

5. Блочный характер алгоритма позволяет эффективно использовать сверхбыструю кэш-память компьютера.

*Работа выполнена при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных
исследований (грант № 05-01-00487).*

Л и т е р а т у р а

1. Свешников В. М. О расчете интенсивных пучков заряженных частиц методом итераций по подобластям без наложения// Прикладная физика. 2006. № 3. С. 49—57.
2. Ильин В. П., Свешников В. М., Сынах В. С.// Сиб. Ж. Индустр. Мат. 2000. Т. 3. № 1. С. 124.
3. Федоренко Р. П. Введение в вычислительную физику. — М.: МФТИ, 1996.
4. Мацюкин А. М. Автоматизация триангуляции областей с гладкой границей при решении уравнений эллиптического типа: Препринт. — Новосибирск: ВЦ СО АН СССР. 1975. № 15.
5. Самарский А. А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977.

Статья поступила в редакцию 14 ноября 2007 г.

Numerical calculation of intensive charged particle beams on quasistructured rectangular grids

V. M. Sveshnikov

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS,
Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

The method of calculation of intensive charged particle beams on rectangular quasistructured grids is offered. The grids are constructed in two stages: first the calculated domain is broken by a uniform rectangular macrogrid into subdomains, and then in each macrocell is constructed uniform rectangular locally-modified subgrid. The basis of this method is made with construction and the solving of system of the linear algebraic equations concerning values of an electric field potential in nodes of the grid covering interface boundary of subdomains. The suggested method is direct as in it there are no iterations on subdomains. Estimations of the algorithm efficient and the results of numerical experiments are given. In the conclusion the basic properties of the considered approach are listed.

УДК 519.63+681.3

Программный комплекс для моделирования катодного микроузла с полупроводниковым автоэммиттером

С. В. Поляков

Институт математического моделирования РАН, Москва, Россия

В. А. Федирко

МГТУ "Станкин", Москва, Россия

Рассмотрена проблема решения задач электродинамики в современных полупроводниковых приборах вакуумной микроэлектроники (ВМ) со сложной субмикронной геометрией. Для описания процессов электронного транспорта в полупроводнике использована квазигидродинамическая модель, которая реализована в виде комплекса программ для многопроцессорных вычислительных систем с использованием оригинальных численных методов и алгоритмов на нерегулярных сетках. Разработанный программный комплекс позволяет моделировать функционирование полупроводникового автокатодного узла и его характеристики, рассчитывать распределения электрического поля, плотности и энергии носителей заряда, температуры кристаллической решетки.

Современный уровень микроэлектронной технологии позволяет реализовать в устройствах ВМ

ряд существенных преимуществ вакуумных приборов [1—3]. Базовым элементом ВМ служит массив

полевых микроэммиттеров (автокатодов), функционирующих в условиях физического вакуума, что позволяет реализовать бесстолкновительный перенос электронов. Возможность достижения в условиях баллистического переноса высоких скоростей электронов позволяет реализовать в вакуумных микроэлектронных устройствах более высокие скорости модуляции, а также получить потоки электронов с более высокой энергией при меньших энергозатратах, чем это возможно в традиционных устройствах твердотельной электроники. Кроме того, устройства ВМ сохраняют работоспособность в широком температурном диапазоне и в условиях повышенной радиации.

Значительные потенциальные преимущества предоставляет использование в устройствах ВМ автоэмиссионных катодов, что связано с рядом их уникальных свойств:

максимальная плотность тока эмиссии может достигать более 10^6 А/см²;

ток эмиссии относительно слабо зависит от температуры в широком температурном диапазоне (порядка 0—1000 К) и при радиационном облучении нейтронами (до 10^{17} нейтрон/см²);

предельная частота модуляции принципиально может принадлежать терагерцовому диапазону (время акта эмиссии составляет около 10 фс);

минимальный размер эмитирующей области может быть меньше нанометра.

Все это дает возможность создавать широкий спектр различных классов приборов, технологического и аналитического оборудования с более высокими параметрами, чем у твердотельных приборов. Устройства ВМ могут использоваться в плоских экранах, СВЧ-устройствах, в качестве элементов цифровых ИС, электронных и ионных пушках, сенсорах, ускорителях высоких энергий, в устройствах литографии, лазерах на свободных электронах, в электронных микроскопах и электронных микрозондовых приборах.

В устройствах ВМ субмикронных и нанометровых размеров автоэлектронная эмиссия может быть реализована при малых напряжениях (меньших потенциалов ионизации остаточных газов), что дает возможность получать достаточно стабильную эмиссию в условиях технического вакуума.

Значительные преимущества возникают при использовании полупроводниковых автоэммиттеров. Одним из наиболее перспективных материалов для создания автокатодных узлов устройств ВМ является кремний в связи со сравнительной его дешевизной и распространенностью в сочетании с уникальными свойствами, возможностью использовать высокоразвитую групповую технологию кремниевых интегральных схем, а также принци-

пиальной возможностью интеграции элементов ВМ с элементами традиционной микроэлектроники [1—4].

