的电势分布、电荷密度分布（仅在纳米线的末端表面电荷密度才不为零，纳米线靠近衬底处有电荷分布是因为肖

特基结)。与图 4 相对应图中下方是阴极 (电势定为 0 V), 上方是阳极 (电势定为 25 V), 中间栅极的电压定为 20 V。图中用阴影表示纳米线、SiO<sub>2</sub> 和金属栅极的位置。

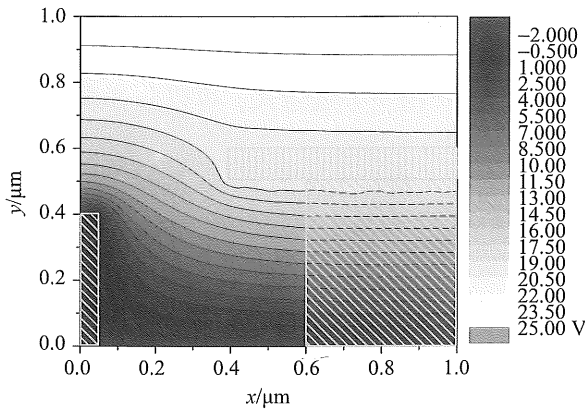


图 6 用 Origin 作出的电势分布图  
Fig. 6 Electric potential corresponding to the structure in figure 4

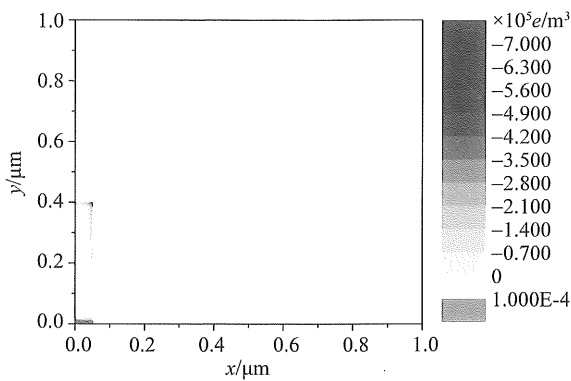


图 7 用 Origin 作出的与图 4、6 相对应的电荷分布图  
Fig. 7 Charge density distribution corresponding to the structure in figure 4 and 6

### 4 算 例

下面我们计算文献 [11] 中 Fig. 5 (c) 所示的单根硼纳米线的场致电子发射电流。其中硼的功函数为 4.3 eV, 文献 [12] 带隙为 1.6 eV。文献 [13] 图 8 中纳米线的半径为 25 nm, 与阳极探针的距离为 0.5 μm, 纳米线表面层的厚度为 2 nm, 在表面层使用的是在禁带中加了态密度为常数 10<sup>25</sup> m<sup>-3</sup>eV<sup>-3</sup>的硼, 阳极探针的半径为 0.25 μm。图 8 与文献 [11] 中 Fig. 5 (c) 的上下是反过来的, 即纳米线在下, 阳极在上。靠近 y 轴蓝色区域为半径 25 nm 的硼纳米线, 靠近 y 轴黄色区域为半径

0.25 μm 的阳极探针, 两者间距为 0.5 μm。图 9 是计算得到的发射电流与相应的 FN 曲线, 与文献 [11] 中 Fig. 5 (d), (e) 一致。

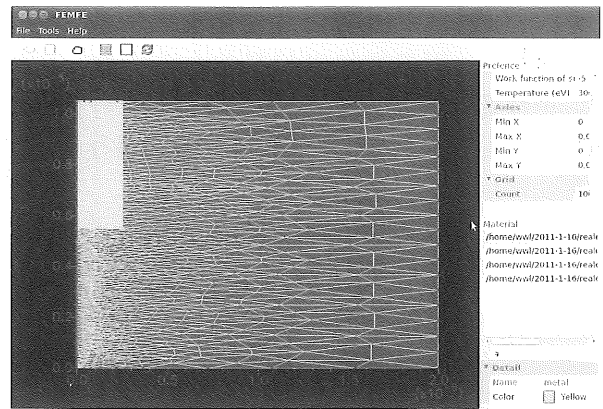


图 8 与文献 [AIP conf. proc. 1173 (2009) 317] 中 Fig. 5 (c) 对应的硼纳米线场致电子发射装置

Fig. 8 Boron nanowire field emission setup corresponding to Fig. 5 (c) in Ref. [AIP conf. proc. 1173 (2009) 317]

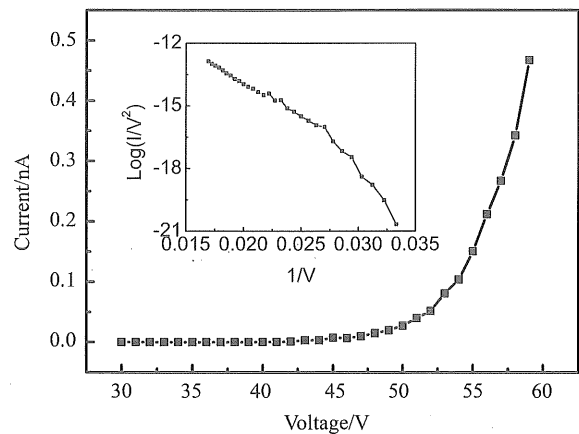


图 9 与图 8 对应的电流 - 电压曲线, 插图是相应的 FN 曲线

Fig. 9 I-V curve of the setup in figure 8. The inset is the corresponding FN plot

