

微尖场致发射三极管的 FDM-NOCCS 算法模拟

汪 琛 尹涵春 王保平 童林凤

(东南大学电子学研究所 南京 210096)

摘要 本文将非正交曲线坐标系下的有限差分算法和四阶龙格-库塔法结合起来研究了微尖场致发射三极管的静电特性。计算模型中的阴极为塔形(Tower)结构。本文给出了尖端场强与几何结构的关系曲线、电子轨迹图以及阳极电流密度分布。

EEACC: 2320, 5110, 0290P, 2310

1 引言

在真空微电子器件的发展和应用中,静电分析以及发射特性的研究是一个很重要的方面。在静电场的求解中,常用的方法有边界元素法,有限差分法,有限元素法等^[1~3]。由于在场致发射体的数值计算模型中,微尖的尺寸与整体尺寸往往相差数千倍,因此如果采用传统的有限差分法求解,在计算精度和存储空间之间必然存在不可调和的矛盾,而且边界条件的处理也很复杂。本文首次将非正交曲线坐标系下的有限差分算法(FDM-NOCCS, Finite-Difference Method in Non-Orthogonal Curvilinear Coordinate System)引入到场致发射三极管的数值模拟中。这种方法由域变换技术和有限差分技术相结合而成,兼有有限差分法和有限元素法的优点,数值网格与边界吻合一致,程序编写比较简单,而且还可以方便地在感兴趣的地方加密网格^[4~6]。我们根据 Yee 提出的电磁场自治离散网格^[7],导出了非正交曲线坐标系下二维泊松方程的数值求解公式,并利用基于 FDM-NOCCS 算法和四阶龙格-库塔法开发的二维程序,对塔形微尖场致发射体^[8,9]进行了静电分析,得出了尖端场强与几何结构的关系曲线、电子轨迹和阳极电流密度分布,并对器件的制备提出了一些设计原则。

2 计算方法

利用 FDM-NOCCS 计算静电场包括两步。首先,采用坐标变换技术形成边界吻合的曲

汪 琛 女,1972 年生,博士生,主要研究方向为电子光学及场致发射器件的数值模拟

尹涵春 女,1946 年生,副教授,研究领域为电子光学 CAD 及全息图象处理

王保平 男,1961 年生,副教授,主要研究方向真空微电子学及平板显示器件

1996 年 7 月 11 日收到初稿,1997 年 1 月 28 日收到修改稿

线坐标系统,其基本方法是:令某曲线坐标面(二维时为坐标线)与某部分边界相吻合,而其它曲线坐标则沿这部分边界单调变化.在限定了边界处的曲线坐标值后,就可以由这些边界值来确定域内点的曲线坐标值.这样,对于正交坐标系(x^1, x^2, x^3)中任何不规则的几何结构,都可变换为某一曲线坐标系(u^1, u^2, u^3)下具有规则形状的结构,如图 1 所示.具体方法及细节可以参见文献[4].

第二步是在曲线坐标系下求解泊松方程.在任意的曲线坐标系中有两套基矢,即由曲线坐标轴的切向矢量构成的一组协变基矢 $\mathbf{a}_i, i=1,2,3$ 和由坐标面的法向矢量形成的一组逆变基矢 $\mathbf{a}^i, i=1,2,3$,如图 2 所示.

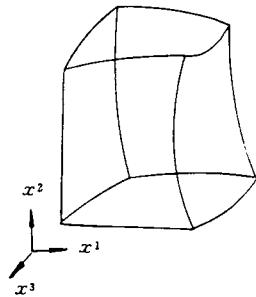


图 1 三维域变换过程

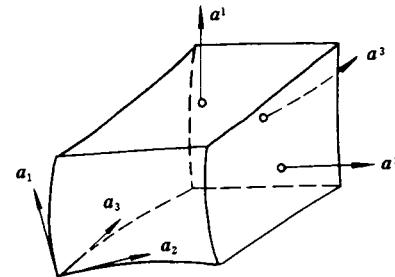


图 2 协变和逆变基矢的相对位置

这两组基矢的定义式分别为

$$\mathbf{a}_i = r_u, i = 1, 2, 3, \quad \mathbf{a}^i = \nabla u^i, i = 1, 2, 3 \quad (1)$$

