

НАНОРАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ПОЛЕВОЙ ЭМИССИИ ЭЛЕКТРОНОВ УЛЬТРАТОНКИМИ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ ПЛЁНКАМИ

Салеев В.А.

Самарский государственный университет,
Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва
(национальный исследовательский университет),
Учреждение Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН

Аннотация

В рамках метода гамильтониана переноса Бардина рассматривается полевая эмиссия электронов наноразмерными структурами. Предложена модель, в которой учитывается конечный размер эмиттера в направлении эмиссии электронов. Эмиссия рассматривается как туннельный переход между двумя многочастичными электронными квантовыми состояниями. Получены формулы и предложен алгоритм вычислений. В упрощённой модели выполнены численные оценки на величину наноразмерных эффектов в процессах полевой эмиссии электронов ультратонкими металлическими плёнками.

Ключевые слова: полевая эмиссия электронов, волновая функция, наноразмерные эффекты, метод гамильтониана переноса Бардина, уравнение Шредингера.

Введение

В последние годы достигнут существенный прогресс в экспериментальном изучении полевой эмиссии электронов наноразмерными структурами, такими как нанотрубки, наноразмерные нити, нанокристаллические плёнки и другими [1, 2]. Исследования показали, что наиболее эффективную полевую эмиссию представляют наноструктурированные материалы. Центрами эмиссии в наноструктурах являются наноразмерные проводящие образования, окружённые изолирующей фазой (как, например, в нанокристаллических алмазных плёнках) или вакуумом (ориентированные нанотрубки, нанонити). Обнаружено также, что для эмиттеров на основе углеродных соединений достигаются рекордно низкие значения для электрического поля, вызывающего эмиссию электронов. Экспериментально доказано, что существенную роль в повышении эмиссионной способности наноструктур играют квантово-размерные эффекты, которые приводят к снижению работы выхода из наноразмерных образований [3, 4, 5, 6]. Другой наблюдаемый эффект связан с сужением энергетического спектра эмитированных электронов при уменьшении характеристических размеров структурных элементов и, тем самым, с увеличением длины когерентности эмитированных электронов [7]. Представляется очевидным, что для теоретического описания наблюдаемых наноразмерных эффектов необходимо последовательное квантово-механическое рассмотрение процесса полевой эмиссии электронов, т.е. эмиссия должна рассматриваться как туннельный переход между двумя многочастичными электронными квантовыми состояниями, энергетическая структура которых явно зависит от размеров эмиттера и коллектора. Такую возможность даёт метод гамильтониана переноса, предложенный Бардиным [8] и развитый в ряде более поздних работ [10, 9, 11], в основе которого лежит квазиклассическое приближение квантовой механики.

Следует отметить, что существуют и другие теоретические подходы для описания квантовых закономерностей полевой эмиссии электронов: форма-

лизм квантовой теории рассеяния на "embedding" потенциалах [12]; метод прямого интегрирования, зависящего от времени уравнения Шредингера в приближении локального функционала плотности [13, 14, 15]; метод классического статистического туннелирования [16]. Все перечисленные подходы так или иначе учитывают не только квантовую природу самого эффекта туннелирования, но и квантовые эффекты в начальном и конечном состоянии. Однако в подходе Бардина [8] эмиссионный ток выражается через волновые функции электрона из катода и анода в подбарьерной области, которые получены независимо друг от друга с учётом приложенного электрического поля, но нормированы на волновые функции невозмущённой задачи. В этом случае не нужно решать трудную, требующую дополнительных предположений и знания полного гамильтониана задачу о нахождении волновой функции электрона во всём пространстве.

1. Метод Бардина

Метод Бардина основан на квазиклассическом приближении квантовой механики Вентцеля-Крамерса-Брюллюэна (ВКБ) [17] и позволяет решить задачу о квантовом туннелировании, не решая уравнение Шредингера для туннелирующей частицы в области туннельного перехода. Туннельный ток квантового перехода может быть получен из золотого правила Ферми [18] и представляется в виде:

$$I = \frac{4\pi q}{\hbar} \sum_{L,R} |M_{L,R}|^2 \delta(E_R - E_L), \quad (1)$$

где q – заряд электрона, \hbar – постоянная Планка, символы L и R отвечают, соответственно, квантовому состоянию электронов в катоде (эмиттере) и аноде, дельта-функция Дирака $\delta(E_R - E_L)$ отражает закон сохранения энергии в процессе квантового туннелирования, $\sum_{L,R}$ – означает суммирование или интегрирование по начальным и конечным состояниям эмиссионных электронов. $M_{L,R}$ – амплитуда квантового перехода электрона из катода в анод, связанная

с соответствующим током перехода, записывается в виде двухкратного интеграла по поверхности YZ перпендикулярной направлению эмиссии X :

$$M_{L,R} = \frac{\hbar^2}{2m} \iint_{x=\bar{x}} dy dz [\Psi_L^*(x, y, z) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_R(x, y, z) - \Psi_R(x, y, z) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_L^*(x, y, z)], \quad (2)$$

