

УДК 621.385

Численное моделирование электронного переноса в полупроводниковом автоэммиттере

В. А. Федирко

Московский государственный технологический университет "Станкин", Москва, Россия

С. В. Поляков

Институт математического моделирования РАН, Москва, Россия

Представлены параллельный численный алгоритм и результаты вычислительного эксперимента по исследованию электронного переноса в кремниевом автоэммиттере. Показано, что в области рабочих полей ток эмиссии определяется горячими электронами. Развитые методы могут быть применены для моделирования вакуумной микроячейки реального массива полупроводниковых полевых эмиттеров устройств вакуумной микроэлектроники.

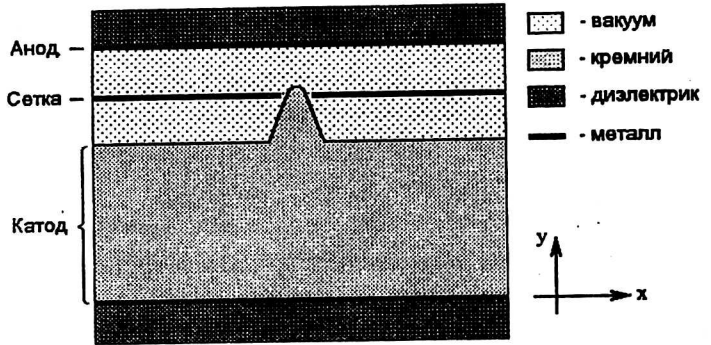
В последние годы наблюдается значительный прогресс в развитии вакуумной микроэлектроники (ВМ). Устройства ВМ уже перешагнули пороги исследовательских лабораторий и реализованы в виде опытных образцов и промышленных серий. Базовым элементом устройств ВМ служит массив полевых микроэммиттеров. Значительные преимущества дает использование массивов полупроводниковых автоэммиттеров с применением достижений высокоразвитой интегральной технологии, прежде всего кремниевой. Это создает также принципиальную возможность интеграции элементов ВМ с элементами традиционной микроэлектроники. В этой связи актуальной проблемой являются фундаментальное исследование и моделирование процесса полевой эмиссии в полупроводниковых микроатодах. В работе [1] нами была построена двумерная квазигидродинамическая модель полевой эмиссии электронов из кремниевого микроатода, учитывающая эффекты разогрева электронов в сильном электрическом поле. Для численной реализации модели был применен оригинальный метод решения, обеспечивающий консервативность и слабую монотонность разностной схемы, и продемонстрирована его эффективность для моделирования стационарных состояний эмиттера.

В настоящей работе представлен разработанный нами в целях повышения производительности вычислений численный алгоритм, ориентированный на параллельные вычисления и некоторые результаты вычислительного эксперимента по исследованию электронного переноса в кремниевом автоэммиттере, полученные при использовании этого алгоритма. Вычисления выполнялись на многопроцессорной вычислительной системе Parsytec CC с распределенной архитектурой и подтвердили высокую эффективность разработанного алгоритма. Его преимущества будут особенно существенны при моделировании всей вакуумной микроячейки, включающей решение квазиэлектростатической задачи как внутри полупроводникового катода, так и вне его.

Постановка задачи

Типичная конфигурация вакуумной микроячейки с полупроводниковым клиновидным (или лезвийным) автоэммиттером схематично изображена на рис. 1.

Рис. 1. Вакуумная микроячейка с клиновидным полупроводниковым полевым эмиттером



Постановка задачи моделирования полевой эмиссии в подобной ячейке подробно представлена в работах [1–4]. В области полупроводника система основных уравнений состоит из уравнения непрерывности для электронного тока j , уравнения энергетического баланса для потока энергии в электронной системе Q и уравнения Пуассона для самосогласованного электрического поля E , дополненные материальными уравнениями для плотности тока и потока энергии. В уравнении энергетического баланса используется приближение времени релаксации [5]. При моделировании всей вакуумной микроячейки для расчета эмиссионного тока можно пренебречь пространственным зарядом для релаксированных электронов в области вне катода и ограничиться в этой области решением уравнения Лапласа. Система основных уравнений дополняется граничными и начальными условиями. В качестве начального состояния используется равновесное состояние системы в отсутствие электрического поля. Граничные условия обеспечивают требуемое сопряжение компонент электрического поля на границах раздела и задают потенциалы на проводящих электродах, а также плотность тока и потока энергии на границе полупроводника.

