

硅锥阴极中电子输运的数值模拟*

皇甫鲁江 朱长纯

(西安交通大学电子与信息工程学院 西安 710049)

摘要 引入半导体器件数值模拟的方法,即求解漂移-扩散模型为基础的半导体基本方程,对硅锥阴极中载流子的输运过程进行了数值模拟.这一方法可以比较全面地描述载流子输运对硅锥阴极状态的影响.模拟的结果表明,考虑发射电流后,发射电子的供给函数较零电流近似时小.另外,在一定条件下,由于电子输运、SRH 产生-复合率和碰撞电离产生率的限制,发射电流存在一个上限;强渗透电场下,硅锥阴极顶端内部发生明显的碰撞电离.

EEACC: 2560B, 2520

1 引言

数值模拟方法在真空微电子学研究中有着重要应用,其中之一就是使用一定的阴极发射特性模型(通常是 Fowler-Nordheim 公式),通过对不同结构的器件中阴极周围电场的计算,得到器件特性的数值模型.在这类模拟中,尖锥阴极通常被认为是等势体,其电位和衬底相同^[1].对于 Spindt 型阴极,这一假设是恰当的,但是对于硅锥阴极,则需要考虑更多的因素.硅的电阻率是金属的 $10^3 \sim 10^4$ 倍,硅锥阴极内载流子在输运中会产生比较明显的电压降、发热以及载流子浓度分布的变化等现象,这些现象会影响阴极周围的电场,同时还影响硅的场致发射特性,因此有必要对载流子在硅锥阴极内的输运过程进行模拟.

关于硅中与电子输运过程相关的场致发射特性的研究已经很多.在这些研究中,电子场致发射公式中的供给函数(Supply Function)是输运过程相关的.例如文献[2]用解 Boltzmann 方程的办法求近发射表面区域的电子的供给函数(Supply Function);文献[3]则用量子传输的概念求解这一问题.但涉及载流子在硅锥阴极体内输运过程及相关现象的研究进行得比较少.其中一个简单的数值模型是准平衡态假设,并在表面采用零发射电流近似(ZECA)^[4],这一模型被用于描述硅锥的发热现象及热效应,但它无法描述硅锥内部载流子的非平衡分布以及这种分布和发射电流的相互影响.为了克服这一缺陷,本文引入了半导体器件数值模拟的方法,即求解半导体基本方程组,这样可以比较全面地描述载流子输运中硅锥阴极的状态.

* 国家自然科学基金和博士点基金资助项目

皇甫鲁江 男,1964 年生,博士生,从事真空微电子学方面的研究

朱长纯 男,1936 年生,教授,博士生导师,从事真空微电子学方面的研究

1998-06-15 收到,1998-11-09 定稿

2 物理模型

2.1 基本半导体方程

本文所指的半导体基本方程基于半导体中载流子的漂移-扩散模型,其中包含假设载流子满足 Boltzmann 分布以及忽略强场下热电子效应. 漂移-扩散模型下,稳态半导体基本方程包括^[5]:

$$\nabla^2 \Psi = - \frac{q}{\epsilon} (p - n + N_d) \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (-q\mu_n \nabla \Psi + qD_n \nabla n) = -q(R - G) \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (-q\mu_p \nabla \Psi - qD_p \nabla p) = q(R - G) \quad (3)$$

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla T) = -Q \quad (4)$$

其中 (1) 为 Poisson 方程, (2)、(3) 为电子和空穴电流连续性方程, (4) 是导热方程; 电位 Ψ 、电子浓度 n 和空穴浓度 p 以及温度 T 是方程组的基本变量; q 、 ϵ 和 N_d 分别是电子电量、介电常数和离化杂质浓度, 在模型中被视为常数.

方程中包含了载流子的产生/复合项 $(R - G)$ 和发热强度 Q . 本模型中, R 表示 Shockley-Hall-Read 产生-复合率, G 表示载流子碰撞电离产生率, 它们的表达式为:

$$R = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)} \quad (5)$$

$$G = (\alpha_n |\vec{J}_n| + \alpha_p |\vec{J}_p|) / q \quad (6)$$

发热项表达式为:

$$Q = -(\vec{J}_n + \vec{J}_p) \cdot \nabla \Psi + (R - G)E_g \quad (7)$$

Q 表达式中第一项为欧姆热, 第二项为载流子产生/复合所吸收或产生的热量, E_g 为禁带宽度, 在计算 Q 时被近似为常数.