$x = \bar{x}$ – поверхность в области, запрещённой для классического движения, условия фиксирования которой будут рассмотрены позже. $\Psi_R(x, y, z)$ и $\Psi_L^*(x, y, z)$ – волновые функции электрона из анода и из катода в области подбарьерного перехода. Поскольку электрическое поле приложено нормально к поверхности катода и Гамильтониан электронов распадается на сумму двух частей, зависящих только от x или только от y и z , то зависимость от координат в волновых функциях электронов факторизуется

$$\Psi_{L,R}(x, y, z) = F_{L,R}(x) \Phi_{L,R}(y, z).$$

Обычно область эмиссии электронов в плоскости YZ считается достаточно большой по сравнению с де Бройлевской длиной волны электронов и для описания поперечного квазисвободного движения электронов используется приближение плоских волн, при котором волновые функции электрона могут быть записаны в виде:

$$\Phi_{L,R}(y, z) = e^{i(k_y^{L,R}y + k_z^{L,R}z)}.$$

В этом случае в формуле для амплитуды перехода M_{LR} (2) можно выполнить интегрирование по y и z ,

$$\iint \Phi_{L,R}(y, z) dy dz = \delta_{k_y^L, k_y^R} \delta_{k_z^L, k_z^R},$$

что даёт

$$M_{L,R} = \frac{\hbar^2}{2m} [F_L^*(x) \frac{\partial}{\partial x} F_R(x) - F_R(x) \frac{\partial}{\partial x} F_L^*(x)] \delta_{k_y^L, k_y^R} \delta_{k_z^L, k_z^R}.$$

Представим сумму (интеграл) по начальным и конечным квантовым состояниям следующим образом:

$$\sum = \sum_{L,R} \sum_{L_x, R_x} \sum_{k_y^L, k_y^R} \sum_{k_z^L, k_z^R},$$

тогда из (1) и (2) получаем

$$I = \frac{4\pi q}{\hbar} \sum_{L_x, R_x} \sum_{k_y^L, k_y^R} \sum_{k_z^L, k_z^R} \left| \frac{\hbar^2}{2m} [F_L^*(x) \frac{\partial}{\partial x} F_R(x) - F_R(x) \frac{\partial}{\partial x} F_L^*(x)] \right|_{x=\bar{x}}^2 \delta(\varepsilon_L - \varepsilon_R) f(E_L)(1 - f(E_R)), \quad (3)$$

где $f(E_{L,R})$ – функция распределения Ферми по квантовым состояниям,

$$\varepsilon_{L,R} = E_{L,R} - E_{L,R}^T$$

– энергия, связанная с движением по оси X , и

$$E_{L,R}^T = \frac{\hbar^2}{2m} ((k_y^{L,R})^2 + (k_z^{L,R})^2)$$

– энергия движения в плоскости YZ .

В квазиклассическом приближении [19] волновые функции электронов в подбарьерной области, запрещённой для классического движения, представляются в виде:

$$F_{L,R}(x) = \frac{C_{L,R}}{2} |\kappa_{L,R}|^{-1/2} \exp(\alpha_{L,R} \int_{x_{L,R}}^x |\kappa_{L,R}| dx), \quad (4)$$

где $\alpha_L = -1$, $\alpha_R = +1$ и

$$\kappa_{L,R} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U^{eff}(x) - qEx - \varepsilon_{L,R})},$$

E – приложенное электрическое поле, $x_{L,R}$ – левая (со стороны катода) и правая (со стороны анода) границы области, запрещённой для классического движения, $U^{eff}(x)$ – эффективная высота потенциального барьера между катодом и анодом при приложенном поле. Например, в случае плоского металлического катода, с учётом сил электростатического изображения, можно записать:

$$U^{eff}(x) = E_F + \phi - \frac{q^2}{4x},$$

где E_F – энергия Ферми электронов в катоде, ϕ – работа выхода электрона из катода.

В традиционной постановке задачи о полевой эмиссии электронов полагают, что квантовый переход осуществляется в состоянии непрерывного спектра или в вакуум. При этом учитывается, что электроны достигли анода, а какие они заняли при этом квантовые состояния – безразлично, т.к. измеряется только анодный ток, который является интегралом по всем состояниям. В этом случае полагают, что все состояния справа от барьера свободные, т.е. $f(E_R) = 0$, а нормировочная константа C_R может быть выражена через энергетическую плотность квантовых состояний непрерывного спектра $\rho_R(\varepsilon_R)$:

$$C_R = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\pi \rho_R(\varepsilon_R)}}.$$

