

二维、三维模型碳纳米管场发射场强计算的比较研究

张健华, 田昌会, 范琦, 莫卫东

(空军工程大学 理学院, 陕西 西安 710051)

摘要:在计算碳纳米管场发射显示器中电场强度时,为了提高计算效率,许多资料将三维空间的场发射简化为二维模型进行计算,为了比较分析使用二维模型和三维模型计算结果的差异,建立了二维模型单根碳纳米管、三维模型单根碳纳米管和单碳纳米管 3 个模型,应用 Ansoft Maxwell 有限元数值仿真软件进行了仿真,计算结果表明:二维碳纳米管场发射模型的仿真结果代表的三维空间实际情况为碳纳米管场发射,而不是真正的三维空间碳纳米管场发射。对于单根碳纳米管,用二维模型计算的碳纳米管尖端电场强度仅为三维空间碳纳米管尖端电场强度的 1/4。

关键词:碳纳米管;场发射;电场强度

DOI:10.3969/j.issn.1009-3516.2010.06.017

中图分类号: TN873 **文献标识码:** A **文章编号:** 1009-3516(2010)06-0080-05

碳纳米管(CNT)场发射显示器具有质量轻、厚度薄、亮度高、分辨率高、功耗小、响应速度快、耐严酷的高低温、抗振动冲击、电磁辐射极微、生产成本较低、易于实现数字化显示等优点,是一种具有广泛应用前景的显示器件^[1-5]。在碳纳米管场发射显示器中,电子发射主要取决于碳纳米管尖端的电场强度^[6-8],阴极发射电流密度的大小和阴极表面场强呈指数关系,阴极表面场强的微小变化将引起阴极发射电流密度的巨大变化,当场强相差 50% 时,相应的发射电流密度相差在两、三个数量级以上^[9]。由此看出,要精确计算阴极发射电流,就必须精确地计算阴极表面的电场强度。关于碳纳米管场发射显示器中电场强度的计算,目前主要应用有限元方法进行数值仿真,多数采用 Ansys, Ansoft Maxwell 软件。应用有限元方法计算电磁场的基本思想是以麦克斯韦微分方程为基础,采用有限元离散形式,将工程上的电磁场计算转变为庞大的矩阵求解,其计算工作量非常大。为了提高计算效率,许多资料在计算碳纳米管场发射显示器中电场强度时,将场发射模型简化为二维模型进行计算^[10-13],在教科书上也把二维电磁场计算作为主要的内容和最长的篇幅介绍^[14]。虽然用二维模型计算碳纳米管场发射显示器中的电场强度,通过比较可以给出许多重要的结论,但实际的碳纳米管场发射是一个空间问题,理应使用三维模型。本文通过比较分析,阐明二维、三维模型的差异。

1 二维模型的电场强度计算

考虑碳纳米管场发射显示器的实际情况及本文的计算目的,选用单根金属型碳纳米管作为计算对象,并对碳纳米管作出如下的设定:该材料为良导体,电导率选定为 7×10^5 S/m。碳纳米管的管身为高度 490 nm、宽度 20 nm 的长方形,端帽为半径 10 nm 的半圆形。碳纳米管总长 500 nm。将该碳纳米管置于场发射显示器极板间距为 1 000 nm 的阴、阳极之间,并与阴极板相连,极板材料选电导率为 61×10^6 S/m 的银,见图 1。

* 收稿日期:2010-05-11

基金项目:陕西省自然科学基金资助项目(2010JM8012)

作者简介:张健华(1986-),男,河南新蔡人,硕士生,主要从事碳纳米管场发射显示器研究;

E-mail: tchtyb001@163.com

田昌会(1963-),男,陕西合阳人,教授,主要从事碳纳米管场发射显示器研究。

不考虑空间电荷,在场发射显示器阴、阳极极板之间,电势满足拉普拉斯方程^[15] $\frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial y^2} = 0$, 电场强度 $E = -\frac{\partial V(x,y)}{\partial x}i - \frac{\partial V(x,y)}{\partial y}j$ 。求解碳纳米管场发射显示器的电场强度分布,其实质就是解一定边界条件下的拉普拉斯方程,随着计算机技术的发展,有限元方法逐渐成为解决此类问题的有效方法。有限元方法将空间离散和边界条件加载于单元节点上,计算得到节点值后,通过插值得到整个空间上的解,如果要求得到更高的计算精度可以将空间进一步细化^[16]。本文应用有限元方法软件 Ansoft Maxwell 12 计算,为了兼顾计算精度和计算速度,采用了非等间距网格划分形式,在电场强度大的地方网格划分较密,在电场强度小的地方网格划分较疏,见图 2。计算时,在阴、阳极板上所加电压为 400 V,所用边界条件为自然边界条件,也称纽曼边界条件。

