



## 基于 OPERA 的纳米线电子场致发射仿真实验

祁康成, 青可欣, 黄煜程

(电子科技大学 光电科学与工程学院, 成都 611731)

**摘要:** 以氧化锌纳米线作为研究对象, 探究纳米线电子场致发射的影响因素, 提出了一套完整的虚拟仿真实验方案。该实验利用计算机仿真模拟软件 OPERA-3D 对氧化锌纳米线结构进行建模, 重点研究纳米线长径比、栅压、阴-栅间距以及纳米线阵列密度等因素对场致发射电流的影响及其作用机制。实验表明, 纳米线的长径比和阴-栅距离是影响其场致发射性能的重要参数, 同时合理控制纳米线阵列密度, 可以有效降低场屏蔽效应的影响。通过该仿真实验, 学生可以深入理解纳米线电子场致发射的基本原理和电子光学理论, 提高实践动手能力培养科研思维, 为其今后的学习打下坚实的基础。

**关键词:** 纳米线; 场致发射; 发射电流; 场屏蔽效应

中图分类号: O462.4

文献标志码: A

DOI: 10.12179/1672-4550.20230344

## Nanowire Field Emission Simulation Experiment Based on OPERA

QI Kangcheng, QING Kexin, HUANG Yucheng

(School of Optoelectronic Science and Engineering, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 611731, China)

**Abstract:** This article takes zinc oxide nanowires as the research object to explore the influencing factors of electron field emission from nanowires. To this end, a complete set of virtual simulation experimental schemes is proposed. The experiment utilizes computer simulation software OPERA-3D to model the zinc oxide nanowire structure, focusing on investigating the effects of factors such as the aspect ratio of nanowires, grid voltage, cathode-grid spacing, and nanowire array density on the field emission current and their underlying mechanisms. The experiments show that the aspect ratio of nanowires and the cathode-grid distance are significant parameters affecting their field emission performance. Meanwhile, reasonable control of the nanowire array density can effectively reduce the impact of field screening effects. Through this simulation experiment, students can gain a deeper understanding of the basic principles of electron field emission from nanowires and electron optics theory, improve their practical hands-on skills and cultivate scientific research thinking, and lay a solid foundation for their future studies.

**Key words:** nanowire; field emission; emission current; field shielding effect

自 1991 年日本物理学家 Iijima 合成碳纳米管后, 纳米线结构开始在学术界得到广泛关注<sup>[1]</sup>。由于其独特的物理和化学性质, 如小尺寸效应、量子限域效应、表面效应等, 在纳米器件的应用中表现出了巨大潜能, 因此成为诸多领域的研究热点, 如场效应晶体管、二极管、激光器、传感器等<sup>[2-6]</sup>。

鉴于纳米材料在科学研究领域的重要性, 许多课程也在各高校的相关专业应运而生, 如“纳米材料制备与表征”“纳米器件基础”“纳米半

导体材料”“真空微电子学”等。纳米线的场致发射原理是通过外加强电场以此来降低材料表面势垒的高度和宽度, 从而使纳米线尖端的大量电子穿透表面势垒逸出表面成为自由电子<sup>[7-8]</sup>。在纳米线的实际制备过程中, 纳米线的场致发射影响因素主要有长径比、栅压、阴-栅间距、纳米线阵列密度, 其中纳米阵列的密度直接关系到场屏蔽效应的大小, 同时在测试过程中栅压的大小和栅孔的位置也会对电子发射产生影响<sup>[9-12]</sup>。因此如何根据纳米线的结构, 探究影响场致发射的因素是

收稿日期: 2023-07-12; 修回日期: 2024-05-04

基金项目: 电子科技大学虚拟仿真实验教学项目(Y03020206200175); 电子科技大学人力资源部教师发展中心项目(PYPX202104); 国家自然科学基金(61704021)。