需要进一步说明的是基本方程中包含的系数, 如迁移率 μ 、扩散系数 D 和热导率 κ , 以及产生/复合项中的参数本征浓度 n_i 、少子寿命 τ 和电离系数 α_n 、 α_p . 虽然对这些与材料及其状态相关参数的了解已比较成熟, 但用于数值模拟的表达式却不能过于复杂. 广泛采用的方法是对已有研究成果进行数值拟合以得到比较简单的表达式.

迁移率 μ 是漂移-扩散模型中最重要的参数, 主要与电场 E 、离化杂质浓度 N_d 、温度 T 有关. 本文采用如下经验公式^[6]:

$$\mu_{n,p}(E, N_d, T) = \frac{\mu_{n,p}(N_d, T)}{\left[1 + \left(\frac{E}{E_{n,p}^{\text{crit}}} \right)^{\beta_{n,p}} \right]^{1/\beta_{n,p}}} \quad (8)$$

这一公式没有计入近表面区域由于表面散射造成的迁移率下降. 式中, E 为场强度, 拟合参数 $\beta_n = 1.11$, $\beta_p = 1.21$; $E_n^{\text{crit}} = 8.57 \times 10^3 \text{V} \cdot \text{cm}^{-1}$, $E_p^{\text{crit}} = 1.8 \times 10^4 \text{V} \cdot \text{cm}^{-1}$. E^{crit} 的物理意义可以解释为发生速度饱和的临界场强. $\mu_{n,p}(N_d, T)$ 是弱电场下迁移率, 与 N_d 、 T 相关^[7] (单位为 $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$):

$$\mu_n = 88(T/T_0)^{-0.57} + \frac{1252(T/T_0)^{-2.33}}{1 + \frac{N_d}{1.432 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}(T/T_0)^{2.546}}} \quad (9)$$

$$\mu_p = 54.3(T/T_0)^{-0.57} + \frac{407(T/T_0)^{-2.23}}{1 + \frac{N_d}{2.67 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}(T/T_0)^{2.546}}}$$

标准室温 $T_0 = 300\text{K}$, μ 确定后, 载流子扩散系数 D 可以通过 Einstein 关系式得到

在半导体内有较大的温度梯度时, 热导率 κ 对硅锥阴极的性能有较大的影响。本文模拟中的热导率模型是晶格振动热传导模型, 为了方便计算, 采用了与理论拟合得到的经验公式^[8], 在较大的温度范围内这一表达式有较好的精度:

$$\kappa = 1.5486(T/T_0)^{-4/3} \text{J} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \quad (10)$$

本征浓度的经验公式可以通过拟合实测数据得到。在尖锥阴极载流子输运的模拟中, 碰撞电离相对于 SRH 产生-复合有更重要的影响, 因此本文中对电离系数 α 采用了较精细的经验公式。本征浓度 n_i ^[9], 少子寿命 τ ^[10] 和电离系数 α ^[11] 分别表示如下:

$$n_i = \exp(47.4989 - 7230.44/(T \cdot \text{K}^{-1})) \text{cm}^{-3} \quad (11)$$

$$\tau_{n,p} = \frac{\tau_{n,p}^0}{1 + \frac{N_d}{C_{n,p}^{\text{ref}}}} \quad (12)$$

$$\alpha_{n,p} = \alpha_{n,p}^0 [1 + c_{n,p}(T - T_0)] E \left[- \left(\frac{b_{n,p}(1 + d_{n,p}(T - T_0))}{E} \right)^2 \right] \quad (13)$$

式(12)中, 纯净半导体中少子寿命 $\tau_n^0 = 5.0 \times 10^{-5} \text{s}$, $\tau_p^0 = 5.0 \times 10^{-5} \text{s}$; 拟合参数 $C_n^{\text{ref}} = 5.0 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $C_p^{\text{ref}} = 5.0 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 。式(13)中, 拟合参数 $\alpha_n^0 = 0.426 \text{cm}^{-1}$, $\alpha_p^0 = 0.243 \text{cm}^{-1}$, $b_n = 4.81 \times 10^5 \text{V} \cdot \text{cm}^{-1}$, $b_p = 6.53 \times 10^5 \text{V} \cdot \text{cm}^{-1}$; $c_n = 3.05 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$, $c_p = 5.35 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$; $d_n = 7.86 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$, $d_p = 5.87 \times 10^{-5} \text{K}^{-1}$ 。