通过矢量运算可知,协变基矢和逆变基矢之间具有以下关系式

$$\mathbf{a}^i = \frac{1}{\sqrt{g}} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k; \quad \mathbf{a}_i = \frac{1}{\sqrt{g}} \mathbf{a}^j \times \mathbf{a}^k; \quad \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}^j = \delta_{ij} \quad (2)$$

式中 $i=1,2,3$; 角标 (i,j,k) 具有循环关系; $\sqrt{g} = \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3$ 为 Jacobian 变换式.由此我们可以得出拉普拉斯算子的表达式,对标量电位 φ

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i=1}^3 \sum_{l=1}^3 [\mathbf{a}^i \cdot (\sqrt{g} \mathbf{a}^l \varphi_u)]_{u^i} = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i=1}^3 \sum_{l=1}^3 [\sqrt{g} g^{il} \varphi_u]_{u^i} \quad (3)$$

式中 $g^{il} = \mathbf{a}^i \cdot \mathbf{a}^l$ 是逆变度量张量的分量.在二维情况下,设 x_3 为正交坐标系下物理量保持不变的方向,并取 \mathbf{a}_3 与 x_3 重合,则

$$g^{13} = 0, \quad g^{23} = 0, \quad \varphi_u^3 = 0 \quad (4)$$

由式(3)、(4)可得曲线坐标系下泊松方程的表达式

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i=1}^2 \sum_{l=1}^2 [\sqrt{g} g^{il} \varphi_u]_{u^i} = -\rho/\epsilon \quad (5)$$

式中 ρ 为空间电荷体密度; ϵ 为介电常数.

根据 Yee 提出的电磁场自治离散网格,我们可以得出如图 3 所示的二维静电场离散网格.利用各节点上的电位值进行中心差分来近似式中的各个一阶偏导数值,即

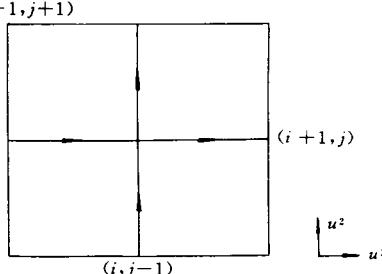


图 3 二维计算域中的静电场离散网格

$$\begin{cases} \varphi_{i+1}^1 = \varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j} \\ \varphi_i^2 = \varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j} \end{cases} \quad (6)$$

可得曲线坐标系下泊松方程的离散表达式。再辅之以一定的边界条件，就可以对静电问题进行求解。

3 计算结果与分析

我们利用基于 FDM-NOCCS 算法和四阶龙格-库塔法开发的二维程序，对塔形微尖场致发射三极管进行了静电分析，计算模型如图 4 所示，其中 R_g 为栅半径， R_b 为柱体半径， R_t 为发射体尖端的曲率半径（由于尺寸关系未在图中标出）， d_{ga} 为栅极与阳极之间的距离， d_{gb} 为栅极与基底之间的距离， h_b 为发射体高度， d_g 为栅极厚度。

基本结构参数取值如下： $R_g = 300\text{nm}$ ， $R_b = 50\text{nm}$ ， $R_t = 2.5\text{nm}$ ， $d_{ga} = 3.385\mu\text{m}$ ， $d_{gb} = 0.615\mu\text{m}$ ， $h_b = 0.615\mu\text{m}$ ， $d_g = 0.2\mu\text{m}$ 。考虑到实际结构的轴对称性，计算区域仅取图 4 所示的一半；同时为了引入阵列中发射体间的相互影响，计算单元的左右边界均采用镜象边界条件^[10]

$$E_r = 0 \quad (7)$$

计算中以阴极为电位零点，栅极和阳极上所加的电压分别为 60V、200V，空间电荷效应则忽略不计。

对 $4\mu\text{m} \times 4\mu\text{m}$ 大小的整个计算域，通过适当地选取边界处曲线坐标的分布并辅之以吸引函数，我们可以方便地在微尖处加密网格。当域内数值网格数目为近一万时，微尖处网格的尺度就可以达到 0.1nm 的数量级。同时因为由数值方法生成的离散网格与边界完全重合，所以边界条件可得以精确的再现，这样既克服了有限差分法处理复杂形状边界能力弱的缺点，又省去了有限元素法繁琐的预处理过程。如果最大相对误差取为 10^{-6} ，整个程序在 486DX/33 上仅需运行大约半个小时就可收敛。部分计算结果如图 5~7 所示，与文献[8]中已有的结果相近，这说明本文所述的方法精度较高，适用于 Spindt 型场致发射体的模拟计算。