作者简介: 祁康成(1969-), 男, 博士, 副教授, 主要从事光电子信息材料与器件方面的研究。E-mail: kcqi@uestc.edu.cn

相关专业学生的学习重点和难点。

碳纳米管、硅纳米线、氧化锌纳米线等是目前常见的场致发射纳米线材料<sup>[13-14]</sup>。由于现实中实验有时会在安全风险, 同时由于实验对象量级属于纳米级别, 其可视性、易测性和再现性都会受到很多现实因素的影响, 因此通过软件进行仿真能够更加清晰地展现实验结果, 同时不受实验时间和空间的约束。实验过程中所制备出的氧化锌纳米线取向性好, 电子发射更加均匀, 因此本文以氧化锌纳米线作为发射体, 利用三维电磁场研究及分析平台(operating environment for electromagnetic research and analysis-3D, OPERA-3D)计算机模拟软件设计基于纳米线场致发射三极管(包括阴极、栅极和阳极)的仿真实验。

利用 OPERA-3D 研究纳米线长径比、栅压、阴-栅间距以及纳米线阵列密度对电子场致发射性能的影响, 以此加深学生对电子光学和场致发射理论的理解, 并且熟练掌握 OPERA-3D 仿真软件的应用, 提高动手能力, 培养科研思维。同时, 该实验的教学也能增强教学过程的多样性和生动性, 丰富教学资源, 有助于教学质量的提高。

## 1 模拟平台

OPERA-3D 电磁分析软件是由英国高能物理研究所研发的一款三维电磁场分析软件, 用于解决各类电磁场及其相互耦合的问题, 在国际电磁场仿真领域广为使用, 为实验的开展提供了良好的技术平台<sup>[15-16]</sup>。该软件中有很多不同功能的分析模块, 帮助我们简便分析静态场、时变场、高速空间电荷效应等。OPERA-3D 模拟软件主要采用的是有限元法求解电磁场, 即将所求物理空间或物体进行有限个单元划分, 并对每个单元内的场通过简单的多项式进行函数近似, 从而处理无法得到解析解的偏微分及积分问题<sup>[17]</sup>。

本文通过运用 OPERA-3D 模拟软件建立单根氧化锌纳米线三极管的几何物理模型研究其场致发射的影响因素, 然后利用该软件中的带电粒子仿真模块, 分析纳米线的场强分布、电子轨迹和发射电流。研究内容主要分为以下 4 个部分:

1) 单根氧化锌纳米线的长径比对电子场致发射的影响;

2) 栅压改变的情况下对单根氧化锌纳米线场致发射的影响;

3) 阴-栅间距改变的情况下对单根氧化锌纳米线场致发射的影响;

4) 在上述实验的基础上, 分别以  $2 \times 2$ 、 $3 \times 3$ 、 $4 \times 4$ 、 $5 \times 5$  纳米线阵列作为电子发射源, 探究纳米线阵列密度对电子场致发射的影响。

通过上述实验要求学生熟练掌握 OPERA-3D 模拟软件的应用, 准确识别分析仿真文件中的信息, 理解不同因素影响纳米线场致发射的原因, 加深学生对电子光学和场致发射理论的学习。

## 2 初始物理模型

为了探究影响氧化锌纳米线场致发射的影响因素, 初步设计单根氧化锌纳米线三极管的基本结构, 但由于三维情况下纳米线实际长径比过高, 导致网格划分过密使得计算机内存消耗严重, 最终容易出现内存不足等问题。为避免出现计算机内存不够和仿真时间过长的问题, 仿真过程中将纳米线半径适当增大。该尺寸调整不影响三极管结构的电场分布趋势。

设计单根氧化锌纳米线三极管的物理模型如图 1(a)所示, OPERA-3D 仿真结构图如图 1(b)所示。电子从阴极(K)表面发射, 在电子光学透镜作用下通过栅网(G), 最终被阳极(A)收集。该结构包括了 3 个部分。