Несмотря на то, что концентрация электронов в зоне проводимости кремния на несколько порядков меньше, чем в металлах, их эмиссионные характеристики оказываются сопоставимыми. Обычно наблюдаемые значения тока эмиссии из кремниевых микроавтокатодов составляют в среднем от единиц до десятков наноампер на один катод при рабочих напряжениях [5, 6]. В ряде работ сообщается о наблюдении токов эмиссии до сотен и даже нескольких тысяч наноампер на катод [7, 8].

Базовым элементом ВМ служит миниатюрный катодный узел, который является источником микроскопического электронного пучка. В устройствах ВМ применяются как массивы таких ячеек, так и одиночные узлы, например для микродисплеев высокого разрешения. Катодный узел с автоэммиттером представляет собой весьма сложную многоэлектродную систему, и теоретическое исследование его характеристик возможно лишь с привлечением численных методов. В настоящей работе представлен программный комплекс, предназначенный для математического моделирования вакуумного катодного микроузла реальной геометрии с кремниевым лезвийным автоэммиттером.

Физико-математическая модель

Физико-математическая модель полевой эмиссии из полупроводникового автокатода разрабатывалась ранее, например в работах [9—12] и ряде других. Была показана существенная роль разогрева электронного газа вблизи эмитирующей поверхности, что приводит к неравновесному и нелинейному характеру процесса переноса заряда. Значительный разогрев электронного газа вблизи эмитирующего наноострия может вызывать повышение температуры кристаллической решетки в этой области катода, которое в свою очередь оказывает влияние на электронный транспорт, а также может служить одной из причин деградации острия.

Построенная нами физико-математическая модель позволяет адекватно учитывать особенности электронного переноса в полупроводнике при полевой эмиссии из микроэммиттера с нанометровым острием. Используется двухмерный квазигидродинамический подход, основанный на самосогласованном решении уравнений непрерывности и уравнения энергетического баланса в электроннодырочной плазме, уравнений Пуассона и теплопроводности для кристалла. Энергетический баланс описывается в терминах времени энергетической релаксации, кроме того учитываются процессы ударной ионизации, возможные в силь-

но разогретом электронном газе. В данной работе моделируется катодный узел с лезвийным автоэмиттером, но модель может быть без труда адаптирована и к расчету аксиально-симметричного микроузла с острым автокатодом.

Схема эмиссионной ячейки, соответствующая реальной конструкции катодного микроузла с лезвийным клиновидным полупроводниковым катодом, изображена на рис. 1, по соображениям симметрии, дана половина реальной ячейки.

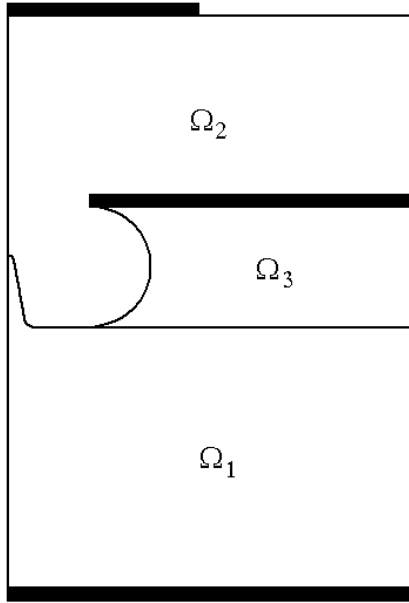


Рис. 1. Конфигурация микрокатодного узла.

Области Ω_k ($k = 1, 2, 3$) соответствуют, соответственно, кремниевой части катода, диэлектрику (оксиду кремния) и вакууму. Черным цветом обозначены металлические контакты

Процессы эмиссии электронов в принятой модели описываются следующей системой уравнений, записанной в безразмерных переменных:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu_1 \operatorname{div} \mathbf{j}_n + G_0 G_n, \quad \mathbf{j}_n = +n\mu_n \mathbf{E} + D \nabla D_n n; \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \mu_2 \operatorname{div} \mathbf{j}_p + G_0 G_n, \quad \mathbf{j}_p = -p\mu_p \mathbf{E} + D \nabla D_p p; \quad (2)$$

$$\frac{\partial w_n}{\partial t} = \mu_3 \operatorname{div} \mathbf{Q}_n + G_2 \mathbf{j}_n \cdot \mathbf{E} - G_1 G_n - R_n, \quad (3)$$

$$\mathbf{Q}_n = w_n \mu_n \alpha \mathbf{E} + D \nabla D_n \alpha w_n;$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = \mu_4 \operatorname{div} \mathbf{Q}_l + \delta R_n, \quad \mathbf{Q}_l = \nabla T_l; \quad (4)$$

$$\operatorname{div} \varepsilon \mathbf{E} = \gamma \cdot \rho, \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (5)$$

где n, p — локальные концентрации электронов и дырок, нормированные на равновесную концентрацию доноров N_D ;
 $w_n = nT_n$ — безразмерная энергия электронов;

T_n, T_l — электронная и решеточная температуры, нормированные на температуру T_0 окружающей среды;

φ — потенциал, нормированный на некоторую характерную величину φ_0 ;

\mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля, нормированный на $E_0 = \frac{\varphi_0}{h}$ (h — характерный размер структуры);

$\mathbf{j}_n, \mathbf{j}_p$ — плотности электронного и дырочного токов, нормированные, соответственно, на величины $j_{n_0} = e\mu_{n_0} N_D E_0$,