Численный метод и параллельная реализация

Для численного решения задачи в качестве расчетной области выбрана правая часть катодной ячейки без лезвийного выступа (рис. 2). В ней была введена прямоугольная неравномерная сетка (с шагами h_x и h_y), сгущающаяся вблизи эмиттирующей поверхности катода. По времени была использована сетка с постоянным шагом τ . На этой сетке с помощью процедуры, подробно описанной в [3], были построены чисто неявные нелинейные консервативные локально-одномерные разностные схемы для решения уравнений неразрывности и энергии. Для решения уравнения Пуассона использовалась стандартная схема “крест”. Построенная система разностных уравнений разрешалась по нелинейности с помощью единого итерационного процесса типа установления. Для решения уравнений неразрывности и энергии на итерациях применялись процедуры прогонки по обеим координатам x и y . Для решения разностного уравнения Пуассона на итерациях использовались быстрое преобразование Фурье по координате x и прогонка по координате y . В результате точность построенного численного алгоритма имеет порядок

$O(h_x^2 + h_y^2 + \tau)$, число арифметических операций на каждой итерации есть $O(N_x \log_2 N_x N_y)$, а число итераций на каждом временном шаге слабо зависит от параметров сетки. При этом ограничения устойчивости на шаги построенной схемы отсутствуют.

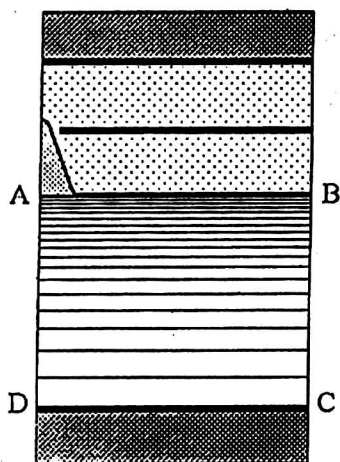


Рис. 2. Схема расчетной области (ABCD) и разностной сетки:

размер области: 0,5 x 1 мк; размеры сетки:
 $h_x = 0,004$ мк; $h_y = 0,0004 - 0,02$ мк;
 $h_{y \max} / h_{y \min} = 200$, эмитирующей является поверхность АВ ($\nu = 1$)

Для ускорения вычислений мы использовали многопроцессорную вычислительную систему (МВС). Эффективность вычислений на МВС обычно определяется отношением $100t_1 / (pt_p)\%$, где t_1 — время расчета на одном процессоре (скалярный алгоритм); t_p — время расчета на p процессорах (параллельный алгоритм).

Параллельная реализация построенного численного алгоритма заключается в следующем. Расчетная область по координате y разбивается на p подобластей (p — число процессоров) так, чтобы на каждую подобласть приходилось примерно одинаковое число узлов сетки. В каждой подобласти на этапе решения системы разностных уравнений по координате x вычисления производятся независимо (процессоры работают со 100%-ной эффективностью). На этапе решения разностных уравнений по координате распараллеливания y приходится использовать алгоритмы блочно-конвейерной или параллельной прогонки. Эффективность первого алгоритма существенно зависит от размеров оперативной памяти M_p на каждом процессоре и отношения N_y/p . Если оба эти параметра велики (процессоров немного, и оперативная память на каждом процессоре достаточно велика), то алгоритм блочно-конвейерной прогонки дает эффективность до 100%. В противном случае лучше использовать алгоритм параллельной прогонки, который в одномерном варианте дает гарантированные 33% эффективности. Однако в двумерном случае, который мы обсуждаем, за счет наличия второго 100%-го эффективного этапа суммарная эффективность решения задачи повышается примерно до 67%.