От суммирования по конечным состояниям надо перейти к интегрированию по правилу:

$$\sum_{R_x} \Rightarrow \int d\varepsilon_R \rho_R(\varepsilon_R).$$

Нормировочная константа C_L определяется из условия сшивания невозмущённой (при нулевом приложенном поле) волновой функции электрона из катода $\Phi_L(x)$ и волновой функции в подбарьерной области $F_L(x)$ (4) в некоторой точке x'_L , за которую можно выбрать координату точки достаточно близкой к x_L . Таким образом:

$$C_L = 2\Phi_L(x'_L) \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) |U^{eff}(x'_L) - qEx'_L - \varepsilon_L|^{1/4} \exp\left(\int_{x'_L}^{x_L} |\kappa_L| dx\right).$$

После подстановки волновых функций (4) в (3) получаем

$$I = \frac{4\pi q}{\hbar} \sum_{L_x} \sum_{k_y^L, k_z^L} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{C_L^2}{4\pi} \right) \quad (5)$$

$$\exp(-2 \int_{x_L}^{x_R} |\kappa_L| dx) f(E_L).$$

Если слева от барьера (в катоде) движение по осям Y и Z можно рассматривать как квазисвободное, то суммирование по дискретным квантовым состояниям можно заменить интегрированием по непрерывному спектру волновых чисел k_y^L и k_z^L :

$$\begin{aligned} \sum_{k_y^L, k_z^L} &\Rightarrow \frac{\sigma}{(2\pi)^2} \int dk_y \int dk_z f(E_L) = \\ &= \frac{\sigma}{4\pi} \left(\left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) (k_B T) \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \varepsilon_L}{k_B T} \right) \right) \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где σ – площадь поверхности, с которой осуществляется эмиссия электронов, $k_F^2 = 2mE_F / \hbar^2$, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура.

С учётом (5) и (6) плотность эмиссионного тока равна:

$$\begin{aligned} J = \frac{I}{\sigma} &= \frac{e}{4\pi\hbar} \sum_{L_x} (k_B T) \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \varepsilon_L}{k_B T} \right) \right) \times \\ &\times C_L^2 \exp \left(-2 \int_{x_L}^{x_R} |\kappa_L| dx \right). \end{aligned} \quad (7)$$

В приближении квазисвободного движения электронов по оси X , когда размер катода в направлении эмиссии много больше де Бройлевской длины волны электрона, в (3) надо положить, что

$$C_L = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\pi \rho_L(\varepsilon_L)}} \quad \text{и} \quad \sum_{L_x} \Rightarrow \int d\varepsilon_L \rho_L(\varepsilon_L).$$

Тогда эмиссионный ток записывается в виде, из которого может быть получена хорошо известная формула Фаулера-Нордгейма [20], отвечающая случаю вырожденного электронного газа ($T = 0$):

$$\begin{aligned} J^{FN} &= \frac{qm k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \ln \left(1 + \left(\frac{E_F - \varepsilon_L}{k_B T} \right) \right) \times \\ &\times \exp \left(-2 \int_{x_L}^{x_R} |\kappa_L| dx \right) d\varepsilon_L. \end{aligned} \quad (8)$$

2. Модель

В экспериментальных работах [3, 4, 5, 6] было показано, что размерные эффекты начинают играть роль, когда характеристические размеры нанообъектов становятся около 10 нм. Так, в работе [5] исследовались характеристики проводящих углеродных наночастиц толщиной 3-40 нм, синтезированных на поверхности алмазоподобной плёнки, а в работе [6] изучалась зависимость работы выхода электронов от толщины ультратонкой графитовой плёнки (7-25 нм). Во втором случае наноразмерные эффекты свя-

заны только с одним направлением, которое совпадает с направлением эмиссии электронов. Рассмотрим в рамках подхода Бардина полевою эмиссию электронов ультратонкими металлическими плёнками. В этом случае нам необходимо вернуться к формуле (7), в которой необходимо учесть, что эмиссия электронов происходит с некоторых дискретных уровней, возникших за счёт локализации движения по оси X . Т.е. движение электронов в плоскости YZ будем, как и раньше, считать квазисвободным и, следовательно, распределение электронов по энергетическим уровням подчиняется закону Ферми с граничной энергией E_F . В то же время, по оси X движение электронов ограничено размерами плёнки и его можно в первом приближении моделировать как движение в потенциальной яме конечной глубины и конечного размера. В этом случае из (7) для плотности эмиссионного тока получаем следующую формулу:

$$\begin{aligned} J &= \frac{q k_B T}{4\pi\hbar} \sum_n C_n^2 \exp(-2 \int_{x_{L,n}}^{x_{R,n}} |\kappa_{L,n}(x)| dx) \times \\ &\times \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \varepsilon_n}{k_B T} \right) \right), \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$C_n = 2\Phi_n(x'_L) \sqrt{\kappa_L(x'_L)} \exp \left(\int_{x'_L}^{x'_L} |\kappa_L| dx \right), \quad (10)$$

$\Phi_L(x'_L)$ – невозмущённая волновая функция электрона в точке близкой к границе раздела плёнка-вакуум, n – нумерует квантовые состояния дискретного спектра в одномерной потенциальной яме по оси X .