$j_{p_0} = e\mu_{p_0} N_D E_0$ (μ_{n_0}, μ_{p_0} — равновесные значения подвижности электронов и дырок; e — элементарный заряд);

\mathbf{Q}_n — вектор плотности потока энергии электронов, нормированный на $Q_{n_0} = \mu_{n_0} N_D E_0 \chi_r$ ($\chi_r = \frac{5}{2} k_B T_0$);

\mathbf{Q}_l — вектор плотности потока тепла в кристаллической решетке, нормированный на $Q_{l_0} = \frac{\lambda_1 T_0}{h}$ (λ_1 — коэффициент теплопроводности);

μ_n и μ_p — безразмерные подвижности;

D_n и D_p — безразмерные коэффициенты диффузии, соответственно, электронов и дырок:

$$\mu_n = [1 + \beta (T_n - T_l)]^{-1};$$

$$\mu_p = 1, \quad D_n = T_n \mu_n; \quad D_p = T_n;$$

G_n — безразмерный темп ударной ионизации [13]:

$G_n = nT_n^{3/2} \exp -\delta_0 / T_n$, ρ — безразмерная плотность заряда:

$$\rho = \begin{cases} 1 - n + p, & (x, y) \in \Omega_1; \\ 0, & (x, y) \in \Omega_2 \cup \Omega_3; \end{cases}$$

$$R_n = w_n - w_l; \quad w_l = nT_l;$$

$$\alpha = \left(1 - \frac{2}{5} \beta T_n [1 + \beta (T_n - T_l)]^{-1} \right);$$

$$\varepsilon = 1, \quad (x, y) \in \Omega_1; \quad \varepsilon = \varepsilon_2 / \varepsilon_1; \\ (x, y) \in \Omega_2; \quad \varepsilon = \varepsilon_3 / \varepsilon_1, \quad (x, y) \in \Omega_3,$$

где $\varepsilon_{k=1,2,3}$ — диэлектрические проницаемости, соответственно, полупроводника, вакуума и изолятора.

Безразмерные коэффициенты $\mu_{k=1,2,3,4}$, D , $G_{k=0,1}$, δ_0 , δ , γ , β выражаются через размерные величины следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{\tau_\varepsilon \mu_{n_0} \Phi_0}{h^2}; \quad \mu_2 = \frac{\tau_\varepsilon \mu_{p_0} \Phi_0}{h^2}; \quad \mu_3 = \frac{5}{3} \mu_1; \\ \mu_4 &= \frac{\tau_\varepsilon \lambda_1}{c_{v_1} h^2}; \quad D = \frac{k_B T_0}{e \Phi_0}; \quad G_0 = \frac{\tau_\varepsilon A}{3\sqrt{2}} \left(\frac{k_B T_0}{E_g} \right)^{3/2} \left(\frac{R_h}{\varepsilon_1} \right)^2; \\ G_1 &= \frac{7}{6} \frac{E_g}{k_B T_0} G_0; \quad G_2 = \frac{2\tau_\varepsilon \mu_{n_0} e \Phi_0^2}{3k_B T_0 h^2}; \quad \delta_0 = \frac{3}{2} \frac{E_g}{k_B T_0}; \\ \delta &= \frac{3k_B N_D}{2c_{v_1}}; \quad \gamma = \frac{4\pi e N_D C_{pois} h^2}{\varepsilon_1 \Phi_0}; \quad \beta = \frac{3\mu_{n_0} k_B T_0}{2\tau_\varepsilon e v_{es}^2}, \end{aligned}$$

где v_{es} — максимальная дрейфовая скорость (скорость насыщения) электронов;
 c_{v_1} — теплоемкость полупроводника;
 $C_{pois} = 9 \cdot 10^{11} \frac{\text{В} \cdot \text{см}}{\text{Кл}}$ — коэффициент Пуассона;
 k_B — постоянная Больцмана;
 E_g — ширина запрещенной зоны полупроводника; интеграл перекрытия R_h и постоянная A — параметры удельной скорости ударной ионизации.

Уравнения (1)—(4) справедливы в слое катода (область Ω_1), а уравнение (5) — во всей области $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$. Координаты (x, y) нормированы на характерный размер h , а время t измеряется в единицах времени релаксации энергии электронов τ_ε .

Система уравнений (1)—(5) дополняется следующими условиями на границах:

$$\begin{aligned} (j_n, v) &= 0, \quad (j_p, v) = 0, \quad (Q_n, v) = 0, \\ (Q_l, v) &= 0, \quad (\nabla \varphi, v) = 0, \quad x = 0, L_x; \\ (j_n, v) &= j_{ns}, \quad (j_p, v) = j_{ps}, \quad (Q_n, v) = Q_{ns}, \\ (Q_l, v) &= Q_{ls}, \quad \varphi = 0, \quad y = 0; \\ (j_n, v) &= j_{ns}, \quad (j_p, v) = j_{ps}, \quad (Q_n, v) = Q_{ns}, \\ (Q_l, v) &= Q_{ls}, \\ \varepsilon_1 E_v^{(1)} &= \varepsilon_2 E_v^{(2)}, \quad E_\tau^{(1)} = E_\tau^{(2)}, \quad (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2; \\ \varepsilon_1 E_v^{(1)} &= \varepsilon_3 E_v^{(3)}, \quad E_\tau^{(1)} = E_\tau^{(3)}, \quad (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_3; \\ \varepsilon_2 E_v^{(2)} &= \varepsilon_3 E_v^{(3)}, \quad E_\tau^{(2)} = E_\tau^{(3)}, \quad (x, y) \in \partial\Omega_2 \cap \partial\Omega_3; \\ \varphi &= V_a, \quad y = L_y, \end{aligned} \tag{6}$$