为了分析极板边缘效应对计算结果的影响和达到在不影响计算结果的情况下尽量使用小的计算区域,对于二维模型,我们选用阴、阳极板长度为极板间距的 1 000、100 和 10 倍 3 个值分别进行了计算,3 个计算结果图非常相似,本文只给出二维极板长度为极板间距 10 倍的电场强度计算结果,见图 3。从计算结果看,这 3 种情况在碳纳米管轴线上(y 轴)的计算结果很接近,其碳纳米管尖端最大场强值分别为 $4.447 6 \times 10^9$ V/m, $4.446 9 \times 10^9$ V/m 和 $4.446 6 \times 10^9$ V/m。比较计算可以得出这 3 个值的相对误差小于 1%。因而可视为 3 个模型等同,即当极板长度为极板间距的 10 倍时就可忽略极板边缘效应对碳纳米管尖端场强的影响。因此,在以后的计算中,使用二维模型时,采用阴、阳极板长度为极板间距的 10 倍,使用三维模型时,采用阴、阳极板长、宽度为极板间距的 10 倍。采用极板长、宽度为极板间距的 10 倍的值对三维模型的计算会大大减少计算工作量,以便细划网格提高计算精度。

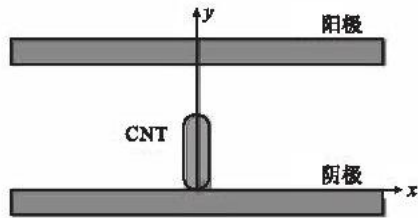


图 1 二维碳纳米管模型

Fig. 1 2D model of carbon nanotube

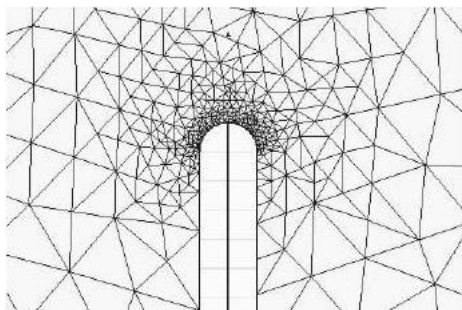


图 2 非等间距网格划分

Fig. 2 Varying distance mesh division

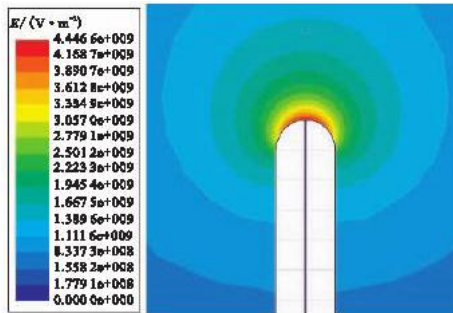


图 3 二维碳纳米管的电场强度分布

Fig. 3 The electric field intensity of 2D model carbon nanotube

2 三维模型的电场强度计算

为了方便与二维模型比较,在三维模型的计算中,碳纳米管、碳纳米墙、极板材料的电导率与二维模型完全相同,阴、阳极板上所加电压,边界条件也与二维模型相同,计算时也采用了非等间距网格划分形式,极板长、宽为极板间距的 10 倍。在三维空间,不考虑空间电荷,在场发射显示器阴、阳极极板之间,电势满足拉普拉斯方程^[15] $\frac{\partial^2 V(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V(x,y,z)}{\partial z^2} = 0$, 电场强度 $E = -\frac{\partial V(x,y,z)}{\partial x}i - \frac{\partial V(x,y,z)}{\partial y}j - \frac{\partial V(x,y,z)}{\partial z}k$ 。