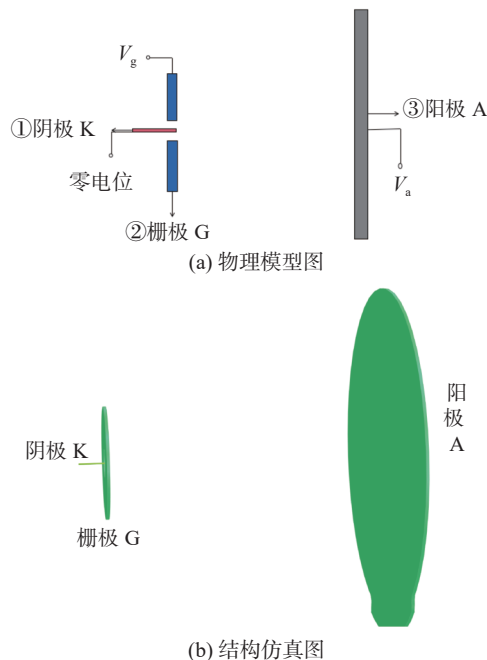


图 1 单根氧化锌纳米线三极管结构

1) 场致发射阴极即单根纳米线, 长径比 20, 发射面半径  $0.5 \mu\text{m}$ , 纳米线长度  $10 \mu\text{m}$ , 电位 0。

2) 栅极, 栅孔半径为  $10\ \mu\text{m}$ , 厚度  $1\ \mu\text{m}$ , 电压  $150\ \text{V}$ , 栅极上平面(靠阳极一侧)与阴极发射面保持平齐。

3) 阳极, 电压  $1\ \text{kV}$ , 阳极与阴极发射面间距固定为  $100\ \mu\text{m}$ 。

在仿真过程中, 除了确定结构尺寸还需要确定氧化锌纳米线电子场致发射阴极的工作温度、功函数以及场增强因子等模拟参数。功函数为阴极材料的一个电子从尖端内部转移到表面所需的最少能量; 场增强因子是评价电子场致发射的重要参数之一, 其取决于场致发射阴极尖端的几何尺寸<sup>[18-19]</sup>。在本实验中, 阴极的温度设置为  $300\ \text{K}$ , 功函数设置为  $4.45\ \text{eV}$ , 场增强因子设定为  $60$ 。

### 3 仿真结果

通过对仿真的实验结果进行分析理解, 将实践与理论更加紧密的结合, 由此培养学生仿真信息提取、数据处理以及归纳总结的能力。在本实验中, 主要研究的是氧化锌纳米线的长径比、栅压、阴-栅间距以及纳米线阵列密度对电子场致发射的因素, 所以实验结果分析主要围绕这几个影响因素展开, 利用控制变量法, 逐一改变影响因素研究场致发射的变化规律。

#### 3.1 实验一: 长径比对场致发射的影响

该实验探究纳米线长径比对场致发射的影响, 纳米线的长径比是指单根纳米线长度和其直径的比值, 长径比的改变对纳米线场致发射电流影响很大。

以软件可划分的最小单位  $100\ \text{nm}$  为步长进行变化, 通过改变纳米线的长度以此达到改变纳米线长径比的目的。实验过程中纳米线长度从  $9\ \mu\text{m}$  增加到  $11\ \mu\text{m}$ (即长径比从  $18$  增大到  $22$ ), 每次增加步长为  $0.1\ \mu\text{m}$ , 得到其场致发射电流的变化情况如图 2 所示。当长径比低于  $19$  时, 场致发射电流几乎为零, 随着纳米线长径比的不断增加, 场致发射电流也随之增大。纳米线的尖端直径小, 易于发射电子, 长径比大的纳米线, 具有更尖锐的尖端, 这有助于增强电子的发射能力。通过该实验, 我们认为纳米线的长径比越大, 其场致发射越好。但是随着纳米线的长径比增大, 电子在纳米线中的运动受限程度更高, 这也可能导致电子在有限空间内受到彼此阻碍运动的影响。在适当的纳米线密度下, 这种阻碍作用可以被忽略, 长径比大的纳米线仍然具有优异的场致发射性能。

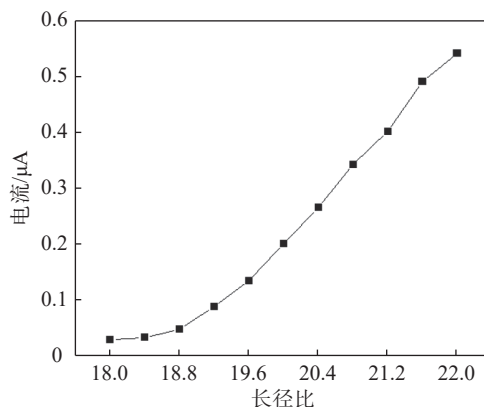


图 2 纳米线长径比与发射电流的关系

#### 3.2 实验二: 栅压对场致发射的影响

该实验探究栅极电压对氧化锌纳米线场致发射的影响。在氧化锌纳米线三极管结构中, 栅极可以看成控制阴极产生发射电流的开关, 阻止或允许阴极电子通过, 当电流密度  $j=0.1\ \mu\text{A}/\text{cm}^2$  时, 此时栅压为开启电压。