где L_x, L_y — размеры области Ω ;
 v — вектор внешней нормали к границам областей;
 $\partial\Omega_k$ — границы подобластей;
 $E_v^{(k)}, E_\tau^{(k)}$ — нормальные и тангенциальные компоненты поля на границе k -й области;
 V_a — потенциал на аноде;

$j_{ns}, j_{ps}, Q_{ns}, Q_{ls}$ — значения поверхностных токов и потоков энергии;

$$\begin{aligned} j_{ns} &= \begin{cases} E_y, & y = 0, \\ -J_{n_0} n T_n^{1/2} \int_0^\infty D_0 -E_v^{(2)} / \alpha_0, \beta_0 T_n \xi \times \\ \times \exp[-\xi] d\xi, & (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2; \end{cases} \\ j_{ps} &= \begin{cases} J_{p_0} p, & y = 0, \\ 0, & (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2; \end{cases} \\ Q_{ns} &= \begin{cases} E_y, & y = 0, \\ -\frac{2}{5} J_{n_0} n T_n^{3/2} \int_0^\infty D_0 -E_v^{(2)} / \alpha_0, \beta_0 T_n \xi \times \\ \times (\xi + 1) \exp[-\xi] d\xi, & (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2; \end{cases} \\ Q_{ls} &= \begin{cases} \eta_l (T_l - 1), & y = 0, \\ 0, & (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2. \end{cases} \end{aligned} \tag{7}$$

Коэффициент туннелирования через эмитирующую поверхность D_0 приближается с помощью формулы Фоулера-Нордгейма:

$$D_0(x, y) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ \exp[-(1-y)^{3/2} \theta(\eta)/x], & x > 0, y < 1, \\ 1, & x > 0, y \geq 1, \end{cases} \tag{8}$$

$$\theta \eta \approx \max \{ 0, 1 - 0,07\eta - 0,739\eta^2 - 0,191\eta^{15} \},$$

$$\eta = \frac{\gamma_0 \sqrt{\alpha_0 x}}{1 - y}.$$

В (7)—(8) используются следующие безразмерные константы:

$$\begin{aligned} J_{n_0} &= \sqrt{\frac{10^7 k_B T_0}{2\pi m_e}} \frac{h}{\mu_{n_0} \Phi_0}; \quad J_{p_0} = \frac{v_{hs} h}{\mu_{p_0} \Phi_0}; \\ \alpha_0 &= \sqrt{\frac{2m_e e \chi_0}{10^7 h^2}} \frac{4\chi_0 h}{3\Phi_0}; \quad \beta_0 = \frac{k_B T_0}{e \chi_0}; \quad \gamma_0 = \sqrt{\frac{C_{pois} e \Phi_0}{2\pi \chi_0^2 h}} \left(\frac{\varepsilon_1 - 1}{\varepsilon_1 + 1} \right), \end{aligned}$$

где m_e — эффективная масса электрона в полупроводнике;

v_{hs} — скорость поверхностной рекомбинации дырок;

\hbar — постоянная Планка;

$e\chi_0$ — энергия электронного сродства полупроводника;

η_l — безразмерный коэффициент Ньютона для отвода тепла в подложку.

Приведенные динамические уравнения (1)—(4) с граничными условиями (6)—(8) решаются численно для расчета эволюции системы в стационарном состоянии.

нарный режим автоэмиссии из заданного начального состояния. В качестве последнего выбирается равновесное состояние системы в отсутствие приложенного напряжения

$$\begin{aligned} n=1, \quad p=0, \quad w_n=1, \quad T_n=T_l=1, \\ (x, y) \in \Omega_1, \quad \varphi=0, \quad (x, y) \in \Omega. \end{aligned} \quad (9)$$

Численный алгоритм и программный комплекс

Для решения задачи (1)—(9) разработана численная модель [14], использующая нерегулярные треугольные сетки и конечно-объемные аппроксимации на этих сетках уравнений квазигидродинамики и уравнения Пуассона. В частности, для решения динамических уравнений (1)—(4) предложены полуявные по времени конечно-объемные экспоненциальные схемы. Используемые в них аппроксимации пространственных операторов являются обобщением схем экспоненциальной подгонки [15] на треугольных сеточных элементах. Для дискретизации уравнения Пуассона используются известные аппроксимации операторов дивергенции и градиента на треугольных сетках. В обоих случаях в качестве контрольных объемов используются медианальные объемы. Более подробное описание и вывод экспоненциальных схем содержатся в работе [16].