Для численной оценки будем полагать, что потенциальная яма имеет левую бесконечно высокую стенку при $x = -a$, за нулевой отсчёт энергии выберем значение потенциальной энергии на дне ямы, правая стенка ямы имеет координату $x = 0$ и высоту $U = E_F + \phi$, порядка нескольких электрон-вольт. При выбранной геометрии задачи (см. рис. 1)

$$\kappa_L(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U - \frac{q^2}{4x} - qEx - \varepsilon_n)}$$

и

$$x_{L,R} = \frac{U - \varepsilon_n \pm \sqrt{(U - \varepsilon_n) - q^3 E}}{2qE}.$$

Решение стандартного одномерного уравнения Шредингера для электрона в потенциальной яме конечной глубины U даёт условие квантования для безразмерной переменной ξ :

$$\frac{\sin(\xi_n)}{\xi_n} = \pm \frac{1}{\sqrt{C}}, \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} C &= 2mUa^2 / \hbar^2, \quad \xi_n = k_n a, \\ \eta_n^2 &= C - \xi_n^2, \quad \varepsilon_n = U \xi^2 / C. \end{aligned}$$

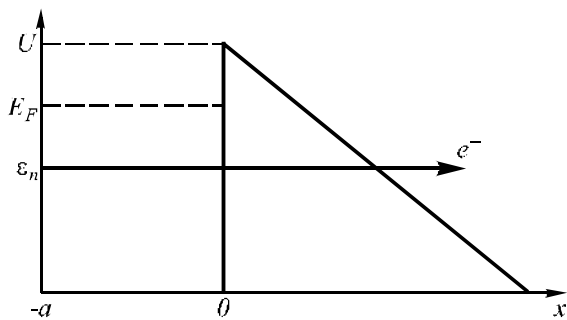


Рис.1. Форма потенциального барьера при приложенном электрическом поле

Квадрат модуля нормированной волновой функции в точке $x = x'_L > 0$ равен

$$|\Phi_n(x'_L)|^2 = \frac{1}{a} \left(\frac{2\xi_n^2 \eta_n}{C(1+\eta_n)} \right) e^{-2\eta_n x'_L/a}. \quad (12)$$

3. Численные оценки

Для упрощения численной оценки рассматриваемых эффектов не будем учитывать силы электростатического изображения, при этом интеграл в экспоненте, определяющей вероятность туннелирования, может быть вычислен в элементарных функциях [19]. В этом приближении

$$U^{eff}(x) = U = E_F + \phi,$$

$$\kappa_L(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U - qEx - \epsilon_n)},$$

$$x_L = 0, \quad x_R = \frac{U - \epsilon_n}{qE}.$$

Также можно положить, что $x'_L = x_L = 0$. Расчётная формула для плотности эмиссионного тока с n -го квантового уровня, зависящая от толщины плёнки и глубины потенциальной ямы по направлению перпендикулярному поверхности эмиссии, представляется в виде

$$J_n = \frac{qk_B T}{\pi \hbar} |\Phi_n(0)|^2 \kappa_L(0) \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \epsilon_n}{k_B T} \right) \right) \times \exp \left(-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{(U - \epsilon_n)^{3/2}}{qE} \right). \quad (13)$$

Число дискретных энергетических уровней в зависимости от толщины плёнки a можно оценить

$$n(a) = \int \rho_L(\epsilon) d\epsilon = \frac{a}{\pi} \sqrt{\frac{2mE_F}{\hbar^2}} \approx 4,3 \left(\frac{a}{1 \text{ нм}} \right).$$

Критерием перехода от дискретного спектра к непрерывному распределению по энергиям может быть малость отношения среднего расстояния между уровнями к ширине энергетической зоны

$$\delta(a) = \frac{\Delta\epsilon}{E_F} = \frac{1}{n(a)} \approx 0,23 \left(\frac{1 \text{ нм}}{a} \right).$$

Можно ожидать, что уже при толщине плёнки около $a \approx 100$ нм или больше квантоворазмерных

эффектов не возникает и плотность тока, в случае непрерывного спектра по энергиям, вычисляется по формуле

$$J^{FN} = \frac{qmk_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\epsilon \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \epsilon}{k_B T} \right) \right) \times \exp \left(-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{(U - \epsilon)^{3/2}}{qE} \right). \quad (14)$$

Для холодных катодов ($T = 300$ К, $k_B T = 2,6 \cdot 10^{-2}$ эВ) плотность заселения энергетических уровней выше энергии Ферми E_F ничтожно мала, а экспоненциальный множитель в (13) и (14) быстро убывает, когда разность $E_F - \epsilon$ растёт. Поэтому в аргументе экспоненты можно приближенно записать $(U - \epsilon)^{3/2} \approx \phi^{3/2} + \frac{3}{2} \sqrt{\phi} (E_F - \epsilon)$. С другой стороны, при низких температурах фактор, учитывающий заселённость уровней, также упрощается

$$k_B T \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \epsilon}{k_B T} \right) \right) \approx E_F - \epsilon$$