В расчетах, результаты которых приводятся ниже, использовались оба алгоритма, поскольку сетка по координате y была достаточно подробной ввиду большой величины внешнего поля. В итоге для $p = 10$ для первого алгоритма удалось достичь значений эффективности 90–93%, а для второго — реальная эффективность составляла 63–65%. При использовании большего числа процессоров ($p = 30$) для той же сетки (100x200 узлов) предпочтительней оказался второй алгоритм.

Результаты расчета

Представленная в предыдущем разделе вычислительная схема была использована нами для численного исследования эффектов электронного разогрева в полевой эмиссии из кремниевого клиновидного микроатода. Поскольку мы интересовались лишь выяснением характера и роли разогрева электронов полупроводника в условиях сильно неоднородной полевой эмиссии, электростатическая задача во внешности катода нами не рассматривалась. Неоднородная эмиссия моделировалась путем задания сильно неоднородного тянущего электрического поля на эмитирующей поверхности (сравни [1–2]), имитирующего распределение поля на лицевой поверхности реального катода (см. рис. 1).

В численных экспериментах рассчитывались двумерные распределения электрического поля и потенциала, электронных концентрации и температуры, плотности электронного тока и потока энергии вблизи эмитирующей поверхности для различных значений тянущего поля. Исследовано также энергетическое распределение эмитируемых электронов.

Типичное распределение тянущего электрического поля E_x на эмитирующей поверхности, которое задавалось в качестве граничного условия, изображено на рис. 3, а.

Как показывают расчеты (сравни также [1]), сильное поле сосредоточено в субмикронной области вблизи лицевой поверхности катода. В этой области электронная температура и концентрация существенно превышают их равновесные значения ($T_0 = 300$ К и $N_D = 10^{18}$ см $^{-3}$, соответственно). Это приводит

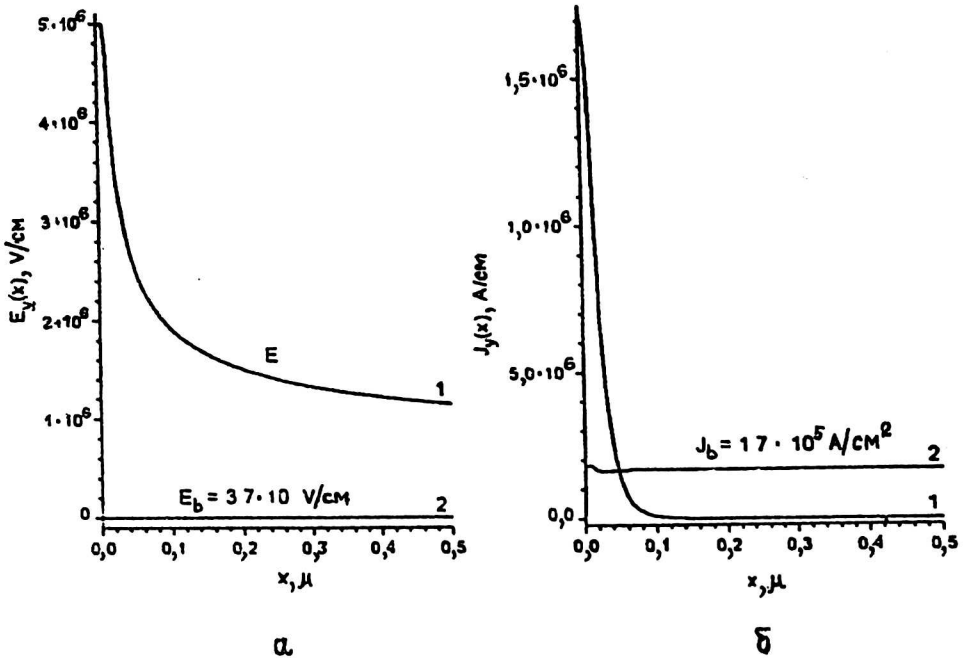


Рис. 3. Распределения электрического поля (а) и нормальной компоненты плотности тока (б) на лицевой АВ (кривые 1) и тыльной CD (кривые 2) поверхностях

к существенному росту плотности тока эмиссии (см. рис. 3, б), который в отсутствие разогрева при таких полях пренебрежимо мал. Распределение плотности эмиссионного тока существенно неоднородно как на эмитирующей поверхности, так и в объеме полупроводника вблизи нее. Электронная температура T у поверхности монотонно возрастает с ростом тянущего поля в рассматриваемом диапазоне полей (рис. 4, б).