2.2 边界条件

本文假设, 在锥体与衬底的界面硅处于平衡态, 电位、载流子浓度和温度满足 Dirichlet 边界条件, 为恒定值; 而在锥体的侧面, 它们满足 Neumann 边界条件, 且各变量的梯度为零。这些假设意味着锥体处于一个无电场的环境, 表面无过剩电荷, 同时载流子在表面无产生复合, 锥体本身不向外辐射或从外界接受热量。

在锥体的顶端表面, 由于有场致发射现象, 被称为发射表面。在发射表面必须额外考虑电子的发射电流以及外电场的渗透。为了处理方便, 我们还假设在这一区域外加电场强度和发射电流密度是均匀的。虽然从模拟的结果可以看到, 假设均匀的电场下得到均匀的发射电流是不准确的, 但这一假设对得到的结论没有根本的影响。在这些假设下, 发射表面 Poisson 方程、电流连续方程的边界条件可表示为:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} = -E_{\text{pnttr}} \quad (14)$$

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n} = J_{\text{emit}} \quad (15)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{n} = 0 \quad (16)$$

式中 \vec{n} 表示表面法向矢量, E_{pnttr} , J_{emit} 分别表示渗透电场和发射电流密度, 其中 E_{pnttr} 代表了外加电场和表面态(电荷)共同作用的结果。由于表面态的存在, 发射电流密度 J_{emit} 可以不是

渗透电场 E_{pntt} 的单值函数 对于导热方程, 我们忽略电子发射造成的 Nottingham 热, 这样温度 T 在发射表面满足 Neumann 边界条件:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0 \tag{17}$$

3 方程的离散化及求解

在本文的模拟中, 采用了非均匀网格的有限差分法 在各个差分单元用控制容积积分法对基本方程进行离散化, 即每个格点的控制容积内, 特定的物理量满足守恒关系 这一方法的优点是物理意义清晰, 因为半导体基本方程就意味着在某一封闭区域内电位移矢量和电荷的守恒, 电子、空穴数目的守恒, 热流和发热量的守恒 其差分格式如下:

$$\vec{s}_l \cdot \vec{D}_l - \delta v q (p - n + N_d) = 0 \tag{18}$$

$$\vec{s}_l \cdot \vec{J}_n - \delta v q (R - G) = 0 \tag{19}$$

$$\vec{s}_l \cdot \vec{J}_p + \delta v q (R - G) = 0 \tag{20}$$

$$\vec{s}_l \cdot \vec{Q}_{\text{flux}} - \delta v Q = 0 \tag{21}$$

式中 s_l 为差分单元的各个界面(线), 它们通常由与相邻格点连线的中垂面(线)组成, 在边界则包含自然界面并允许格点位于自然界面上; δv 是界面所围成差分单元的容(面)积; D_l 为电位移矢量, 可由该格点和相邻格点上的电位的差分求得, Q_{flux} 为热流量, 由温度的差分求得 这一差分格式有较强的适应性, 在本文的二维(准三维)网格中, 它不仅适用于内部的方形单元, 而且适用于边界的三角形单元

离散化后, 可以得到的关于解向量的矩阵方程, 简写为:

$$F_{i,j}^T(\vec{W}) = 0 \tag{22}$$

$$F_{i,j}^W(\vec{T}) = 0 \tag{23}$$

其中 i, j 表示格点编号, \vec{W} 表示包含有相关格点上变量 $\psi_{n,p}$ 的解向量, \vec{T} 为相关格点上温度的解向量; F^T, F^W 分别表示与向量 \vec{T}, \vec{W} 相关的系数矩阵元素

由于硅锥阴极中存在较强的产生/复合现象, 为保证收敛, 对方程(22)采用了耦合方法求解, 其数值方法为 Newton-SLOR 方法^[12]. 对方程(23)可采用简单迭代方法求解 方程(22)、(23)之间通过迭代实现解的自洽, 其过程如图 1 所示

