

# 氧化物中固定电荷对硅场致发射的影响\*

黄庆安

(东南大学微电子中心 南京 210096)

**摘要** 本文给出了硅表面覆盖氧化层时,场发射电流的解析公式。考虑了固定氧化物电荷时场致发射的影响。结果表明,氧化物和固定电荷均使场发射电流减小,场发射 Fowler-Nordheim 图中有两个明显的线性区。

EEACC: 2320, 2340E, 2550G

## 1 引言

真空微电子学在微波器件和平板显示等领域有极好的应用前景,已受到国内外广泛的重视<sup>[1,2]</sup>。而场发射阴极(冷阴极)的制备及性能研究是真空微电子学的关键问题之一,也是近年来真空微电子学领域的主要研究内容。由于硅材料成本的低廉,加工技术先进且成熟,如能成功的做为冷阴极,其前途是不言而喻的。因此,人们对硅场发射进行了深入研究,实验发现<sup>[3~5]</sup>: (a) 硅场发射电流比 Fowler-Nordheim(FN)理论预言的小得多; (b) 发射电流-电场的 FN 图明显偏离线性。为解释这些实验现象,已有较多的理论研究: 考虑表面态发射<sup>[6]</sup>、直接从表面量子阱发射<sup>[7]</sup>、从体内穿越量子阱的发射<sup>[8]</sup>或阴极非平面发射<sup>[9]</sup>都只能部分解释硅场发射 FN 图的非线性。

由于在硅阴极制备过程中,表面极易形成自然氧化层( $1\sim 4\text{nm}$ ); 因此,理论上对硅表面存在薄氧化层的情况进行了研究。采用 Si/SiO<sub>2</sub>两带模型<sup>[10]</sup>、WKB 近似下的数值计算<sup>[11]</sup>和基于 Airy 函数的量子阱发射<sup>[12]</sup>都表明氧化层确使发射电流减小,并使 FN 图出现非线性。但这些理论是数值方法,而且假定氧化物中没有电荷,即理想氧化层。而实际上,无论 Si/SiO<sub>2</sub>结构怎样处理,氧化物中固定电荷是必然存在的<sup>[13]</sup>。

本文按照 FN 理论<sup>[14]</sup>,给出了硅表面存在氧化物时场发射电流的解析公式,并考虑了氧化物中固定正电荷对场发射的影响。计算结果表明,氧化物薄膜越厚发射电流越小,在厚度约大于  $0.1\text{nm}$  时,FN 图呈现明显的两线性区; 固定正电荷同样使发射电流变小。

\* 国家自然科学基金和国防科技预研基金资助项目

黄庆安 男,1963年生,副教授,博士,主要从事半导体物理教学和真空微电子学的科研工作

1995年7月8日收到初稿,1996年1月19日收到修改稿

## 2 理论

### 2.1 硅表面覆盖理想 $\text{SiO}_2$ 膜的场发射电流

按照 FN 理论, 场发射电流密度  $J$  可表示为<sup>[14]</sup>

$$J(F, T) = q \int N(E, T) D(E, F) dE \quad (1)$$

式中  $F$  表示电场;  $T$  表示绝对温度;  $E$  表示能量;  $q$  是电子电荷值;  $D(E, F)$  是硅中电子穿过外部势垒的透射系数;  $N(E, T)$  是供给函数, 由下式给出<sup>[1, 14]</sup>

$$N(E, T) = \frac{m^* k T}{2 \pi^2 \hbar^3} \ln \left[ 1 + \exp \left( - \frac{E - E_F}{k T} \right) \right] \quad (2)$$

式中  $m^*$  表示硅中电子有效质量;  $E_F$  是硅中费米能级;  $k$  是玻尔兹曼常数;  $\hbar$  是约化普朗克常数.

对于理想氧化层, 按照高斯定理, 得到

$$\epsilon_{\text{ox}} F_{\text{ox}} = F \quad (3)$$

式中  $F$  表示场发射期间真空中的电场;  $F_{\text{ox}}$  表示硅表面氧化物中的电场;  $\epsilon_{\text{ox}}$  是氧化物的相对介电常数. 如果忽略镜像电荷的作用, 场发射期间的势能分布如图1(a)所示.