以  $50\ \text{V}$  栅压变化为步长, 仿真长径比为  $22$  的氧化锌纳米线随栅极电压变化的发射情况如图 3 所示。通过图可以看出, 栅压越大, 纳米线的场致发射性能越好。当栅极电压为  $100\ \text{V}$  时, 达到场致发射的开启电压, 即电流密度  $j=0.1\ \mu\text{A}/\text{cm}^2$ 。随着栅极电压的提高, 阴极的发射电流不断增大, 因此认为栅极电压的增大导致阴极发射表面的场强增大, 使得阴极表面势垒削弱, 场致电子发射效应增强。

#### 3.3 实验三: 阴-栅距离对场致发射的影响

该实验探究阴极和栅网的距离对场致发射的影响。通过研究发现阴极到栅网的距离会影响纳米线电子束发射电流的大小和发散角的大小。图 4(a)给出了在不加栅网的情况下, 阴极发射电子的轨迹, 可以看出此时电子束发散角较大, 约为  $40.60^\circ$ 。添加栅网并改变阴-栅距离  $d_{\text{gk}}$ (阴极发射面与栅极上表面的距离), 设定阴-栅距离  $d_{\text{gk}}$  分别为  $0$ 、 $-0.2$ 、 $0.2\ \text{mm}$  时, 观察不同阴-栅间距下的电子轨迹的变化情况, 分别如图 4(b)~图 4(d)所示, 当  $d_{\text{gk}}=0$  时, 电子束发散角约为  $26.56^\circ$ ; 当  $d_{\text{gk}}=-0.2\ \text{mm}$  时, 电子束发散角约为  $22.61^\circ$ ; 当  $d_{\text{gk}}=0.2\ \text{mm}$  时, 电子束发散角约为  $23.21^\circ$ 。通过与图 4(a)相对比可以看出, 添加栅网后阴极发射电流的发散角明显减小, 电子轨迹也更加汇聚。

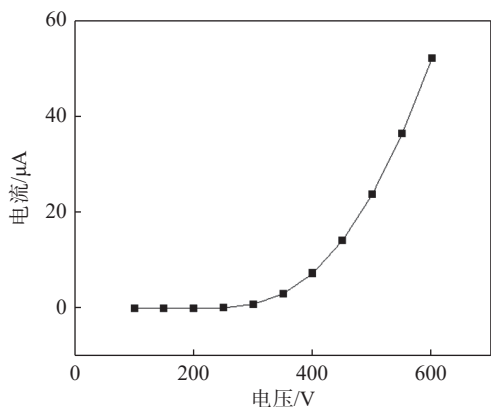
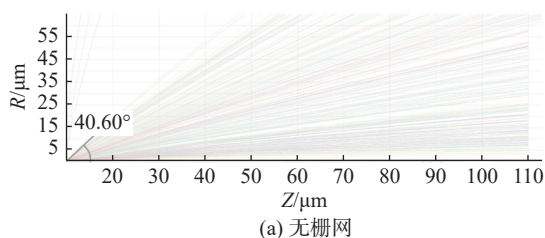
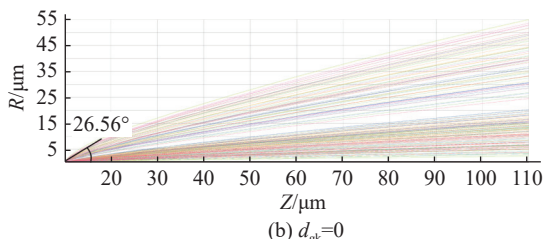