Для численной реализации построенных конечно-объемных схем используются методы сопряженных и бисопряженных градиентов со специальной структурой предобусловливателя. Для построения последнего используется переход в пространства Крылова. Параллельная реализация предложенных численных алгоритмов базируется на методе Шварца. При проведении расчетов на многопроцессорных вычислительных системах (МВС) предполагается использование как полностью распределенной вычислительной сети, так и гибридной, в которой отдельные вычислительные узлы могут быть SMP-системами с общей памятью.

Разработанные численные методы и параллельные алгоритмы были реализованы в виде комплекса программ MICRO_2D для МВС. Структура и принципы работы комплекса частично освещены в [14]. В представляемой версии в него добавлена поддержка многоядерных процессоров. Для этого совместно используются стандарты MPI (в версии MPICH 1.2) и OpenMP. В результате, если вычисления проводятся на системе из нескольких узлов, объединенных в сеть, обмен между узлами осуществляется с помощью функций MPI. Внутри узлов при наличии многих ядер и/или процессоров применяют параллельные алгоритмы, ориентированные на использование общей памяти и нитей и реализованные в рамках стандарта OpenMP.

Результаты моделирования

Ниже приведены некоторые примеры расчетов, выполненные с помощью разработанного программного комплекса. В расчетах использовались следующие параметры: $\varphi_0 = 50$ В; $h = 1$ мкм; $T_0 = 300$ К; $\varepsilon_1 = 11,7$; $\varepsilon_2 = 1$; $\varepsilon_3 = 3,9$; $\chi_0 = 4$ В; $E_g = 1,12$ эВ; $m_e = m_0 = 9,828 \cdot 10^{-28}$ г; $\tau_e = 6 \cdot 10^{-13}$ с; $N_D = 10^{18}$ см⁻³; $\mu_{n_0} = 280 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$; $\mu_{p_0} = 50 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$; $v_{es} = 10^7 \frac{\text{см}}{\text{с}}$; $v_{hs} = 10^8 \frac{\text{см}}{\text{с}}$; $\lambda_1 = 1,48 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{см} \cdot \text{с}}$; $c_{v_1} = 1,664 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{см}^3}$; $\eta_l = 10^5$; $R_h = 0,1$ и $A = 1,32 \cdot 10^{17}$ с⁻¹ [12, 13].

Первая тестовая серия расчетов связана с анализом плоской структуры (отсутствуют острие, изолятор и управляющая сетка) для случая узкого анода (см. рис. 2, а). Размеры области Ω были равны 1×1 мкм, полуширина анода равна $0,25$ мкм. Потенциал на аноде V_a варьировался в пределах 100 — 2000 В.

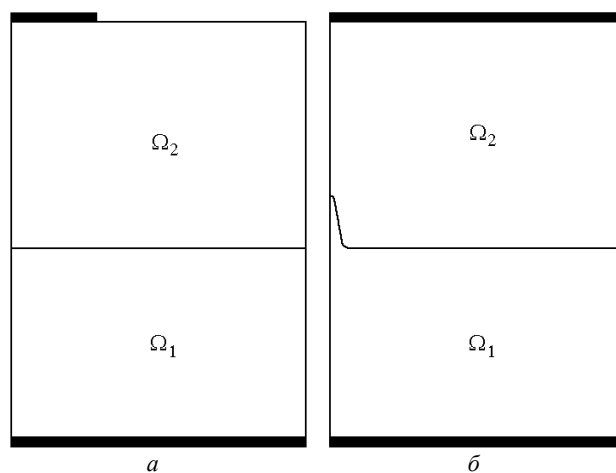


Рис. 2. Расчетные конфигурации микроузла — диодные структуры с узким анодом и плоским катодом (а) и с широким анодом и лезвийным катодом (б)

Первоначальные расчеты проводили без учета процессов ударной ионизации и разогрева кристаллической решетки. В этом случае, как показывают теоретические оценки, электронный газ может разогреваться до температур, сравнимых (в энергетических единицах) с высотой потенциального барьера при значениях тянущего поля в несколько мВ/см, что должно приводить к резкому возрастанию и насыщению тока эмиссии вблизи этого порога.

Анализ полученной в расчетах зависимости тока эмиссии J_{es} от приложенного напряжения V_a показал, что она действительно имеет характер, близкий к пороговому. В частности, вплоть до на-

пряжения 1130 В эмиссия электронов через поверхность катода практически отсутствует, концентрация электронов вблизи эмитирующей поверхности вследствие эффекта поля достигает нескольких сотен единиц N_D , а максимальный разогрев электронов не превышает тысячных долей процента. При напряжении 1140 В эмиссия электронов уже весьма велика. Порог эмиссии располагается вблизи напряжения, равного 1135 В. За порогом эмиссии электронная температура у эмитирующей поверхности повышается более чем в 100 раз, а концентрация электронов составляет лишь несколько десятков или даже единиц N_D , что свидетельствует о насыщении тока эмиссии. Рассчитанные значения плотности тока эмиссии также близки к току насыщения для выбранных параметров материала полупроводникового катода. В реальности, однако, такой сильный разогрев электронного газа не имеет места, так как он будет ограничиваться включением других механизмов рассеяния энергии, прежде всего процессов ударной ионизации.

Таким образом, проведенный вычислительный эксперимент указывает на существенную роль ударной ионизации в процессах электронного транспорта в полупроводнике в очень сильных электрических полях.