由这些关系曲线我们可以看出尖端场强 E_t 对尖端曲率半径 R_t 的变化最敏感，这也证明了发射体阵列的均匀性对器件的性能影响较大；而随着柱体半径 R_b 的增大，尖端场强降低的幅度最小，因此在三极管及其它器件的制备中，我们可以将阴极柱体做得比较粗以改善其导热性能。

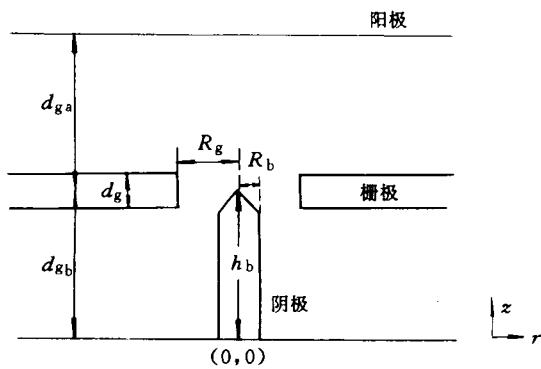


图 4 塔形微尖发射体计算模型

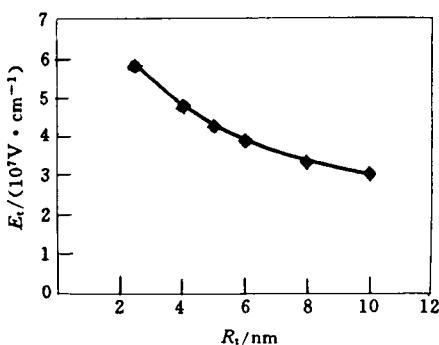


图 5 尖端场强与微尖曲率半径的关系

半径 R_b 的增大，尖端场强降低的幅度最小，因此在三极管及其它器件的制备中，我们可以将阴极柱体做得比较粗以改善其导热性能。

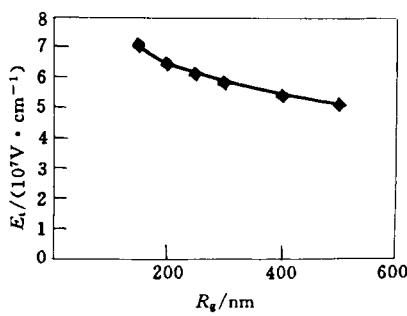


图 6 尖端场强与栅孔半径的关系

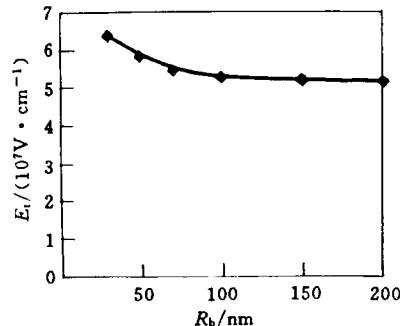


图 7 尖端场强与柱体半径的关系

利用四阶龙格-库塔方法对电子运动方程作数值积分就可以求得电子轨迹,如图 8 所示。由图可见从阴极出射的电子束在向阳极运动过程中呈发散状,因此在微尖场致发射体的实际应用中,应该加上合适的聚焦极。

为了研究实际微尖场致发射阵列中电子束的特性,将阳极与阴极间的距离拉大至 200 μm,阳极电压取为 2000V,而其它参数不变。每一条轨迹所对应的电流密度由 Fowler-Nordheim(FN)公式决定

$$J(E) = \{AE^2/[\alpha^2(y)]\}\exp[-B\varphi^{3/2}v(y)/E] \quad (8)$$

式中 $A = 1.54 \times 10^{-6}$, $B = 6.87 \times 10^7$, $t^2(y) \approx 1.1$, $v(y) = 0.966 - y^2$, $y = 3.79 \times 10^{-4}E^{1/2}/\varphi$, E 为垂直于发射表面的电场强度, φ 是表面功函数,计算中取为 4.2 电子伏特。以轴心处最大电流密度为归一化常数,我们可以得出的阳极处相对电流密度沿径向的分布,结果如图 9 所示。