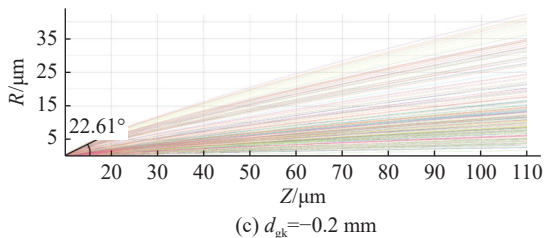
图 3 纳米线长径比 22 的  $I-V$  曲线



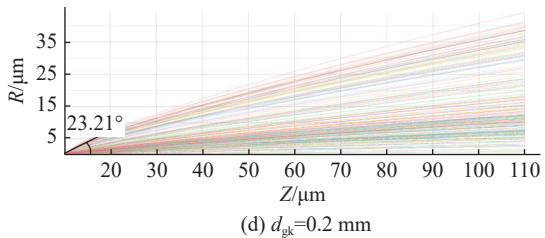
(a) 无栅网



(b)  $d_{gk}=0$



(c)  $d_{gk}=-0.2$  mm



(d)  $d_{gk}=0.2$  mm

图 4 场致发射电子束流

如图 5 所示, 不同阴-栅间距对发射电流的大小会有一定影响。阴-栅间距  $d_{gk}$  过大或过小时, 发射电流很小, 当  $d_{gk}=-0.2$  mm 时(即阴极发射面低于栅极上表面 0.2 mm), 阳极接收到的发射电流最大, 此时发射电流的发散角为  $22.61^\circ$ , 发散程度较小。因此,  $d_{gk}=-0.2$  mm 可作为较佳的阴-栅

间距参数。但是在实际器件安装过程中, 由于纳米线过于密集, 外加栅网的工艺制作导致栅孔无法与纳米线一一对应, 容易造成阴-栅短路, 因此需保证阴-栅间距  $d_{gk}>0$ , 最终在实际安装过程中将  $d_{gk}=0.2$  mm 作为较佳的阴-栅间距参数。

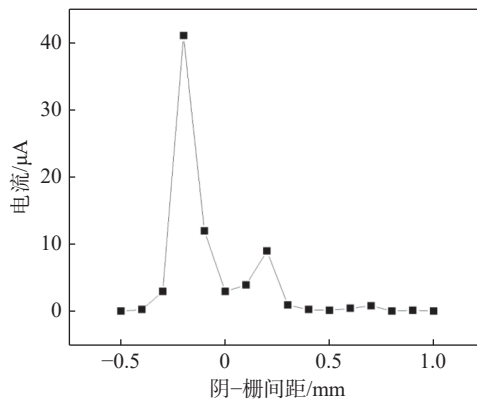


图 5 阴-栅距对发射电流的影响

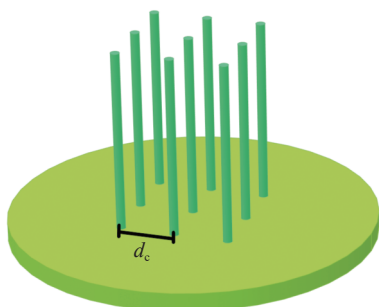
### 3.4 实验四: 纳米线阵列密度对场致发射的影响

该实验探究不同纳米线阵列密度对场致发射的影响。当纳米线阵列密度较小时, 纳米线尖端与尖端之间基本处于同一电势, 尖端中间电势变化不大, 此时由于纳米线尖端附近有着相同的电势, 尖端处于同一等势面, 纳米线尖端之间的整体形成了一个类空腔, 该空腔会具有屏蔽外电场的效应, 即场屏蔽效应<sup>[20]</sup>。

