

แบบจำลองสำหรับการแผ่นนามจากท่อนาโนคาร์บอน



นายกมล ตันธนะศิริวงศ์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2548

ISBN 974-17-3867-6

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

199468099

2 ต. 11.ค. 2550

A MODEL FOR FIELD EMISSION FROM CARBON NANOTUBES



Mr. Kamol Tantasiriwong

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science Program in Physics

Department of Physics

Faculty of Science

Chulalongkorn University

Academic year 2005

ISBN 974-17-3867-6

Thesis Title A MODEL FOR FIELD EMISSION FROM CARBON NAN-
 OTUBES
By Mr. Kamol Tantanasiriwong
Field of Study Physics
Thesis Advisor Associate Professor Wichit Sritrakool, Ph.D.

Accepted by the Faculty of Science, Chulalongkorn University in Partial
Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree

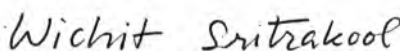


..... Dean of the Faculty of Science
(Professor Piamsak Menasveta, Ph.D.)

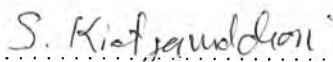
THESIS COMMITTEE



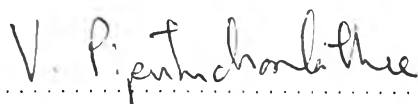
..... Chairman
(Assistant Professor Pisistha Ratanavararak, Ph.D.)



..... Thesis Advisor
(Associate Professor Wichit Sritrakool, Ph.D.)



..... Member
(Somchai Kieatgamolchai, Ph.D.)



..... Member
(Varagorn Piputnchonlathee, Ph.D.)

นายกมล ตันธนะศิริวงศ์: แบบจำลองสำหรับการแผ่สนามจากท่อนาโนคาร์บอน (A MODEL FOR FIELD EMISSION FROM CARBON NANOTUBES) อ. ที่ปรึกษา: รศ. ดร.วิจิต ศรีตระกูล, 38 หน้า. ISBN 974-17-3867-6.

เราได้สร้างแบบจำลองการปลดปล่อยอิเล็กตรอนที่อุณหภูมิห้องของท่อนาโนคาร์บอนตามงานของลิวและคณะ (2003) ที่บริเวณปลายของท่อนาโนคาร์บอนเราได้ใช้แบบจำลองสนามศักย์เป็นสามเหลี่ยมโดยที่ความชันของสนามศักย์นี้แปรผันตามสนามไฟฟ้าที่จ่ายมาจากภายนอก ค่าความน่าจะเป็นของการทันเนลหาจากสมการของฟาร์เลอร์ และ นอร์ดเฮม และ การกระจายตัวของแถบพลังงานภายในของท่อนาโนคาร์บอน ทำให้เราสามารถหาค่าความสัมพันธ์ระหว่างกระแสเนื่องจากการทันเนลของอิเล็กตรอน ที่ปลายของท่อนาโนคาร์บอนกับสนามศักย์ภายนอกที่เราจ่ายเข้าระบบ ที่ท่อนาโนคาร์บอนแบบม้วน ขนาดต่างๆ ตั้งแต่ (5,5), (10,10), (15,15) และ (20,20) ซึ่งมีค่าช่องว่างพลังงานเป็นศูนย์ที่ค่าของฟังก์ชันคลื่นตามแนวขวางของท่อนาโนเฉพาะค่าที่สอดคล้องกับค่าเงื่อนไขขอบเขตตามแนวขวางของท่อนาโนคาร์บอน เราได้ทำการคำนวณการกระจายตัวของพลังงานของอิเล็กตรอนที่สถานะต่างๆของท่อนาโนคาร์บอน รวมไปถึงการเปรียบเทียบเส้นโค้งความสัมพันธ์ของกระแสที่เกิดจากการทันเนลของอิเล็กตรอนที่แปรตามสนามศักย์ภายนอก กับการผลการทดลองด้วย

ภาควิชาฟิสิกส์.....
สาขาวิชาฟิสิกส์.....
ปีการศึกษา2548.....

ลายมือชื่อนิติ..... นศ. ตันธนะศิริวงศ์.....
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา..... วิจิต ศรีตระกูล.....

4572203523 : MAJOR PHYSICS

KEY WORDS: CARBON NANOTUBES/ FIELD EMISSION/ DISPERSION
RELATION/ TUNNELING THEORY

KAMOL TANTANASIRIWONG: A MODEL FOR FIELD EMISSION
FROM CARBON NANOTUBES. THESIS ADVISOR: ASSOC. PROF.
WICHIT SRITRAKOOL, PH.D., 38 pp. ISBN 974-17-3867-6.