и в (14) интегрирование по энергиям электронов выполняется элементарно. В силу быстрой сходимости, верхний предел в интеграле может быть положен бесконечно большим, что даёт

$$J^{FN} = \frac{q^3 E^2}{16\pi^2 \hbar \phi} \exp \left(-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\phi^{3/2}}{qE} \right). \quad (15)$$

Поскольку для ультратонких плёнок спектр энергетических состояний надо считать дискретным, то разностью $E_F - \epsilon_n$ для конкретного уровня нельзя пренебречь и формула для эмиссионного тока (13), с учётом (12), записывается в виде

$$J_n = \frac{q}{\pi \hbar a^2} \left(\frac{2\xi_n^2 \eta_n^2}{C(1+\eta_n)} \right) (E_F - \epsilon_n) \times \exp \left(-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{(U - \epsilon_n)^{3/2}}{qE} \right). \quad (16)$$

Можно показать, что в пределе $a \rightarrow \infty$ или $C \rightarrow \infty$ уравнение на собственные значения (11) упрощается:

$$\begin{aligned} \sin(\xi_n) &= 0, & \xi_n &= k_n a = \pi n, \\ \epsilon_n &= \epsilon_1 n^2, & \epsilon_1 &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \end{aligned}$$

В предположении, что эмиссия идёт только с одного самого близкого к энергии Ферми E_F уровня, получаем

$$J_n^{a \rightarrow \infty} \approx \frac{q^3 E^2}{2e\pi^3 \hbar \phi} \exp \left(-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\phi^{3/2}}{qE} \right),$$

что достаточно хорошо согласуется с (15), т.к. $2e\pi^3 \approx 168,5$, а $16\pi^2 \approx 157,9$. Для численных оценок

рассмотрим медную плёнку, для которой: $E_F = 7$ эВ, $\phi = 4,5$ эВ, $U = 11,5$ эВ. Заметим, что выбранные численные значения получены в экспериментах с микроскопическими образцами и вопрос о прямом измерении работы выхода электронов с ультратонкой плёнки остаётся открытым.

На рис. 2 показана рассчитанная нами зависимость от толщины плёнки отношения

$$R(a, qE) = \sum_n J_n / J^{FN}$$

при приложенном поле $qE = 1$ эВ/нм.

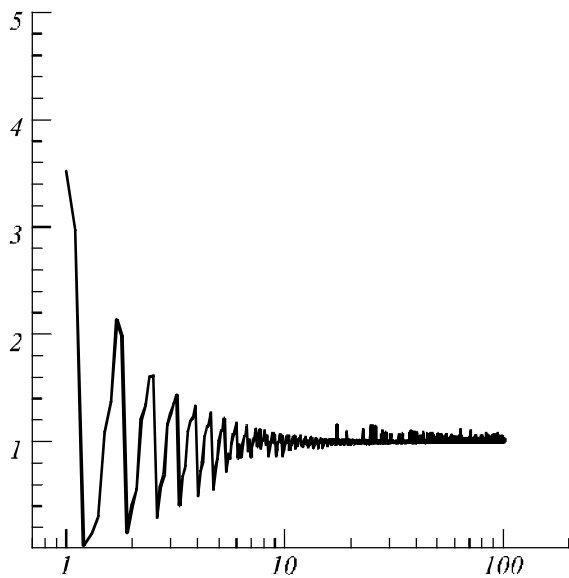


Рис. 2. $R(a, qE)$ в зависимости от a (нм) при $qE = 1$ (В/нм)

Заметим, что для толщин плёнки $a \leq 10$ нм эмиссия происходит только с самого верхнего уровня, наиболее близкого к E_F , а вклад остальных уровней сильно (на порядок и более) подавлен. В случае более толстых плёнок уже необходимо учитывать соизмеримые между собой вклады нескольких верхних уровней. Таким образом, качественным эффектом, подтверждающим наноразмерные эффекты в полевой эмиссии электронов ультратонкими плёнками, было бы наблюдение пиков в энергетическом спектре электронов. Число пиков зависит от толщины плёнки и приложенного поля: чем меньше a , тем меньше пиков. С увеличением приложенного поля число уровней, дающих вклад в эмиссионный ток, также увеличивается пропорционально E^2 . Однако это заметно только для достаточно толстых плёнок с $a > 30$ нм, когда полное число энергетических уровней становится достаточно большим. Рис. 2 показывает, что отношение $R(a, qE)$ при $qE = 1$ эВ/нм имеет ярко выраженную структуру дискретных пиков, когда толщина плёнки становится меньше, чем $a < 10$ нм. Наблюдаемое поведение является проявлением квантового характера движения электронов в направлении перпендикулярном поверхности ультратонкой плёнки. Уменьшение отношения практически до нуля при некоторых значениях толщи-

ны a связано с тем, что при выбранных параметрах (a , U) энергия самого верхнего заселённого уровня значительно меньше энергии Ферми E_F и эмиссия с него сильно подавлена фактором, определяющим вероятность туннелирования через барьер. В модели предсказывается также и существование дискретных уровней с энергией больше, чем E_F . Однако вероятность их заселения при $T \approx 300$ К ничтожно мала и вклада в эмиссионный ток они не дают.