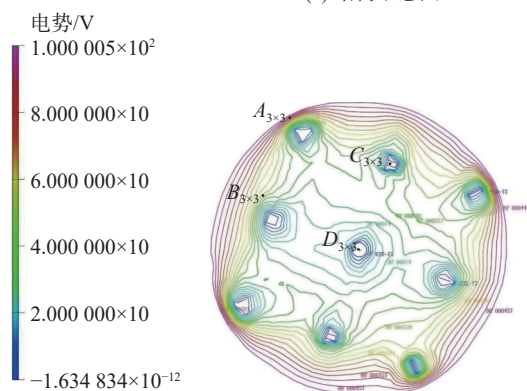
该实验以  $3 \times 3$  氧化锌纳米线阵列作为仿真基础结构, 其中相邻纳米线间距  $d_c=3$   $\mu\text{m}$ , 建立物理仿真模型如图 6(a) 所示。利用 OPERA-3D 仿真得到该结构的电势分布图, 如图 6(b) 所示, 其中不同颜色的等高线代表电势的高低, 从红色到蓝色表示电势从高到低(红色,  $V=100$  V; 蓝色,  $V=-1.63 \times 10^{-13}$  V)。由此可以看出在  $3 \times 3$  阵列中  $A_{3 \times 3}$  点所在位置的电势最高, 约为 95 V; 受场屏蔽效应的影响, 纳米线的边界处即  $B_{3 \times 3}$  点相比阵列中  $A_{3 \times 3}$  点的电势弱一些, 约为 50 V; 纳米线中央处  $C_{3 \times 3}$  点的电势线呈蓝色, 数值最小, 约为  $-1.63 \times 10^{-13}$  V; 所受到的场屏蔽效应最强的阵列中心处位置  $D_{3 \times 3}$  点处电势大小和  $C_{3 \times 3}$  点接近。

$3 \times 3$  氧化锌纳米线阵列的发射电流与纳米线间距关系如图 7 所示。仿真过程中以 100 nm 作为步长改变纳米线间距, 当纳米线间距较小时, 场致发射电流很小, 这是因为此时纳米线阵列间的场屏蔽效应严重; 而随着阵列间距的增大, 纳米线阵列间的场屏蔽效应减弱, 场致发射电流逐渐增

大。由此可以推测，当纳米线阵列间距继续增大时，可忽略场屏蔽效应，此时阵列总发射电流可以看成单根纳米线场发射电流的总和。



(a) 结构示意图



(b) 电势等高线分布图

图 6 3×3 氧化锌纳米线

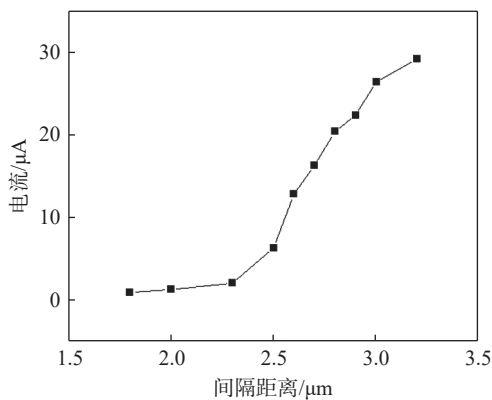
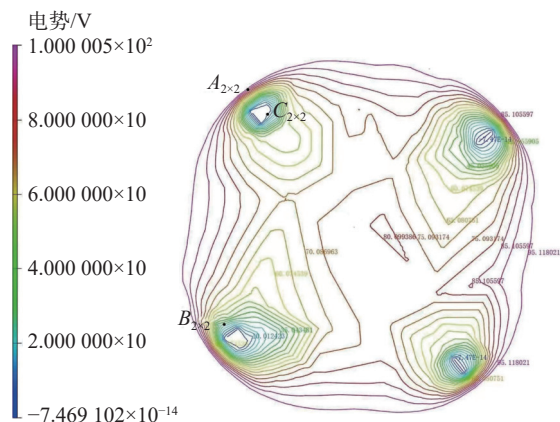
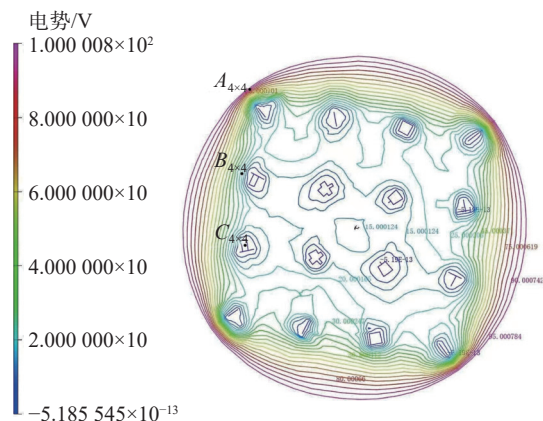