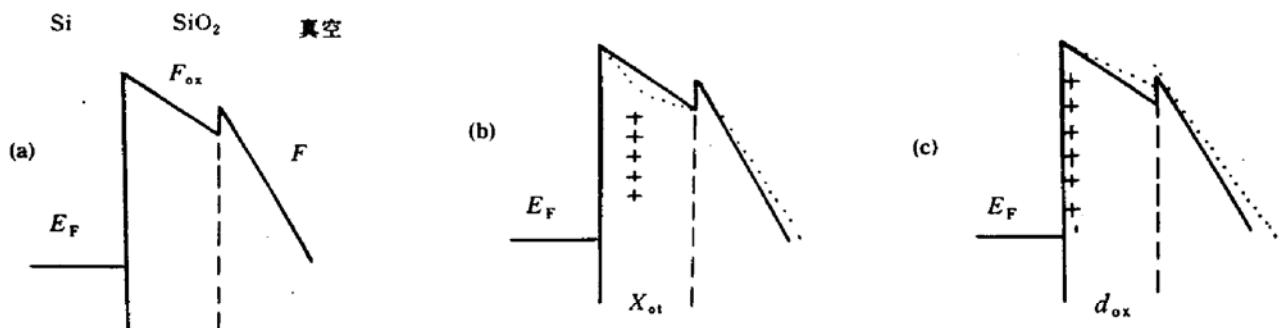


图1 硅表面存在  $\text{SiO}_2$  膜时场发射势能分布

(a) 理想  $\text{SiO}_2$  情况 (b) 存在固定正电荷,  $X_{\text{ox}} \neq 0$  (c) 存在固定正电荷,  $X_{\text{ox}} = 0$

-----表示无固定正电荷时的势能分布; ——表示有固定正电荷时的势能分布.

如果将能量原点选在  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  界面处硅导带的底部, 横坐标原点选在  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  界面处, 则势能分布  $V(x)$  可写为

$$V(x) = \begin{cases} \Phi_b - qF_{\text{ox}}x & (0 < x < d_{\text{ox}}) \\ \Phi - qF_{\text{ox}}d_{\text{ox}} - qF(x - d_{\text{ox}}) & (x > d_{\text{ox}}) \end{cases} \quad (4)$$

式中  $\Phi_b$  (3.4 eV) 是  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  之间的势垒高度;  $\Phi$  (4.05 eV) 是硅的电子亲和能;  $d_{\text{ox}}$  是  $\text{SiO}_2$  的厚度. 场发射期间, 通常假定硅表面能带没有弯曲<sup>[1, 10, 11]</sup>. 但实际上, 这种假定对重掺杂硅较为合适<sup>[1]</sup>, 因为重掺杂硅的  $E_F \approx E_c$ , 电场渗透较弱. 为使问题简化, 本文亦采用硅表面能带没有弯曲的假定.

要计算透射系数, 必须对  $\text{SiO}_2$  的能带进行描述. 对于一般的隧道问题, 可将  $\text{SiO}_2$  描述为抛物型  $E-K$  关系, 有效质量为  $m_{\text{ox}}$  ( $= 0.5m$ ) 的介质<sup>[15]</sup>. 按照这种假定, 由 WKB 近似, 我们可以得到透射系数为<sup>[16]</sup>

$$D(E, F) = \exp [Q(E, F)] \quad (5)$$

$$Q(E, F) = -\frac{4 \sqrt{2m_{ox}}}{3q\hbar F_{ox}} [(\Phi_b - E)^{3/2} - (\Phi_b - E - qF_{ox}d_{ox})^{3/2}] \\ - \frac{4 \sqrt{2m}}{3q\hbar F} (\Phi - E - qF_{ox}d_{ox})^{3/2} \quad (6)$$

将(2)式和(5)式,代入(1)式,就可得到场发射电流.但这个积分不能严格求解.Fowler-Nordheim 在计算场发射电流时作了两点近似<sup>[14]</sup>:(a)只计算  $T=0K$  时的情况;(b)将透射系数用级数展开.用(a)可将供给函数简化,用(b)可将透射系数简化,本文亦采用这两种近似.