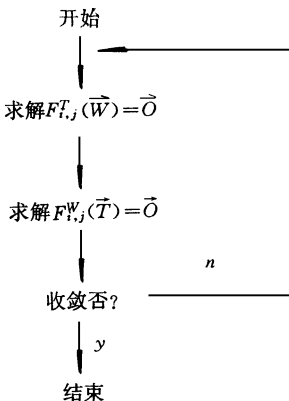


图 1 基本方程求解过程示意图

4 模拟的结果及讨论

硅锥阴极的形状可以近似为一个极小的球冠经过渡与一

个圆台相接,场发射表面基本上限于球冠表面。以下按习惯仍称阴极为锥体,而把球冠及过渡部分称为顶端部分。模拟中,顶端部分的主截面边界用一组折线拟合,如图2所示。需要说明的是,本形状模型仅用于内部载流子运输过程的模拟而没有考虑用于外电场模拟时的适用性。关于硅锥的具体参数如下:顶端曲率半径为10nm,锥体半角 17° ,高度 $1\mu\text{m}$,N型掺杂浓度 $10^{19}/\text{cm}^3$ 。同时,模拟中假定衬底电位 $\Psi_{\text{sub}}=0$,衬底温度 $T_{\text{sub}}=300\text{K}$ 。

图3表示渗透电场 E_{pntnr} 和发射电流 J_{emit} 下中轴线上的载流子浓度、电位分布情况。由于各物理量的变化主要集中在靠近顶端的部分,分布图也主要描述这一部分。可以看出,电场渗透使顶端大部分区域电子浓度上升,但电子的发射造成近发射表面区域电子浓度的显著下降,这意味着考虑发射电流后,发射电子的供给函数较零电流近似时小。另外,由于多维效应,近发射表面区域电子浓度下降曲线很不规则。

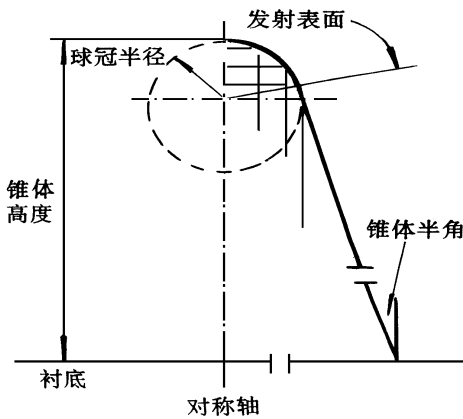


图2 尖锥形状模型

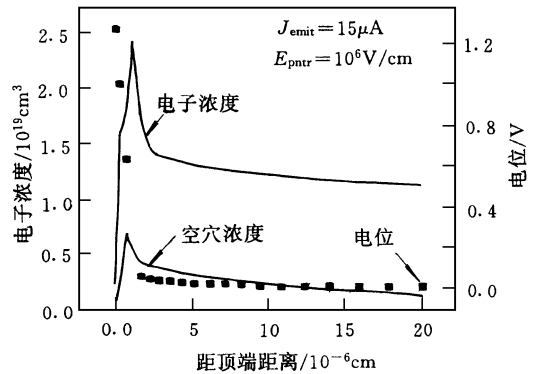


图3 锥体轴线载流子浓度和电位分布

模拟表明,由于电子运输、SRH产生-复合率和碰撞电离产生率的限制,发射电流存在一个上限。在均匀外场和发射电流假设下,如无渗透电场,这一上限的值约为 $6.1\mu\text{A}$,对应于发射电流密度 $1.1 \times 10^6 \text{A}/\text{cm}^2$ 。这一上限可随渗透电场变化,当渗透电场强度为 $1.0 \times 10^6 \text{V}/\text{cm}$ 时,发射电流上限约为 $15.1\mu\text{A}$,对应发射电流密度 $2.7 \times 10^6 \text{A}/\text{cm}^2$ 。由于外加电场和硅表面态电荷,都可以明显影响渗透电场,因此这两个因素的变动都可以对电子的运输过程发生影响。