### 5 结 论

本文介绍了准一维纳米材料场致电子发射模拟软件的研制。本软件是基于一个纳米材料场致电子发射的双电流模型, 自洽地计算电势、电荷密度、费米能级的分布和发射电流。本软件是图形界面, 可以计算任意的轴对称的器件结构。本文给出了一个算例, 按照文献 [11] 的实验装置, 计算了单根硼纳米线的场致电子发射, 得到的结果与实验一致。

(下转第 62 页)

### 3 结 论

由于火场环境的复杂性,汽油中部分特征化合物往往由于燃烧、挥发等大量损失,从而影响判定。本文通过定量分析揭示了汽油中特征化合物组成的变化规律,证明了水泥块比地毯等可燃物更容易保存汽油中特征化合物,对火场残留物证的提取具有重要意义。

#### 参考文献:

- [1] 耿惠民. 放火案鉴定技术研究[J]. 消防科学与技术, 2005, 24(6): 769 - 772.
- [2] 刘剑, 张桂霞, 叶能胜, 等. 火灾现场残留物中助燃剂提取及检测方法研究进展[J]. 化学通报, 2009(10): 871 - 874.
- [3] 邵建章, 文玉秀, 张健, 等. 裂解气相色谱法分析火场燃烧残留物的研究[J]. 理化检验-化学分册, 2004, 40(7): 378 - 380.
- [4] 张桂霞, 王继芬, 魏垂策. 棉织品上微量汽油、柴油残留物的挥发研究[J]. 中国人民公安大学学报, 2007

(1): 5 - 9.

- [5] SANDERCOCK P M L, PASQUIER E Du. Chemical fingerprinting of unevaporated automotive gasoline samples [J]. Forensic Science International, 2004, 140: 43 - 59.
- [6] 邓震宇, 鲁志宝, 范子琳, 等. 固相微萃取-气相色谱-质谱法鉴定火场残留物中油漆稀释剂 [J]. 理化检验-化学分册, 2010, 46: 542 - 544.
- [7] 邢若葵, 王松才, 戴维列, 等. ATD-GC-MS 法测定火场样品中痕量汽油燃烧残留物 [J]. 中国司法鉴定, 2010, 53(6): 16 - 20.
- [8] ALMIRALL J R, FURTON K G. Characterization of background and pyrolysis products that may interfere with the forensic analysis of fire debris [J]. J Anal Appl Pyrolysis, 2004, 71: 51 - 67.
- [9] SINKOVA N A, JOHNSTON B M, SANDERCOCK P M L, et al. Automated optimization and construction of chemometric models based on highly variable raw chromatographic data [J]. Analytica Chimica Acta, 2011, 697: 8 - 15.

(上接第 58 页)

#### 参考文献:

- [1] HAN W, FAN S, LI Q, et al. Synthesis of gallium nitride nanorods through a carbon nanotube-confined reaction [J]. Science, 1997, 277(5330): 1287 - 1289.
- [2] LEE C J, LEE T J, LYU S C, et al. Field emission from well-aligned zinc oxide nanowires grown at low temperature [J]. Applied Physics Letters, 2002, 81(19): 3648 - 3650.
- [3] WONG K W, ZHOU X T, AU F C K, et al. Field-emission characteristics of SiC nanowires prepared by chemical-vapor deposition [J]. Applied Physics Letters, 1999, 75(19): 2918 - 2920.
- [4] LI Z B, WANG W L, DENG S Z, et al. Field-induced insulator to semimetal transition and field electron emission of nanorods of semiconductors of wide energy band gaps [J]. arXiv:cond-mat/0511418, 2005.
- [5] LI Z B, WANG W L, XU N S. Field electron emission of nanorods of semiconductors of wide energy band gaps [C] // Technical Digest of the 18th International Vacuum Nanoelectronics Conference, Oxford; IEEE, 2004.
- [6] DENG S Z, WU Z S, ZHOU J, et al. Synthesis of silicon carbide nanowires in a catalyst-assisted process [J]. Chemical Physics Letters, 2002, 356(5/6): 511 - 514.

- [7] MOTT N F. Conduction in non-crystalline materials 3: Localized states in pseudogap and near extremities of conduction and valence bands [J]. Philosophical Magazine, 1969, 19(160): 835.
- [8] LI Z B, WANG W L, DENG S Z, et al. Field electron emission from nano wires of wide energy band gaps [C] // International Vacuum Nanotechnology Conference, UK; Oxford University, 2005.
- [9] FROMAN N, FROMAN P O. JWKB approximation: Contributions to the theory [M]. Amsterdam: North-Holland, 1965.
- [10] 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生. 半导体物理学 [M]. 4 版. 北京: 国防工业出版社, 1994: 52.
- [11] TIAN J F, CAI J M, HUI C, et al. Boron nanowires for flexible electronics and field emission [J]. AIP Conference Proceedings, 2009, 1173: 317.
- [12] LIU F, TIAN J F, BAO L H, et al. Fabrication of vertically aligned single-crystalline boron nanowire arrays and investigation of their field-emission behavior [J]. Advanced Materials, 2008, 20: 2609.
- [13] HELLWEGE K H. Landolt-bornstein numerical data and functional relationships in science and technology [M]. Berlin: Springer, 1983.