在  $T=0K, E > E_F$  时,

$$\lim_{T \rightarrow 0} kT \ln [1 + \exp(-\frac{E - E_F}{kT})] = 0 \quad (7)$$

在  $T > 0K, E < E_F$  时

$$\lim_{T \rightarrow 0} kT \ln [1 + \exp(-\frac{E - E_F}{kT})] = E_F - E \quad (8)$$

透射系数可做这样的近似:它是能量  $E$  的函数,同时透射电子主要是  $E_F$  附近的电子,所以可把它展为  $(E - E_F)$  的泰勒级数,并仅取前两项.由于已选取  $E_F \approx E_c = 0$ , 所以从(6)式,我们得到:

$$Q(E, F) \doteq -\frac{4 \sqrt{2m_{ox}}}{3q\hbar F_{ox}} [\Phi_b^{3/2} - (\Phi_b - qF_{ox}d_{ox})^{3/2}] - \frac{4 \sqrt{2m}}{3q\hbar F} (\Phi - qF_{ox}d_{ox})^{3/2} \\ + \left\{ \frac{2 \sqrt{2m_{ox}}}{q\hbar F_{ox}} [\Phi_b^{1/2} - (\Phi_b - qF_{ox}d_{ox})^{1/2}] + \frac{2 \sqrt{2m}}{q\hbar F} (\Phi - qF_{ox}d_{ox})^{1/2} \right\} E \quad (9)$$

将(2)、(8)和(9)式代入(1),积分后得到

$$J = \frac{q^3 F^2}{16\pi^2 \hbar \Phi A^2} \left( \frac{m^*}{m} \right) \exp \left[ -\frac{4 \sqrt{2m}}{3q\hbar F} \Phi^{3/2} B \right] \quad (10)$$

式中

$$A = \frac{1}{\epsilon_{ox}} \sqrt{\frac{m_{ox}}{m}} \left[ \left( \frac{\Phi_b}{\Phi} \right)^{1/2} - \left( \frac{\Phi_b - qF_{ox}d_{ox}}{\Phi} \right)^{1/2} \right] + \left( 1 - \frac{qF_{ox}d_{ox}}{\Phi} \right)^{1/2} \quad (11)$$

$$B = \frac{1}{\epsilon_{ox}} \sqrt{\frac{m_{ox}}{m}} \left[ \left( \frac{\Phi_b}{\Phi} \right)^{3/2} - \left( \frac{\Phi_b - qF_{ox}d_{ox}}{\Phi} \right)^{3/2} \right] + \left( 1 - \frac{qF_{ox}d_{ox}}{\Phi} \right)^{3/2} \quad (12)$$

为了检验(10)式的合理性,我们看一下(10)式应用于清洁金属场发射的结果.对清洁金属场发射,有  $m^* = m, d_{ox} = 0$ ; 则由(10)~(12)式,得到  $A = 1, B = 1$ , 和

$$J = \frac{q^3 F^2}{16\pi^2 \hbar \Phi} \exp \left[ -\frac{4 \sqrt{2m}}{3q\hbar F} \Phi^{3/2} \right] \quad (13)$$

式(13)就是在忽略镜像电荷时,场发射 Fowler-Nordheim 方程<sup>[14]</sup>. 这说明了方程(10)的合理性.

在电场非常强时,即当  $qF_{ox}d_{ox} > \Phi_b$  时,如果忽略  $\text{SiO}_2/\text{真空}$  界面较小的反射,则电子仅穿越  $\text{SiO}_2$  势垒,此时透射系数可表示为

$$D(F, E) = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m_{ox}}}{3q\hbar F_{ox}}(\Phi_b - E)^{3/2}\right] \quad (14)$$

类似于上述的推导, 我们得到这种情况下的场发射电流,

$$J = \frac{q^3 F_{ox}^2}{16\pi^2 \hbar \Phi_b} \left(\frac{m^*}{m_{ox}}\right) \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m_{ox}}}{3q\hbar F_{ox}}\Phi_b^{3/2}\right] \quad (15)$$

## 2.2 SiO<sub>2</sub>中固定正电荷的作用

上述推导中, 假定 SiO<sub>2</sub>中没有电荷, 而实际上, SiO<sub>2</sub>中往往存在正电荷<sup>[13]</sup>. SiO<sub>2</sub>中正电荷有一空间分布, 一般用其密度  $N_f$  (cm<sup>-2</sup>) 或电荷密度  $Q_f (= qN_f)$  和重心距  $X_{ot}$  表示. 如图1(b) 所示, 由于正电荷存在, 势能分布发生变化. 根据高斯定理, 容易得到

$$F_{ox}^+ = F_{ox} + \frac{X_{ot} Q_f}{d_{ox} \epsilon_0 \epsilon_{ox}} \quad (16)$$

$$F_{ox}^- = F_{ox} - \left(1 - \frac{X_{ot}}{d_{ox}}\right) \frac{Q_f}{\epsilon_0 \epsilon_{ox}} \quad (17)$$

$$F^- = F - \left(1 - \frac{X_{ot}}{d_{ox}}\right) \frac{Q_f}{\epsilon_0} \quad (18)$$