В модели, учитывающей процессы ударной ионизации характеристика $J_{es}(V_a)$ становится более плавной. Величина порога эмиссии, например для $V_a = 1600$ В, максимальная концентрация электронов составляет $344,7 \cdot N_D$, а максимальная электронная температура — $1,0077 \cdot T_0$. После порога (для $V_a = 1700$ В) максимальная электронная температура составляет $18,6 \cdot T_0$, а максимальные концентрации электронов и дырок, соответственно, равны $45,6 \cdot N_D$ и $2,41 \cdot N_D$. Значения плотности тока эмиссии ~ 15 А/см² существенно ниже насыщения и укладываются в рамки принятой квазигидродинамической модели, а также согласуются с реальными.

Характерные распределения модуля напряженности электрического поля, концентрации электронов и электронной температуры изображены на рис. 3, 4. До порога эмиссии ($V_a = 1600$ В) электроны собираются в узком слое вблизи эмитирующей поверхности напротив анода, их концентрация тем больше, чем больше потенциал на аноде (см. рис. 4, а), а их температура близка к равновесной. При этом электрическое поле слабо проникает в катод (см. рис. 3, а) и практически сосредоточено в области пространственного заряда, создаваемого электронами вследствие эффекта поля.

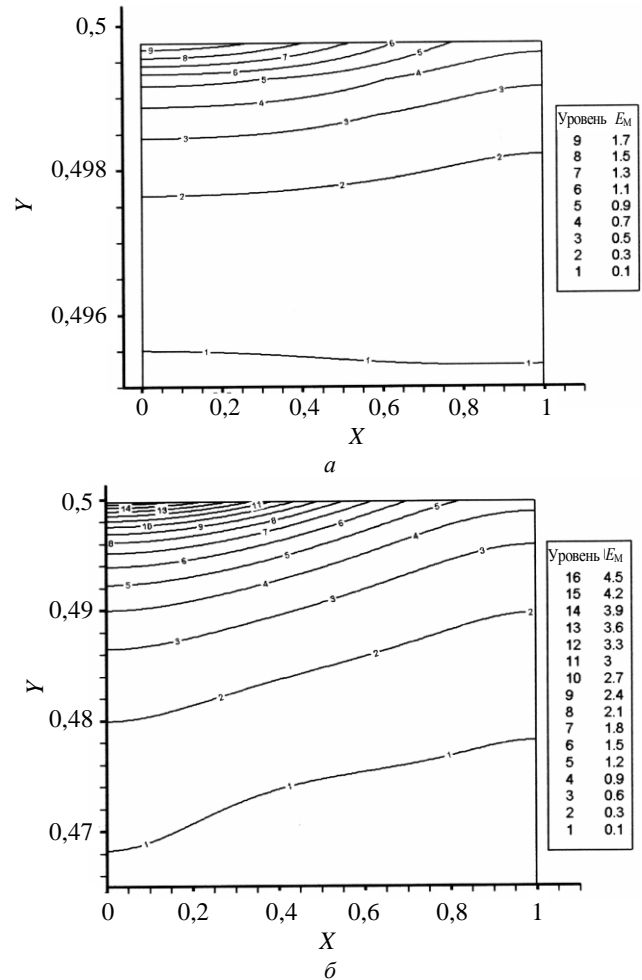


Рис. 3. Изолинии модуля напряженности электрического поля (E_M) в структуре с узким анодом и плоским катодом до достижения порога эмиссии (а) и за порогом эмиссии (б)

После порога эмиссии ($V_a = 1700$ В) избыточная концентрация электронов вблизи эмитирующей поверхности, напротив анода, ниже вследствие их туннелирования в вакуум. С удалением от анода по координате x вдоль эмитирующей поверхности электрическое поле убывает, коэффициент туннелирования и плотность тока эмиссии резко уменьшаются, а профиль концентрации вдоль эмитирующей поверхности возрастает к периферии (см. рис. 4, б). Температура электронов напротив анода наоборот высока и заметно спадает к периферии (см. рис. 4, в). Область, занимаемая квазиравновесным объемным зарядом, расширяется, и электрическое поле более глубоко проникает в катод (см. рис. 3, б).

Результаты расчетов первой тестовой серии показывают, что принятая модель и ее сеточный аналог достаточно адекватно описывают качественные особенности физических процессов внутри катода и электрического поля во всем узле, а эмиссионные характеристики по порядку величины соответствуют экспериментальным данным.