图 7 纳米线阵列间距对发射电流的影响

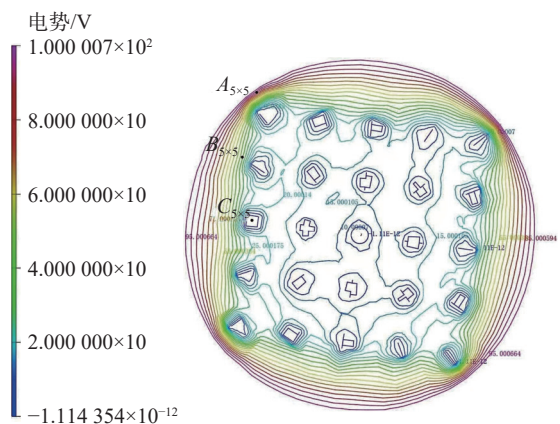
为进一步探讨纳米线阵列密度对发射性能的影响，增加纳米线数量，在基底面积为  $36 \mu\text{m}^2$  固定不变的情况下，分别仿真  $2 \times 2$  阵列、 $4 \times 4$  阵列和  $5 \times 5$  阵列下的电场分布和发射电流情况。不同阵列电位分布等高线如图 8 所示，其中  $A$  点表示等高线最外圈上的点， $B$  点表示纳米线边界的点， $C$  点表示纳米线中心处的点，每点的具体电势数值如表 1 所示。



(a)  $2 \times 2$  阵列



(b)  $4 \times 4$  阵列



(c)  $5 \times 5$  阵列

图 8 不同阵列电位分布等高线图

表 1  $2 \times 2$ 、 $4 \times 4$  和  $5 \times 5$  阵列不同位置的电势

纳米线阵列	A点电势/V	B点电势/V	C点电势/V
$2 \times 2$	95.11	60.07	$-7.47 \times 10^{-14}$
$4 \times 4$	95.01	45.02	$-5.19 \times 10^{-13}$
$5 \times 5$	95.01	30.01	$-1.11 \times 10^{-12}$

可以看出，所有阵列具有相同的电势分布规律。即阵列边界  $A$  点处的电势最高，纳米线中心

C点位置电势最低, 原因是该位置所受到的场屏蔽效应更大。其中 $5 \times 5$ 纳米线中心位置 $C_{5 \times 5}$ 处的电势约 $-1.11 \times 10^{-12}$  V, 远大于 $2 \times 2$ 阵列纳米线中心位置 $C_{2 \times 2}$ 处的 $-7.47 \times 10^{-14}$  V。

在基底面积固定不变的情况下,  $2 \times 2$ 、 $4 \times 4$ 、 $5 \times 5$ 纳米线阵列的发射电流如表2所示。研究发现,  $2 \times 2$ 米阵列的发射电流最小为 $1.86 \times 10^{-10}$  A,  $4 \times 4$ 纳米阵列的发射电流达到最大为 $5.13 \times 10^{-3}$  A, 这是由于纳米线之间的场屏蔽效应与发射面积同时作用的结果。当纳米阵列越密集时, 尽管其阵列密度增大, 但由于中心区域所受到的场屏蔽效应增强, 因此会出现发射电流随纳米阵列密度增大而减小的现象。

表2 不同纳米阵列下的发射电流表

纳米阵列	发射电流/A	纳米阵列	发射电流/A
$2 \times 2$	$1.86 \times 10^{-10}$	$4 \times 4$	$5.13 \times 10^{-3}$
$3 \times 3$	$5.67 \times 10^{-6}$	$5 \times 5$	$1.45 \times 10^{-4}$

#### 4 结束语

本实验采用 OPERA-3D 软件, 对氧化锌纳米线三极管场致发射进行了模拟仿真, 通过改变氧化锌纳米线的结构和电学参数, 研究影响纳米线场致发射的因素。实验表明, 纳米线的长径比和阴-栅距离是影响其场致发射性能的重要参数。同时为了降低纳米阵列场屏蔽效应的影响, 应合理控制纳米阵列密度。在长径比 22、栅-阴距离 0.2 mm 和基底面积固定不变的情况下,  $4 \times 4$  阵列下得到的场致发射效果较好, 发射电流最大。随着计算机仿真软件的持续发展, 本实验仍然有许多改进和提升的空间, 后续我们也将进一步完善调整实验内容, 同时更加注重实验的高阶性。