式中  $F_{ox}^+$  表示 Si/SiO<sub>2</sub>界面到  $X_{ot}$  之间的电场;  $F_{ox}^-$  表示  $X_{ot}$  到  $d_{ox}$  之间的电场;  $F^-$  表示真空中的电场. 大量的实验结果表明<sup>[13]</sup>,  $X_{ot} \approx 0$ . 在这种情况下, 可以简化为

$$F_{ox}^- = F_{ox} - \frac{Q_f}{\epsilon_0 \epsilon_{ox}} \quad (19)$$

$$F^- = F - \frac{Q_f}{\epsilon_0} \quad (20)$$

这时的势能分布如图1(c) 所示, 其势垒形状与图1(a) 相似. 所以, 在  $qF_{ox}^- d_{ox} < \Phi_b$  时, 用  $F_{ox}^-$  和  $F^-$  分别代替(10)式中的  $F_{ox}$  和  $F$ , 就可以得到 SiO<sub>2</sub> 中固定正电荷作用下的场发射电流密度; 在  $qF_{ox}^- d_{ox} > \Phi_b$  时, 则用  $F_{ox}^-$  代替(15)式中的  $F_{ox}$  就可得到这种情况下的场发射电流密度.

## 3 计算结果与讨论

图2给出了理想 SiO<sub>2</sub>作用下, 场发射电流-电场的 FN 图, 即按(10)式和(15)式计算  $\ln(J/F^2) \sim 1/F$  的结果. 电场变化范围是  $1 \times 10^7 \text{ V/cm} \sim 1 \times 10^8 \text{ V/cm}$ , 计算所用参数为  $\Phi_b = 3.4 \text{ eV}$ ,  $\Phi = 4.05 \text{ eV}$ ,  $m_{ox} = 0.5 \text{ m}$ ,  $m^* = 0.98 \text{ m}$ . 从图2看出, 在低场区, 随 SiO<sub>2</sub>厚度增加, 场发射电流变小. 这是由于 SiO<sub>2</sub>附加势垒的作用. 对于  $d_{ox} = 2 \text{ nm}$  和  $3 \text{ nm}$  的情况, 场发射 FN 图呈现两个线性段, 且在高场趋于一致, 这是由于在较高电场下( $qF_{ox} d_{ox} > \Phi_b$ ); 电子仅穿越 SiO<sub>2</sub>势垒, 发射

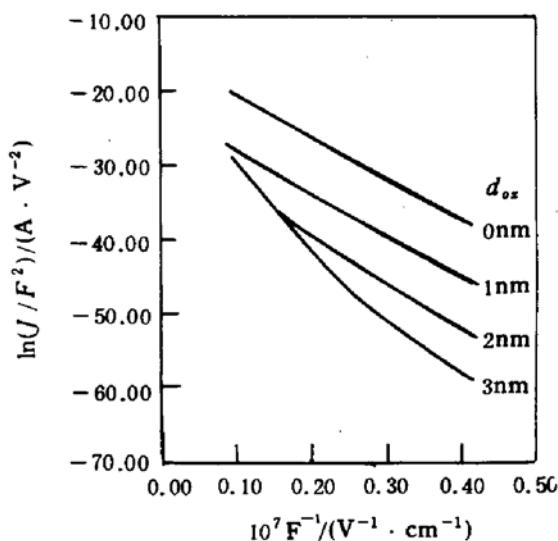


图2 理想 SiO<sub>2</sub>膜厚度对场发射的影响

电流与厚度无关.