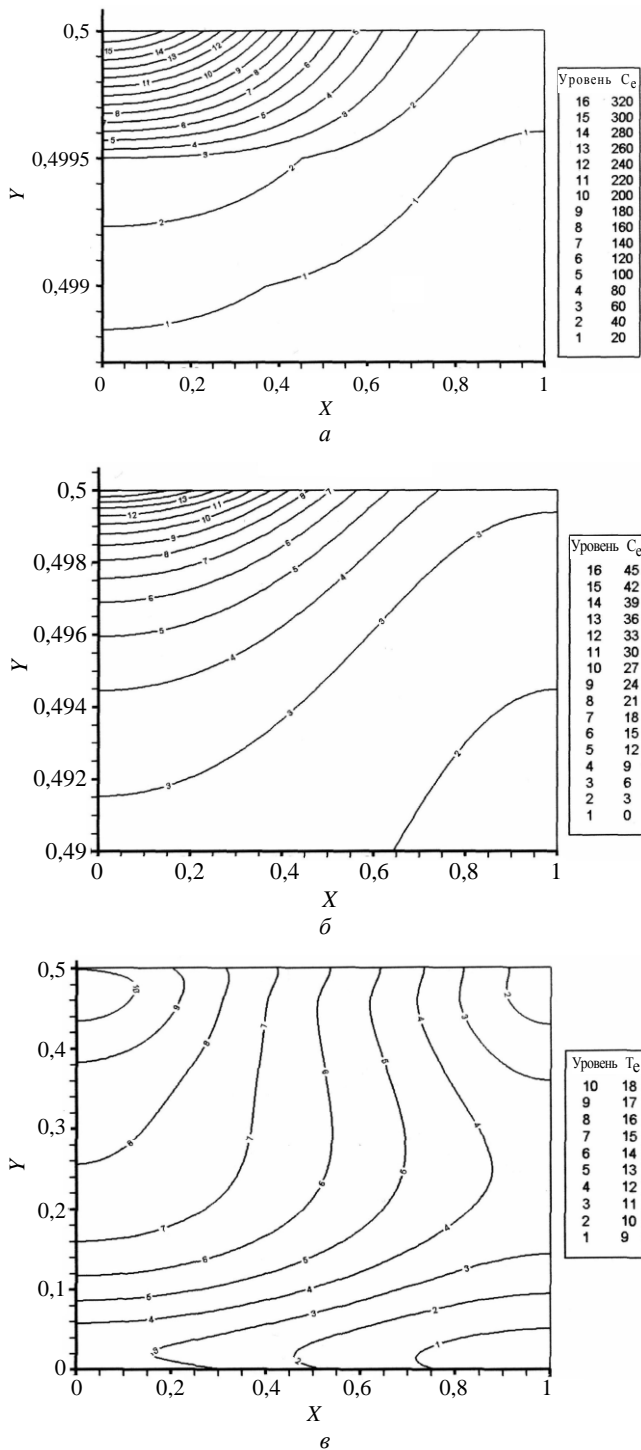


Рис. 4. Изолинии концентрации электронов (C_e) в структуре с узким анодом и плоским катодом до достижения порога эмиссии (а) и за порогом эмиссии (б) и изолинии электронной температуры (T_e) (в)

Вторая серия расчетов была проведена для диодной структуры с широким анодом и лезвийным катодом, изображенной на рис. 2, б. Для этого были выбраны следующие геометрические параметры: размеры области Ω составляли $1,5 \times 3$ мкм, полуширина анода 1,5 мкм, высота катода 1,5 мкм, высота острия 0,3 мкм, радиус скругления острия 20 нм, полуширина основания острия 0,06 мкм. Потенциал на аноде был равен 1000 В. Расчет про-

водили в плоской геометрии на треугольной сетке. Число узлов сетки во всей области составляло 35 480, в области катода — 17 660. Число треугольников во всей области равно 70 049, в области катода — 34 666. Цель расчетов — поиск области катода, подвергающейся наибольшему воздействию электрического поля.

На рис. 5 показаны изолинии модуля электрического поля и энергии электронов в области острия во время переходного процесса. Видно, что электрическое поле глубоко проникает в объем острия, разогрев электронов достигает значительной величины в верхней его части. Именно это приводит к наблюдаемым на опыте весьма высоким плотностям тока автоэмиссии у вершины острия, и можно полагать, служит причиной деградации вершины острия в процессе эмиссии [17].

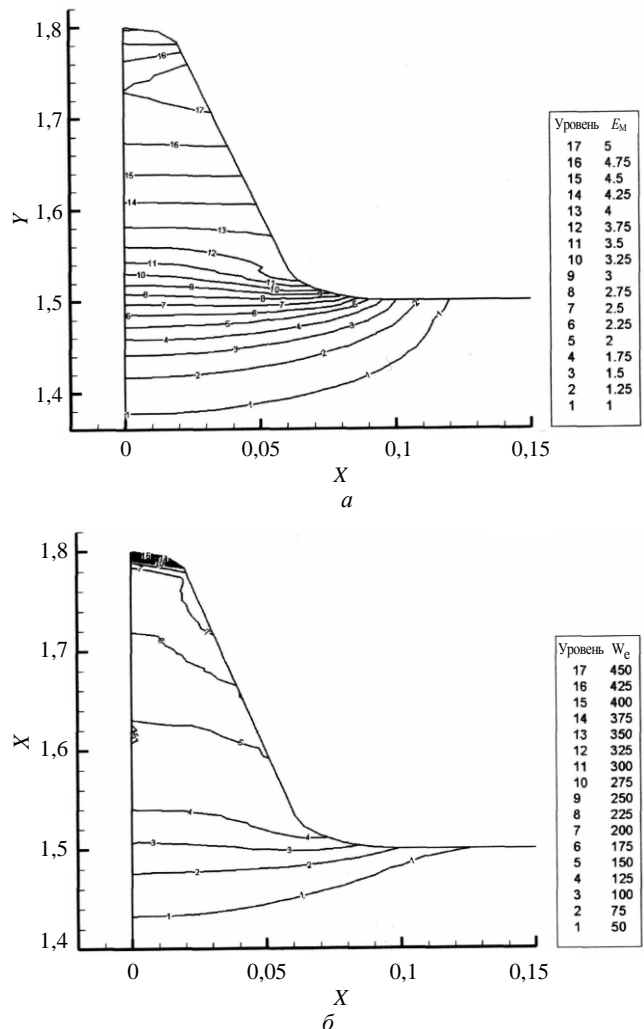


Рис. 5. Изолинии модуля напряженности электрического поля (E_m) (а) и энергии электронов (W_e) (б) в области острия катода