我们建立了 2 个计算模型:一个为碳纳米墙场发射模型,碳纳米墙上部分为半径 10 nm 的半圆柱,与极板等长,轴心线与 x 轴平行,轴心线中点在 z 轴上;下部分为长方体,长度与极板等长,宽度为 20 nm,高度为 490 nm,长方体顶面与半圆柱底面相联接构成高为 500 nm 的碳纳米墙,并增建在 yoz 平面的场图查看路径平面^[14],见图 4。在场图查看路径平面上的计算结果见图 5;另一个模型为单个碳纳米管场发射模型,上部

分为半径 10 nm 的半球,球心点为(0,0,490);下部分为半径 10 nm、高 490 nm 的圆柱,圆心在坐标原点上,圆柱中轴线为 z 轴,圆柱顶面与半球底面相联接构成高为 500 nm 的碳纳米管,并增建在 yoz 平面的场图查看路径平面^[14]。见图 6。在场图查看路径平面上的计算结果见图 7。

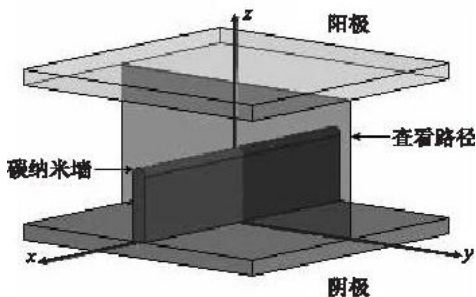


图 4 三维碳纳米墙模型

Fig. 4 3D model of carbon nano-wall

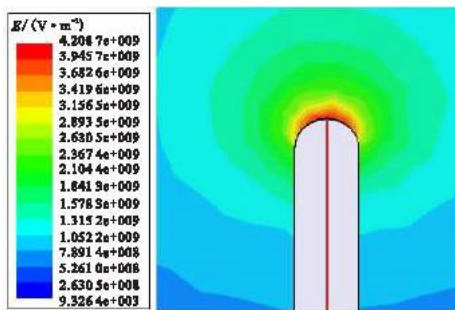


图 5 三维碳纳米墙的电场强度分布

Fig. 5 The electric field intensity of 3D model carbon nano-wall

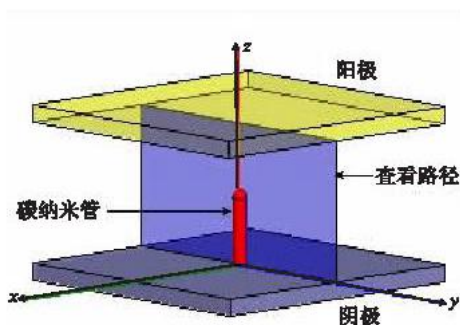


图 6 三维碳纳米管模型

Fig. 6 3D model of carbon nanotube

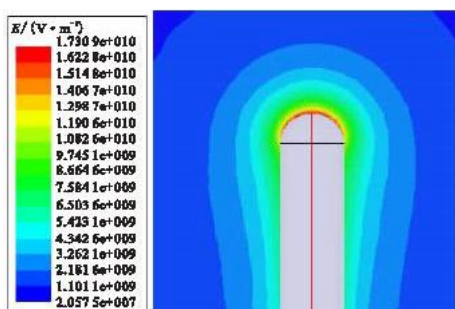


图 7 三维碳纳米管的电场强度分布

Fig. 7 The electric field intensity of 3D model carbon nanotube

3 仿真结果对比

比较二维、三维场发射 3 个模型的计算结果(图 3、图 5 和图 7),可以看出,二维模型的单根碳纳米管的计算结果与三维模型的碳纳米墙的计算结果非常接近,而与三维模型的单根碳纳米管的计算结果相差较大,为了给出量化结果,我们用场发射尖端最大电场强度作比较计算,二维单根碳纳米管场发射模型尖端最大场强值为 4.4466×10^9 V/m,三维碳纳米墙场发射模型尖端最大场强值为 4.2087×10^9 V/m,三维单根碳纳米管场发射模型尖端最大场强值为 1.7309×10^{10} V/m。计算可知二维单根碳纳米管场发射模型尖端最大场强与三维碳纳米墙场发射模型尖端最大场强的相对误差为 5.3%。三维单个碳纳米管场发射模型尖端最大场强值约为二维单根碳纳米管场发射模型尖端最大场强和三维碳纳米墙场发射模型尖端最大场强的 4 倍。考虑到有限元方法计算不可避免存在误差,可以认为二维单根碳纳米管场发射模型与三维碳纳米墙场发射模型是一致的,这也与我们起初对实际情况的想象分析相一致,一个平面只能是空间的一个截面,对于墙状结构沿垂直于墙面和垂直于极板面方向可以截出许多状态相同的面,计算一个面就可推广到整个空间,而对于圆柱形结构沿垂直于极板面方向在不同位置的截面状态时不可能相同。