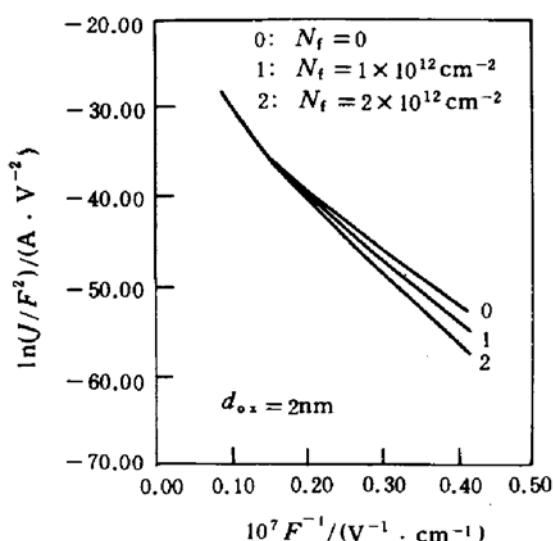


图3 SiO<sub>2</sub>膜中固定电荷对场发射的影响

图3给出了 $d_{ox}=2\text{nm}$ 情况下, SiO<sub>2</sub>中固定正电荷对场发射电流的影响, 从图中看出, 固定电荷密度越高, 发射电流越小; 固定电荷作用下的场发射 FN 图仍保持了两段线性.

如果假定目前的实验中硅表面存在极薄的氧化层( $>1\text{nm}$ )<sup>[3~5]</sup>, 那么氧化层和固定电荷均使发射电流减小, 且呈现两段线性, 这些特征似乎与实验结果定性一致.

本文的推导中, 假定 $T \rightarrow 0$ , 实际上场发射一般在常温下进行, 由于 $T > 0$ , 故会使一些电子在 $E_F$ 之上, 导致发射电流增大; 同时, 本文假定 $E_C = E_F$ , 即重掺杂硅, 对于轻掺杂硅,  $E_C > E_F$ , 这时的发射电流会减小.

由于电子在 SiO<sub>2</sub>中的平均自由程大约是 0.3nm, 因此, 本文的计算只限于氧化物厚度小于 0.3nm 的情况.

## 4 结论

根据 Fowler-Nordheim 理论, 本文推导出了硅表面存在薄氧化层时发射电流的解析公式. 计算结果表明, 氧化层和其内部的正电荷均使发射电流变小, 在氧化层厚度约大于 1nm 时, FN 图呈两段线性. 本文的结果有助于理解硅场发射的实验现象.

## 参 考 文 献

- [1] I. Brodie, C. A. Spindt, *Adv. Electron. Electron Phys.*, New York: Academic, 1992.
- [2] 黄庆安, 电子学报, 1995, 23(10): 134~138.
- [3] H. F. Grey, G. J. Campisi, R. F. Greene, Proc. IEEE Int. Electron. Devices Meeting, USA, 1986, 776~779.
- [4] R. J. Harvey, R. A. Lee, A. J. Miller, et al., *IEEE Trans. Electron Devices*, 1991, 38(11): 2323~2327.
- [5] C. E. Hunt, J. T. Trujillo, W. J. Orvis, *IEEE Trans. Electron Devices*, 1991, 38(11): 2309~2313.
- [6] R. Stratton, *Proc. Phys. Soc.*, 1955, B68: 746~753.
- [7] Q. A. Huang, *J. Appl. Phys.*, 1995, 78(2): 1254~1258.
- [8] Q. A. Huang, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1995, 34(78): L918~920.
- [9] P. H. Culter, J. He, J. Vac. Sci. Technol., 1993, B11(2): 387~391.
- [10] V. I. Makhov, Proc. 4th Int. Vacuum Microelectronics Conf, Japan, 1991, 136~139.
- [11] G. Yang, K. K. Chin, R. B. Marcus, *IEEE Trans. Electron Devices*, 1991, 38(11): 2373~2376.
- [12] Q. A. Huang, *J. Appl. Phys.*, 1995, 78(11): 6770.
- [13] E. H. Nicollian, J. R. Brews, *MOS Physics and Technology*, New York: John & Sons, 1982.
- [14] 刘学森, 阴极电子学, 北京: 科学出版社, 1980, 第4章.
- [15] Z. A. Weinberg, *J. Appl. Phys.*, 1982, 53: 5052~5055.

[16] Q. A. Huang, Proc. 8th Int. Vacuum Microelectronics Conf., USA, 1995, 373.

## Influence of Fixed Charges Within Oxide on Field Emission From Si

Huang Qing'an

(Microelectronics Center, Southeast University, Nanjing 210096)

Received 8 July 1995, revised manuscript received 19 January 1996

**Abstract** Taking into account the fixed charge within the oxide, an analytical formula for field emission from the oxide-covered silicon is presented. The results show that both the oxide film and the fixed charge reduce the field emission current. The oxide films over about 1nm in thickness result in the two-distinct linear regions in Fowler-Nordheim plot.

**EEACC:** 2320, 2340E, 2550G