Заключение

Представлен программный комплекс MICRO_2D для решения задач электродинамики в современных вакуумных полупроводниковых приборах со

сложной субмикронной геометрией в условиях больших перепадов электрического поля. В основу комплекса положена квазигидродинамическая модель описания неравновесных процессов в полупроводниковых частях прибора. Для ее анализа используются оригинальные численные методы на нерегулярных сетках и параллельные алгоритмы, реализованные в виде программ для МВС. Разработанный программный комплекс позволяет качественно и количественно определять распределения электрического поля, плотности зарядов и разогрев в различных подобластях прибора и анализировать их влияние на рабочие характеристики. Эффективность работы комплекса продемонстрирована на примере задачи вакуумной микроэлектроники по расчету эмиссионных характеристик кремниевого автокатодного микроузла в случае двумерной реальной геометрии со сложной геометрической конфигурацией.

Работа выполнена при поддержке РФФИ
(проекты 05-07-90054-в, 06-01-00097-а,
07-01-12079-офи).

Литература

1. Temple D.// Mater. Scie. & Engineer. 1999. V. R24. P. 185—239.
2. Дюжев Н. А., Тишин Ю. И., Федирко В. А.// Электронная промышленность: наука, технология, изделия. 2004. № 3. С. 55—58.
3. Jensen K. L., Nemanich R. J., Holloway P., Troy Trottier, Mackie W., Temple D., Itoh J. Electron-Emissive Materials, Vacuum Microelectronics and Flat-Panel Displays/ Pub. Materials Research Society, 2004.
4. Gray H. F.// Techn. Dig. of the 11th IVMC'98. 1998. P. 278.
5. Wang L., Stevans R., Hug E. et al.// JVST. 2004. V. B22(3). P. 1407—1410.
6. Miura H., Ukeba T., Shimawaki H., Yokoo K.// Ibid. P. 1218—1221.
7. Matzukawa T., Kanemaru S., Tokunaga K., Itoh J.// Ibid. 2000. V. B18(2). P. 1111—1114.
8. Ding M., Kim H., Akinwade A. I.// IEEE El. Dev. Lett. 2000. V. 21(2). P. 66—99.
9. Федирко В. А., Поляков С. В. Численное моделирование электронного переноса в полупроводниковом автоэммитере// Прикладная физика. 2000. № 3. С. 7—13.
10. Fedirko V. A., Polyakov S. V.// Proc. SPIE. 2000. V. 4187. P. 94—99.
11. Fedirko V. A., Polyakov S. V.// Proc. VDE (ITG): Displays and Vacuum Electronics. 2001. V. 165. P. 431—438.
12. Федирко В. А., Поляков С. В. В кн.: Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем// Сб. науч. тр. МГТУ "Станкин" и ИММ РАН. — М.: Изд. МГТУ "Станкин". 2001. Вып. 3. С. 128—135.
13. Блэкмор Дж. Статистика электронов и дырок в полупроводниках. — М.: Мир, 1964.
14. Федирко В. А., Поляков С. В. В кн.: Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем// Сб. науч. тр. МГТУ "Станкин" и ИММ РАН. — М.: Изд. "Янус-К", 2004. Вып. 6. С. 138—147.
15. Дулан Е., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. — М.: Мир, 1983.
16. Карамзин Ю. Н., Поляков С. В.// Сеточные методы для краевых задач и приложения: Матер. Седьмого всерос. семинара (Казань, 21—24 сентября 2007 г.). — Казань, Изд-во Казанского математ. общества, 2007. С. 1—9 (в печати).
17. Дюжев Н. А., Махиборода М. А., Федирко В. А. В кн.: XIV научно-техническая конференция с участием зарубежных специалистов "Вакуумная наука и техника": Матер. конф./ Под ред. проф. Д. В. Быкова. — М.: МИЭМ, 2007. С. 248—251.

Статья поступила в редакцию 14 ноября 2007 г.

Program tool for simulation of cathode microcell with semiconductor auto-emitter

S. V. Polyakov

Institute for Mathematical Modeling of RAS, Moscow, Russia

V. A. Fedirko

Moscow State University of Technology "Stankin", Moscow, Russia

The decision of problems of electrodynamics in modern vacuum semiconductor devices with complex sub-micron geometry is considered. For the description of processes in the semiconductor it is used quasi hydrodynamics model. For the analysis of this model original numerical methods on irregular grids and the algorithms realized in the form of a complex of programs for multiprocessing computing systems are offered. It is shown that by means of the developed complex it is possible to define distributions of an electric field, charge densities and heat in various parts of the device and to estimate their influence on its work parameters.