4 结论

对上述计算结果的分析表明,二维碳纳米管场发射模型代表的三维空间场发射情况为碳纳米墙场发射,而不是真正的三维空间碳纳米管场发射。对于单根碳纳米管,用二维模型计算的碳纳米管尖端电场强度仅为实际碳纳米管尖端电场强度(三维模型的计算结果)的 1/4。

参考文献:

- [1] 田昌会,朱长纯,王琪琨,等. 真空度对碳纳米管场发射显示器的影响[J]. 空军工程大学学报:自然科学版, 2005, 6(5): 33-36.
TIAN Changhui, ZHU Changchun, WANG Qikun, et al. Effects of Vacuum Levels on Carbon Nanotube - Field Emission Display[J]. Journal of Air Force Engineering University: Natural Science Edition, 2005, 6(5): 33-36. (in Chinese)
- [2] 柏鑫,王鸣生,刘洋,等. 碳纳米管端口的场蒸发[J]. 物理学报, 2008, 57(7): 4596-4601.
BAI Xin, WANG Mingsheng, LIU Yang, et al. Field Evaporation of The End of A Carbon Nanotube[J]. Acta Physica Sinica, 2008, 57(7): 4596-4601. (in Chinese)
- [3] Zhang Y N, Lei W, Zhang X B, et al. Calculation of The Emission Performance of The Carbon Nanotube Array [J]. Applied Surface Science, 2005, 245(1-4): 400-406.
- [4] Tian C H, Zhu C C, Liu X H, et al. Observation on CNT - FED Under Various Vacuum levels and Calculation on Number of Electron - gas Collisions[J]. Displays, 2006, 27(4-5): 178-182.
- [5] 曹连振,蒋红,宋航,等. 热 CVD 法制备的碳纳米管阵列的场发射特性[J]. 液晶与显示, 2009, 24(1): 43-47.
CAO Lianzhen, JIANG Hong, SONG Hang, et al. Field Emission Characters of Patterned Carbon Nanotube Line Array Emitters Prepared by Thermal Chemical Vapor Deposition[J]. Chinese Journal of Liquid Crystals and Display, 2009, 24(1): 43-47. (in Chinese)
- [6] Wang X Q, Wang M, Ge H L, et al. Modeling and Simulation for the Field Emission of Carbon Nanotubes Array[J]. Physica E, 2005, 30(2005): 101-106.
- [7] Bao Qiaoliang, Zhang Han, Pan Chunxu. Simulation for Growth of Multi - walled Carbon Nanotubes in Electric field [J]. Computational Materials Science, 2007, 39(2007): 616-626.
- [8] Wang X Q, Wang M, Li Z H, et al. Modeling and Calculation of Field Emission Enhancement Factor for Carbon Nanotubes Array[J]. Ultramicroscopy, 2005, 102(2005): 181-187.
- [9] 秦少玲,屠彦,尹涵春. 场致发射尖端电场分布及其模拟误差研究[J]. 电子器件, 2004, 27(4): 564-567.
QIN Shaoling, TU Yan, YI Hanchun. Research on The Electric Field of The Emitter Tip and Its Simulation Error[J]. Chinese Journal of Electron Devices, 2004, 27(4): 564-567. (in Chinese)
- [10] 盛雷梅,魏洋,柳鹏,等. 碳纳米管冷阴极超高真空鞍场规的电场模拟与实验研究[J]. 真空, 2005, 42(4): 29-31.
SHENG Leimei, WEI Yang, LIU Peng, et al. Experimental Study and Electric Field Simulation of A UHV Saddle Field Gauge with A CNT Field Emitter[J]. Vacuum, 2005, 42(4): 29-31. (in Chinese)
- [11] 李玉魁,成胜利,刘兴辉,等. 碳纳米管阴极场致发射的电场数值模拟[J]. 辽宁大学学报:自然科学版, 2006, 33(2): 168-171.
LI Yukui, CHENG Shengli, LIU Xinghui, et al. Electrical Numerical Simulation of Field Emission for Carbon Nanotube Cathode[J]. Journal of Liaoning University: Natural Sciences Edition, 2006, 33(2): 168-171. (in Chinese)
- [12] 任华锋,田昌会,王斌科,等. 场发射显示器环境下不同置向碳纳米管的尖端电场强度计算[J]. 空军工程大学学报:自然科学版, 2007, 8(5): 67-69.
REN Huafeng, TIAN Changhui, WANG Binke, et al. Calculations of Electric Field to Different Setting Direction of Carbon Nanotubes Tip[J]. Journal of Air Force Engineering University: Natural Science Edition, 2007, 8(5): 67-69. (in Chinese)
- [13] 尉伟,王勇,周洪军,等. 场发射结构的有限元模拟[J]. 真空电子技术, 2003, 27(1): 27-29.
WEI Wei, WANG Yong, ZHOU Hongjun, et al. The Finite Element Simulation of Structure of Field Emitter Array [J]. Vacuum Electronic, 2003, 27(1): 27-29. (in Chinese)
- [14] 赵博,张洪亮. Asoft 12 在工程电磁场中的应用[M]. 北京:中国水利电出版社, 2010.
ZHAO Bo, ZHANG Hongliang. The Use of Asoft 12 for Project Electromagnetic [M]. Beijing: China Water Conservancy and Hydroelectricity Press, 2010. (in Chinese)
- [15] 程建春. 数学物理方程及其近似方法[M]. 北京:科学出版社, 2006.
CHENG Jianchun. Equations of Mathematical Physics and Its Approximate Methods [M]. Beijing: Science Press, 2006. (in Chinese)
- [16] 谢滨,陈波. 基于有限元参数化设计的碳纳米管的场致增强因子计算[J]. 发光学报, 2004, 25(4): 446-449.
XIE Bin, CHEN Bo. Calculation of CNT's Electric Field Enhancement Factor Based on Finite Element Method [J]. Chinese Journal of Luminescence, 2004, 25(4): 446-449. (in Chinese)