Если уменьшать приложенное поле до значений, при которых наблюдается эмиссионный ток в наноструктурах из графита, примерно $qE = 0,01$ В/нм, то величина тока, вычисленная по формулам (15) и (16), экспоненциально падает до пренебрежимо малых величин. Причём вклад дискретных уровней падает быстрее и становится меньше, чем значения, рассчитанные по формуле (15), как это видно на рис. 3. Это объясняется тем, что с уменьшением приложенного поля сужается область энергий электронов, дающих вклад в эмиссию и в том случае, когда эмиссия идёт с одного или нескольких дискретных уровней, значения энергий этих уровней оказывается значительно меньше, чем E_F .

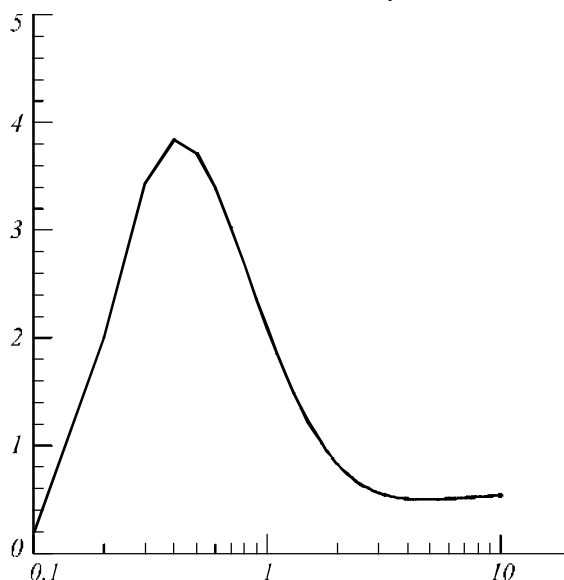


Рис. 3. $R(a, qE)$ в зависимости от qE (В/нм) при $a = 1$ нм

Для объяснения экспериментально наблюдаемых эмиссионных токов при низких приложенных полях обычно делают предположение, что с уменьшением размера эмиттера хотя бы по одному направлению до уровня нанометров уменьшается работа выхода электронов с поверхности эмиттера. Такие предположения основываются на гипотезе, что для описания эмиссионных токов из ультратонких плёнок может применяться формула Фаулера-Нордгейма (15), в которой, формально уменьшая работу выхода ϕ до значений в $10^{-2} \div 10^{-3}$ эВ, можно описать экспериментальные данные. Однако, как показывает даже качественный анализ, дискретный характер спектра энергий наноструктур приводит к другому типу зависимости эмисси-

онного тока от приложенного поля, который не описывается простой непрерывной зависимостью (15).

Заключение

В работе получены следующие результаты:

- в модели прямоугольной потенциальной ямы получена формула для расчёта эмиссионного тока электронов ультратонкой металлической плёнки с учётом дискретной структуры энергетического спектра (16),
- проанализирована зависимость величины эмиссионного тока от толщины плёнки и приложенного электрического поля,
- показано, что для тонких плёнок и слабых полей формула Фаулера—Нордгейма (15) не может описать дискретный характер зависимости эмиссионного тока, связанной с наноразмерными эффектами, при любом выборе параметров модели.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант РФФИ 10-07-00453. Автор благодарен Д.Л. Головашкину и В.Д. Фролову за интерес к работе и полезные обсуждения полученных результатов.