We model the field emission of a single walled carbon nanotube as that of Liu et al(2003). A triangle-shaped potential energy barrier is assumed at the interface between the nanotip of the nanotube and vacuum. The tunneling probability is determined using the Fowler-Nordheim expression and the energy band of the single-walled carbon nanotube. The current-voltage or I-V characteristic curves of several typical armchairs carbon nanotubes, (5,5), (10,10), (15,15) and (20,20), with zero energy gap at some specific transverse wave vectors are calculated. The carbon nanotube dispersion relation will be reviewed and the calculated IV curves are compared with experiments.

DepartmentPhysics.....

Field of studyPhysics.....

Academic year2005.....

Student's signature

Advisor's signature

Kamol Tantanasiriwong

Wichit Sritrakool

Acknowledgements

I would like to express my sincere thanks and deep appreciation to my advisor, Associate Professor Dr. Wichit Sritrakool for his excellent instructions, critical comments, guidance, suggestions and support throughout this thesis. Special thanks also are extended to Assistant Professor Dr. Pisistha Ratanavararak, Dr. Somchai Kiatgamolchai and Dr. Varagorn Piputnchonlathee for being my thesis committee and for valuable comments.

Sincere thanks are extended to Miss Yuko Hamaguchi for her encouragement, and all friends in the Department of Physics for their suggestions, very kind assistance and friendship.

Finally, the greatest gratitude is expressed to my mother and my family for their love and understanding.

Table of Contents

| | page |
|--|------|
| Abstract (Thai) | iv |
| Abstract (English)..... | v |
| Acknowledgements | vi |
| List of Figures..... | x |
| List of Symbols..... | xiii |
| Chapter | |
| 1 Introduction..... | 1 |
| 2 Electronic structure of carbon nanotubes | 4 |
| 2.1 Electronic band structure of graphite | 4 |
| 2.2 Carbon nanotube physics | 7 |
| 3 Electron field emission..... | 12 |
| 3.1 Cold emission: Fowler-Nordheim equation | 12 |
| 3.2 Electron field emission of carbon nanotube | 15 |
| 4 Electron field emission of carbon nanotube..... | 17 |
| 4.1 Circumferential boundary condition of armchair carbon nanotube .. | 17 |
| 4.2 The characteristic of field emission current versus energy band of nanotube | 19 |

| Chapter | page |
|--|-----------|
| 4.3 Nanotip local electric field concentration | 20 |
| 4.4 Numerical calculation for electron field emission characteristic of armchair carbon nanotube | 21 |
| 4.5 Fermi-Dirac distribution function along the k value of carbon nanotube | 22 |
| 4.6 Calculation result of I-V characteristic of armchair carbon nanotube. | 23 |
| 4.7 Conclusion and further suggestion | 23 |
| References | 25 |
| Appendices | 27 |
| Appendix A Electron velocity | 28 |
| Appendix B Effective mass | 31 |
| Appendix C Mathematica program for electron field emission of armchair carbon nanotube | 34 |
| C.1 Parameters for carbon nanotube field emission | 34 |
| C.2 Carbon nanotube field emission program | 35 |
| Vitae | 38 |

List of Figures

| Figure | page |
|---|------|
| 1.1 SEM image of a carbon fiber field emitter[2]. | 1 |
| 1.2 Field emission carbon nanotube device. | 2 |
| 1.3 Schematic view of field emission carbon nanotube device. | 3 |
| 2.1 (a) The unit cell and (b) Brillouin zone of two dimensional graphite are shown as the dotted rhombus and the shaded hexagon, respectively. \vec{a}_i , and \vec{b}_i , ($i=1,2$) are unit vectors and reciprocal lattice vectors, respectively. | 5 |
| 2.2 The unrolled honeycomb lattice of a nanotube is shown. OA and OB define the chiral vector \vec{C}_h and the translational vector \vec{T} of a nanotube, respectively. The rectangle OAB'B defines a unit cell for the nanotube. The vector \vec{R} denotes a symmetry vector. This figure corresponds to $\vec{C}_h = (4, 2)$, $d = d_R = 2$, $\vec{T} = (4, -5)$, $N = 28$, $\vec{R} = (1, -1)$ | 9 |
| 2.3 The Brillouin zone of a carbon nanotube is represented by the line segment $W\bar{W}'$ which is parallel to \vec{K}_2 . The vectors \vec{K}_1 and \vec{K}_2 are reciprocal lattice vectors corresponding to \vec{C}_h and \vec{T} , respectively. The figure corresponds to $\vec{C}_h = (4, 2)$, $\vec{T} = (4, -5)$, $N = 28$, $\vec{K}_1 = (5\vec{b}_1 + 4\vec{b}_2)/28$, $\vec{K}_2 = (2\vec{b}_1 - 4\vec{b}_2)/28$ | 10 |
| 3.1 Sommerfeld model for energy distribution of electrons in a metal. | 12 |
| 3.2 Potential configuration for the phenomenon of cold emission due to external applied electric field inducing the potential barrier slope change which gives the possibility of electron tunneling at the right end of metal as shown for any electron energy E in the conduction band. | 13 |