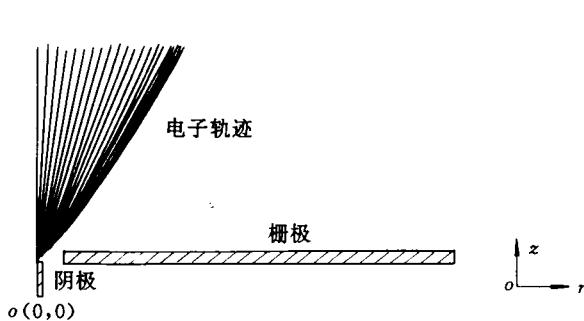


图 8 电子轨迹示意图

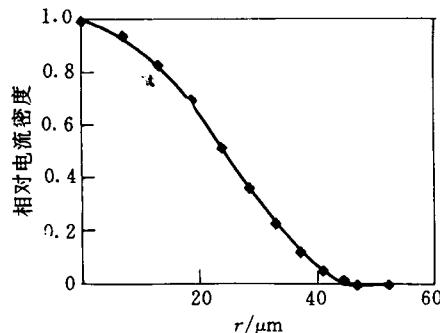


图 9 阳极表面相对电流密度沿径向的分布

4 结语

本文将非正交曲线坐标系下的有限差分算法(FDM-NOCCS)和四阶龙格-库塔法结合起来研究了微尖场致发射阴极的发射特性。通过对塔形阴极三极管的计算可见,FDM-NOCCS 算法具有数值网格与边界吻合的特点,只要较少的离散网格就可以达到较高的精度,是场致发射体数值模拟中一种有效而方便的方法,具有一定的实用价值。

参 考 文 献

- [1] G. Z. Ernest, IEEE Transaction on Electron Devices, 1993, **40**(5): 1009~1016.
- [2] Z. Cui and L. Tong, IEEE Transaction on Electron Devices, 1993, **40**(3): 448~452.
- [3] R. L. Hartman, W. A. Mackie and P. R. Davis, Journal of Vacuum Science and Technology, 1994, **B12**(2): 754~758.
- [4] J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi and C. W. Mastin, Numerical Grid Generation: Foundations and Applications, New York: Elsevier Science Publishing Co. Inc., 1985.
- [5] Kazuyoshi Miki and Toshiyuki Tarkagi, Journal of Computational Physics, 1986, **67**(2): 263~278.
- [6] J. A. 斯特莱顿, 电磁理论, 北京: 科学出版社, 1992, 27~42.
- [7] K. S. Yee, IEEE Transaction on Antennas Propagat., 1966, AP-**14**(3): 302~307.
- [8] Keisuke Koga, Kiyoshi Morimoto and Yoshikazu Hori, New Structure Si Field Emitter Arrays with Low Operation Voltage, International Electron Devices Meeting, San Francisco CA, 1994, 23~26.
- [9] Yoshikazu Hori, Keisuke Koga, Kazuyuki Sakiyama, Tower Structure Si Field Emitter Arrays with Large Emission Current, International Electron Devices Meeting, Washington DC, 1995, 393~396.
- [10] D. Hong, M. Aslan, M. Feldmann *et al.*, Journal of Vacuum Science and Technology, 1994, **B12**(2): 764~769.

Usage of FDM-NOCCS in Simulation of Microtip Field Emission Triode

Wang Chen, Yin Hanchun, Wang Baoping and Tong Linsu

(Southeast University, Institute of Electronics, Nanjing 210096)

Received 11 July 1996, revised manuscript received 28 January 1997

Abstract The emission characteristics of point-type field emitters are discussed numerically by using a combination of Finite-Difference Method in Non-Orthogonal Curvilinear Coordinate System (FDM-NOCCS) and Fourth-order Runge-Kutta method. Results are presented for the triode model with “Tower” structure emitter. The dependence of the electric field intensity at top on geometry structure, the sketch of the electron trajectories and the current density distribution at the anode are shown.

EEACC: 2320, 5110, 0290P, 2310