Литература

1. **Фролов, В.Д.** Размерный эффект в работе выхода электронов / В.Д. Фролов, С.М. Пименов, В.И. Конов, Е.Н. Лубнин // Российские нанотехнологии. – 2008. – Т. 3. – С. 102.
2. **Елецкий, А.В.** Углеродные трубки и их эмиссионные свойства / А.В. Елецкий // УФН. – 2002. – Т. 172. – С. 401.
3. **Frolov, V.D.** Electronic properties of the emission sites of low-field emitting diamond films / V.D. Frolov, A.V. Karabutov, S.M. Pimenov, V.I. Konov // Diamond and Related Materials. – 2000. – Vol. 9. – P. 1196-1200.
4. **Frolov, V.D.** Similarity in field electron emission from nanocrystalline diamond and related materials / V.D. Frolov, A.V. Karabutov, S.M. Pimenov, V.I. Konov, V.P. Ageev // Diamond and Related Materials. – 2001. – Vol. 10. – P. 1719-1726.
5. **Frolov, V.D.** Field electron emission and nanostructural correlations for diamond and related materials / V.D. Frolov, A.V. Karabutov, S.M. Pimenov, V.I. Konov // Ultramicroscopy. – 2003. – Vol. 95. – P. 99-105.
6. **Frolov, V.D.** The low-dimensional effect in single carbon-based nanoemitters of electrons / V.D. Frolov, A.V. Pimenov, V.I. Konov, V.I. Kuzkin // Applied Physics A. – 2004. – Vol. 78. – P. 21-23.
7. **Fransen, M.J.** Field emission energy distributions from individual multiwalled carbon nanotubes / M.J. Fransen, T.L. van Rooy, P. Kruit // Appl. Surf. Science. – 1999. – Vol. 146. – P. 312.
8. **Bardin, J.** Tunnelling from a many-particle point of view / J. Bardin // Phys. Rev. Lett. – 1961. – Vol. 57. – P. 57.
9. **Penn, D.R.** Field emission as a probe of the surface density of states / D.R. Penn, E.W. Plummer // Phys. Rev. B. – 1974. – Vol. 9. – P. 1216.
10. **Penn, D.R.** Comment on "Field emission as a probe of the surface density of states" / D.R. Penn // Phys. Rev. B. – 1976. – Vol. 14. – P. 849.
11. **Ramprasad, R.** Calculation of the field—emission current from a surface using the Berdeen transfer Hamiltonian

- method / R. Ramprasad, L.R.C. Fonseca, P. van Allmen // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 62. – P. 5216.
12. **Ohwaki, T.** First-principles calculation of field emission from metal surfaces / T. Ohwaki, H. Ishida, A. Liebsch // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol.68. – P. 155422.
13. **Ishida, H.** First-principles calculation of tunnelling conductance / H. Ishida, D. Wortmann, T. Ohwaki // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 70. – P. 085409.
14. **Han, S.** Dynamical simulation of field emission in nanostructures / S. Han, M.H. Lee, J. Ihm // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 241402.
15. **Lee, S.B.** First-principles dynamic simulations of field emission from carbon nanotubes on gold substrate / S.B. Lee, S. Kim, J. Ihm // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 75. – P. 075408.
16. **Zhou, G.** Single electron emission from the closed-tips of single-walled carbon nanotubes / G. Zhou, W. Duan, B. Gu // J. of Chem. Phys. B. – 2003. – Vol. 21. – P. 382.
17. **Киселёв, В.В.** Квантовая механика / В.В. Киселёв – М.: МЦНМО, 2009.
18. **Ландау, Л.Д.** Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1974.
19. **Флюгге, З.** Задачи по квантовой механике / З. Флюгге. – М.: Мир, 1974.
20. **Fowler, R.N.** Electron emission in intense electric fields / R.N. Fowler, L.W. Nordheim // Proc. R. Soc. London, Ser. A. – 1928. – Vol. 119. – P. 173.

References

1. **Frolov, V.D.** Dimensional effect of work function of electrons / V.D. Frolov, A.V. Karabutov, S.M. Pimenov, V.I. Konov, E.N. Lubnin // Nanotechnologies in Russia. – 2008. – Vol. 3. – P. 688.
2. **Eletsky, A.V.** Carbon nanotubes and its emission properties / A.V. Eletsky // Usp. Fiz. Nauk. – 2002. – Vol. 172. – P. 401. – (in Russian).
3. **Frolov, V.D.** Electronic properties of the emission sites of low-field emitting diamond films / V.D. Frolov, A.V. Karabutov, S.M. Pimenov, V.I. Konov // Diamond and Related Materials. – 2000. – Vol. 9. – P. 1196-1200.
4. **Frolov, V.D.** Similarity in field electron emission from nanocrystalline diamond and related materials / V.D. Frolov, A.V. Karabutov, S.M. Pimenov, V.I. Konov, V.P. Ageev // Diamond and Related Materials. – 2001. – Vol. 10. – P. 1719-1726.
5. **Frolov, V.D.** Field electron emission and nanostructural correlations for diamond and related materials / V.D. Frolov, A.V. Karabutov, S.M. Pimenov, V.I. Konov // Ultramicroscopy. – 2003. – Vol. 95. – P. 99-105.
6. **Frolov, V.D.** The low-dimensional effect in single carbon-based nanoemitters of electrons / V.D. Frolov, A.V. Pimenov, V.I. Konov, V.I. Kuzkin // Applied Physics A. – 2004. – Vol. 78. – P. 21-23.
7. **Fransen, M.J.** Field emission energy distributions from individual multiwalled carbon nanotubes / M.J. Fransen, T.L. van Rooy, P. Kruit // Appl. Surf. Science. – 1999. – Vol. 146. – P. 312.
8. **Bardin, J.** Tunnelling from a many-particle point of view / J. Bardin // Phys. Rev. Lett. – 1961. – Vol. 57. – P. 57.
9. **Penn, D.R.** Field emission as a probe of the surface density of states / D.R. Penn, E.W. Plummer // Phys. Rev. B. – 1974. – Vol. 9. – P. 1216.
10. **Penn, D.R.** Comment on "Field emission as a probe of the surface density of states" / D.R. Penn // Phys. Rev. B. – 1976. – Vol. 14. – P. 849.