通过简单而直观的模拟过程和仿真结果, 学生可以深入掌握影响纳米线电子场致发射相关的因素以及纳米线电子场致发射的基本规律, 达到仿真指导实验的目的, 培养全面考虑多重影响因素的思维习惯, 为其今后的专业学习打下坚实的理论基础, 同时通过该实验的教学也增强了教学过程的多样性和生动性, 丰富教学资源, 有助于教学质量的提高。

#### 参考文献

[1] IJIMA S. Helical microtubules of graphitic carbon[J].

- Nature 1991, 354(6348): 56–58.
- [2] 陈军. ZnO 纳米线冷阴极制备及其应用研究[C]//第6届粤港澳真空科技创新发展论坛暨先进微纳制造技术与前沿应用高峰论坛. 广州: 广东省真空学会, 2022.
- [3] KLEIJIN S E F, YANSON A I, KOPER M T M. Electrochemical characterization of nano-sized gold electrodes fabricated by nano-lithography[J]. Journal of Electroanalytical Chemistry, 2012, 666: 19–24.
- [4] 王聪, 刘杰, 张晗. 基于二维纳米材料的超快脉冲激光器[J]. 物理学报, 2019, 68(18): 7–24.
- [5] 周燕倩, 陈小炜, 徐佳丽, 等. 新型纳米材料的研究进展及其应用[J]. 山西化工, 2022, 42(6): 23–25.
- [6] KIM Y, KIM S, JUNG H, et al. Plasmonic nano lithography with a high scan speed contact probe[J]. Optics Express, 2009, 17(22): 19476–19485.
- [7] LI Y, SUN Y, YEOW J T W. Nanotube field electron emission: Principles, development, and applications[J]. Nanotechnology, 2015, 26(24): 242001.
- [8] 井立国. 碳纳米管场致发射性质的模拟仿真[D]. 大连: 大连理工大学, 2017.
- [9] 张振华, 彭景翠, 张华, 等. 碳纳米管场致发射特性的研究[J]. 物理学进展, 2004, 24(3): 289–298.
- [10] LI H, FENG J J. Simulation study of field emitter arrays using Opera-3D[C]//2008 IEEE International Vacuum Electronics Conference. [S.l.]: IEEE Press, 2008.
- [11] 孙磊, 廖一鹏, 朱坤华, 等. ZnO 图形化阵列制备及其场致发射性能研究[J]. 光子学报, 2022, 51(5): 272–278.
- [12] 方斌. 水热法制备氧化锌纳米线场发射特性优化及集成微加工工艺研究[D]. 广州: 中山大学, 2010.
- [13] 岳小玲. ZnO 超细纳米线的合成及其光电性能研究[D]. 开封: 河南大学, 2013.
- [14] 刘晓轩, 孙飞扬, 吴颖, 等. 硅纳米线阵列光电探测器研究进展[J]. 物理学报, 2023, 72(6): 52–66.
- [15] 张铁军. 碳纳米管场致发射阵列的研制[D]. 成都: 电子科技大学, 2009.
- [16] STRATTON R. Field emission from semiconductors[J]. Proceedings of the Physical Society. Section B, 1955, 68(10): 746.
- [17] 王小菊, 查林宏, 祁康成, 等. 基于 Opera 的微焦点场发射电子枪仿真实验[J]. 实验技术与管理, 2019, 36(12): 98–101.
- [18] 林金堂. 四针状氧化锌/还原氧化石墨烯复合阴极的场致发射性能研究[J]. 光电子技术, 2019, 39(1): 16–20.
- [19] 高金海, 张武勤, 李楨, 等. 金刚石薄膜的形成及其场致发射特性研究[J]. 半导体光电, 2018, 39(6): 828–83.
- [20] 张晶园, 刘昌祎, 黄向东, 等. 纳米尖阵列屏蔽效应与发射面积耦合机理仿真[J]. 西安科技大学学报, 2021, 41(5): 912–920.