Comparison of 2D and 3D Model for Calculations of Electric – field Intensity

ZHANG Jian – Hua, TIAN Chang – hui, FAN Qi, MO Wei – dong

(Science Institute, Air Force Engineering University , Xi'an 710051, China)

Abstract: The electron emission of a carbon nanotube – field emission display mainly depends on the electric field intensity of carbon nanotubes tip. So the accurate calculation of the electric field intensity of carbon nanotubes tip is very important for the development of carbon nanotube – field emission display. In calculating the electric field intensity in a carbon nanotube – field emission display, the field emission model of carbon nanotubes cathode have been simplified as 2D model in many reports for increasing the computation efficiency. To compare and analyze the differences between the calculated results obtained by using 2D and 3D models, single carbon nanotube 2D model, single carbon nanotube and single carbon nano – wall 3D models are constructed respectively, and the finite element simulation software Ansoft Maxwell is used. The calculated results indicate that 2D model field emission of carbon nanotubes cathode expresses the actual field emission of carbon nano – wall cathode, not the actual field emission of carbon nanotubes cathode. The electric field intensity of single carbon nanotube tip calculated by 2D model is only about 1/4 of actual electric field intensity of 3D carbon nanotube tip.

Key words: carbon nanotube; field emission; electric field intensity

(上接第 59 页)

An Image Segmentation Method Based on Improved Watershed Algorithm

ZHANG Xiao – yan, LIU Zhen – xia, ZHU Zi – jian

(Telecommunication Engineering Institute, Air Force Engineering University, Xi'an 710077, China)

Abstract: To overcome the shortcomings such as the existence of over – segmentation in and the great influence of noise on the traditional watershed segmentation, an improved novel watershed image segmentation method is proposed. Firstly, the open – close reconstruction filter is adopted to remove the image noise. Secondly, multi – scale structure elements are used to calculate morphological gradient which can overcome the shortcomings of other conventional gradient operators and produce a gradient map suitable for watershed segmentation. Furthermore, the morphological gradient is modified by viscous morphological operators to remove the most irregular local minimums. After the standard watershed transforming, the region merging method based on neighbor regions edge value is employed to improve the segmentation result. Experiments show that this method can not only effectively remove the noise but also avoid the over – segmentation of watershed and preserve the positions of regional contours.

Key words: watershed; open – close reconstruction filter; gradient modification; viscous morphological operation