11. **Ramprasad, R.** Calculation of the field-emission current from a surface using the Bardeen transfer Hamiltonian method / R. Ramprasad, L.R.C. Fonseca, P. van Allmen // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 62. – P. 5216.
12. **Ohwaki, T.** First-principles calculation of field emission from metal surfaces / T. Ohwaki, H. Ishida, A. Liebsch // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – P. 155422.
13. **Ishida, H.** First-principles calculation of tunnelling conductance / H. Ishida, D. Wortmann, T. Ohwaki // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 70. – P. 085409.
14. **Han, S.** Dynamical simulation of field emission in nanostructures / S. Han, M.H. Lee, J. Ihm // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 241402.
15. **Lee, S.B.** First-principles dynamic simulations of field emission from carbon nanotubes on gold substrate / S.B. Lee, S. Kim, J. Ihm // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 75. – P. 075408.
16. **Zhou, G.** Single electron emission from the closed-tips of single-walled carbon nanotubes / G. Zhou, W. Duan, B. Gu // J. of Chem. Phys. B. – 2003. – Vol. 21. – P. 382.
17. **Kiselev, V.V.** Quantum mechanics / V.V. Kiselev, – Moscow: "MCNMO" Publisher. – 2009. – (in Russian).
18. **Landau, L.D.** Quantum mechanics / L.D. Landau, E.M. Lifshits. – Moscow: "Nauka" Publisher, 1974. – (in Russian).
19. **Flugge, S.** Practical quantum mechanics / S. Flugge. Springer-Verlag, 1971.
20. **Fowler, R.N.** Electron emission in intense electric fields / R.N. Fowler, L.W. Nordheim // Proc. R. Soc. London, Ser. A. – 1928. – Vol. 119. – P. 173.

NANOSCALE EFFECTS IN FIELD ELECTRON EMISSION OF ULTRATHIN METAL FILMS

V.A. Saleev

Samara State University,

S.P. Korolyov Samara State Aerospace University,

Image Processing Systems Institute of the RAS

Abstract

The electron field emission of nanoscale structures is considered in the framework of Bardeen transfer Hamiltonian approach. The model involved the finite size of emitter in electron emission direction is proposed. The emission is considered as tunnelling between two many-particle quantum states. The master formulas are obtained and the numerical algorithm is proposed. In the reductive model, the numerical estimations of nanoscale effects in the electron field emission of ultrathin metal films have been done.

Key words: electron field emission, wave function, nanoscale effects, Bardeen transfer Hamiltonian method, Schrödinger equation.

Сведения об авторе



Салеев Владимир Анатольевич, 1959 года рождения, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры математического моделирования в механике Самарского государственного университета (СамГУ) и, по совместительству, профессор кафедры физики Самарского государственного аэрокосмического университета (СГАУ) и ведущий научный сотрудник ИСОИ РАН. В 1981 году окончил физический факультет Куйбышевского государственного университета, в 1986 году окончил аспирантуру Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (г.

Москва) и защитил там кандидатскую диссертацию, а в 1996 году защитил докторскую диссертацию в Научно-исследовательском институте ядерной физики МГУ (НИИЯФ МГУ). Область научных интересов: физика квантовых явлений и процессов, квантовая теория поля и физика высоких энергий, компьютерное моделирование в физике. Публикации: около 150 научных работ, из них 70 в ведущих отечественных и зарубежных журналах, таких как «Ядерная физика», "Physical Review", "Physics Letters" и др.

E-mail: saleev@ssu.samara.ru

Vladimir Anatolievich Saleev is professor at Department of Mechanics and Mathematics Samara State University and professor at Department of Physics Samara State Aerospace University, and leading scientific researcher at Image Processing Systems Institute of the Russian Academy of Sciences. He received his MS, PhD and DrSc degrees in physics from Samara State University (1981), P.N. Lebedev Institute of Physics the Russian Academy of Sciences (1986) and Institute for Nuclear Research of Moscow State University, (1996). He is co-author of 150 scientific papers, including 70 papers in well-known Russian and foreign journals, such as "Physics of Atomic Nuclei", "Physical Review", "Physics Letters" et al. His current interests are quantum physics, quantum field theory and high energy physics, computer simulation in physics.

Поступила в редакцию 25 октября 2010 г.