| Figure | page |
|---|-------------|
| 4.1 Energy dispersion relation of armchair carbon nanotube (5,5) along the longitudinal wave vector k | 18 |
| 4.2 Potential barrier using the parameter $F = 5V/\mu m$ and plotted along the longitudinal axis of nanotube from location -20 nm to 5 nm | 20 |
| 4.3 Electrons group velocity of armchair carbon nanotube (5,5) at $q=5$ in the unit of m/s. | 21 |
| 4.4 I-V characteristic of armchair Carbon nanotube (5,5), (10,10), (15,15), and (20,20) by using effective mass= $0.06 m_e$ | 23 |
| A.1 Typical variation of group velocity v_g and effective mass m^* as a function of k | 29 |
| C.1 Input and output of the program fkr, CNT field. | 36 |
| C.2 Limit of integration program fkr source code. | 37 |
| C.3 Program CNTFieldEmission source code. | 38 |

List of Symbols

| | |
|------------------------|--|
| a | length of real space unit vectors of graphite lattice |
| \vec{a}_1, \vec{a}_2 | real space unit vectors of graphite lattice |
| \vec{b}_1, \vec{b}_2 | reciprocal lattice basis vectors of graphite brillouin zone |
| H | Hamiltonian coupling parameter of carbon |
| H_{ss} | Hamiltonian coupling parameter of 2s orbital of carbon |
| H_{sp} | Hamiltonian coupling parameter of 2s and 2p orbitals of carbon |
| H_σ | Hamiltonian coupling parameter of σ bond for carbon molecule |
| H_π | Hamiltonian coupling parameter of π bond for carbon |
| t | Hamiltonian coupling parameter of π bond for carbon |
| s | overlap integral between the nearest neighbor atoms of carbon material |
| $E_{g2D}(\vec{k})$ | energy dispersion relation of two dimensional graphite |
| ε_{2p} | orbital energy of the 2p level of carbon |
| ε_{2s} | orbital energy of the 2s level of carbon |
| $w(\vec{k})$ | crystal geometry function of \vec{k} graphite |
| \vec{C}_h | Chiral vector carbon nanotube |
| (n, m) | parameters of chiral vector of carbon nanotube |
| d_t | diameter of carbon nanotube |
| L | circumferential perimeter length of carbon nanotube |
| θ | chiral angle of carbon nanotube 30° for armchair carbon nanotube (n,n) |
| \vec{T} | translational vector |
| (t_1, t_2) | parameters of translational vector \vec{T} |

| | |
|----------------|---|
| N | number of hexagons per unit cell of carbon nanotube |
| d | greatest common divisor of $(2m+n)$ and $(2n+m)$ |
| d_i | d if $n-m$ is not a multiple of $3d$ or $3d$ if $n-m$ is a multiple of $3d$ |
| \vec{K}_1 | unit vector in the circumferential direction of carbon nanotube in reciprocal space |
| \vec{K}_2 | unit vector in the longitudinal direction of carbon nanotube in reciprocal space |
| $E_\mu(k)$ | one dimensional energy dispersion relation of carbon nanotube |
| $E_q^a(k)$ | one dimensional energy dispersion relation of armchair carbon nanotube |
| x | distance along the longitudinal direction of emitted material |
| $V(x)$ | one dimensional potential barrier outside at carbon nanotip |
| Φ | work function of carbon nanotube |
| E_F | Fermi energy |
| T | Transmission coefficient |
| dN | The number of electrons for both spins in each infinitesimal degenerate energy band distribution dE |
| $f(E)$ | Fermi-Dirac distribution function |
| I | current from tunneling electron emitted from carbon nanotip |
| h | Planck's constant |
| \hbar | $h/2\pi$ |
| $k_{x,q}$ | transverse wave vector of armchair carbon nanotube at allowed q |
| q | positive integer representation of allowable transverse wave vector parameter |
| $D(F, E_q(k))$ | Transmission coefficient of carbon nanotube |
| F | applied local electric field at carbon nanotip |