从模拟结果分析,渗透电场对传输电流的影响主要表现在两个方面,一是提高了电子浓度及梯度,使运输电流增强;另一方面,加强了内部电场,使碰撞电离系数大幅提高。发射电流为 $15\mu\text{A}$,渗透电场强度为 $1.0 \times 10^6 \text{V}/\text{cm}$ 时,顶端部分内部最高电场强度为 $1.1 \times 10^6 \text{V}/\text{cm}$,顶端内碰撞电离电子产生率为 $2.03 \times 10^3/\text{s}$,相当于发射电流 $3.3\mu\text{A}$;如不考虑渗透电场时,内部最高场强仅为 $3.2 \times 10^3 \text{V}/\text{cm}$,无碰撞电离现象。这说明强场下碰撞电离对提高发射电流有明显影响,这也证实了文献[13]的推测。相比之下SRH产生-复合对电流的贡献很小。

模拟结果表明,锥体发热主要集中在顶端。发射电流为 $15\mu\text{A}$,渗透电场强度为 $1.0 \times 10^6 \text{V}/\text{cm}$ 时,总发热量为 $1.37 \times 10^{-5} \text{J}$,顶端温升约为 5K ,对硅锥阴极的状态无明显的影

响,但仅占 3.6×10^{-5} 锥体体积的顶端部分发热量为 1.16×10^{-5} J,因此散热过程十分关键

5 结论

(1) 用求解半导体基本方程组方法,可以比较全面地描述载流子输运对硅锥阴级的状态的影响,包括载流子浓度分布和电位、温度分布

(2) 渗透电场和电子发射可影响电子浓度分布,考虑发射电流后,发射电子的供给函数较零电流近似时小

(3) 由于电子输运、SRH 产生-复合率和碰撞电离产生率的限制,发射电流存在一个上限,外加电场和表面态密度可以对这种制约发生显著的影响

(4) 强渗透电场下,硅锥阴极顶端内部发生明显的碰撞电离,产生的电子对发射电流有较大的影响,相比之下 SRH 产生/复合对电流的贡献很小

(5) 模拟结果表明,锥体的发热主要集中在顶端部分,散热过程十分关键

参 考 文 献

- [1] E. G. Zaidman, IEEE Trans Electron Devices, 1993, **40**(2): 448~ 451.
- [2] V. Filip, D. Nicolaescu, C. N. Plavitu *et al* , Dig. of IMC'97, 14~ 18
- [3] K. L. Jensen, J. Vac Sci Technol B, 1995, **13**(2): 505~ 510
- [4] M. G. Ancona, J. Vac Sci Technol B, 1996, **14**(3): 1918~ 1923
- [5] S. Selberherr 著, 阮刚, 汤庭鳌等译, 半导体器件的分析与模拟, 上海: 上海科学技术文献出版社, 1988, 51.
- [6] C. Canali, G. Majni, R. Minder *et al* , IEEE Trans Electron Devices, 1975, **22**: 1045~ 1047.
- [7] N. D. Aroa, J. R. Hauser, D. J. Roulston, IEEE Trans Electron Devices, 1982, **29**(2): 292~ 295.
- [8] M. S. Adler, IEEE Trans Electron Devices, 1978, **25**(1): 16~ 22
- [9] 施敏 著, 黄振岗译, 半导体器件物理, 北京: 电子工业出版社, 1987, 56
- [10] D. C. D'Avanzo, M. Vanzi, R. W. Dutton, One-Dimensional Semiconductor Device Analysis (SEDAN), Report G-201-5, Stanford University, 1979.
- [11] Y. Okuto, C. R. Crowell, Solid-State Electron, 1975, **18**: 161~ 168
- [12] 何野, 魏同立, 半导体器件的计算机模拟方法, 北京: 科学出版社, 1989, 123
- [13] I. Rodie, C. A. Spindt, Vacuum Microelectronics, New York: Academic Press Inc, 1992, 21.

Numerical Simulation of Electron Transportation in Silicon Field Emitters

Huangfu Lujiang, Zhu Changchun

(Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

Received 15 June 1998, revised manuscript received 9 November 1998

Abstract The state of a Si emitter concerned with the carrier transportation is simulated with the method used in semiconductor devices simulation. Because the basic semiconductor equations of drift-diffusion model are solved, the state in the emitter influenced by carrier transportation could be well realized. The results show that the electron supply function is less than that of ZECA. The results also show that there is an upper limit of emitted current under some condition because of the confinement of carrier transportation, SRH generation-recombination rates and ionization rates. Clear impact ionization is found within the apex when there is strong penetrating electric field.

EEACC: 2560B, 2520