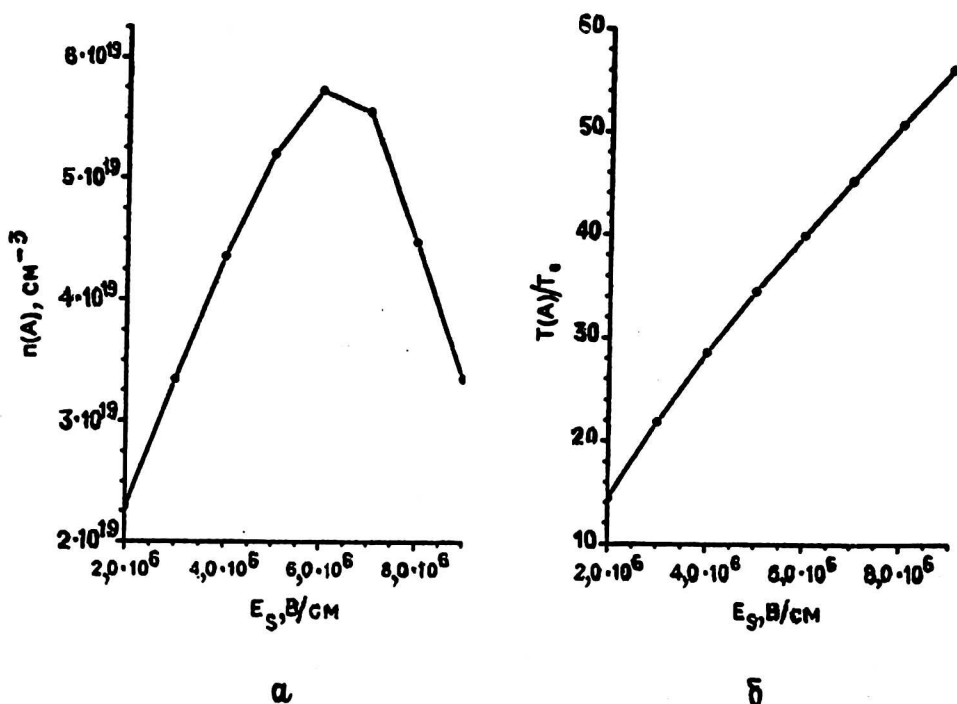


Рис. 4. Полевые зависимости максимума электронной концентрации (а) и электронной температуры (б) у эмитирующей поверхности (в точке А, см. рис. 2)

Электронная концентрация вблизи поверхности с ростом поля, как видно на рис. 4, а, меняется немонотонно, что объясняется делокализацией электронов из приповерхностной потенциальной ямы с ростом их средней энергии $k_B T$ (здесь k_B — постоянная Больцмана). Заметим, что в более сильных полях вследствие сильного разогрева электронного газа становятся существенными процессы ударной ионизации, учет которых выходит однако за рамки настоящей работы. Электрическое поле и плотность электронного тока на тыльной поверхности практически однородны и их связь вполне описывается законом Ома с соответствующим значением подвижности электронов. Вычислительным экспериментом была подтверждена существенная роль процессов двумерной термодиффузии в электронном транспорте горячих электронов при полевой эмиссии из полупроводникового автокатода: значения плотности тока и ее распределение на лицевой поверхности катода, рассчитанные в диффузионно-дрейфовой модели (без учета уравнения энергетического баланса), заметно отличаются от значений кривой на рис 3, б. Существенно различаются также пространственные распределения потенциала, электронной концентрации и плотности тока в объеме полупроводника.

Зависимость плотности тока эмиссии от тянущего электрического поля представлена на рис. 5, а. При достаточно больших полях наблюдается заметное отклонение вольт-амперной характеристики от зависимости Фаулера — Нордгейма (см. рис. 5, б), связанное с рассмотренными выше эффектами.

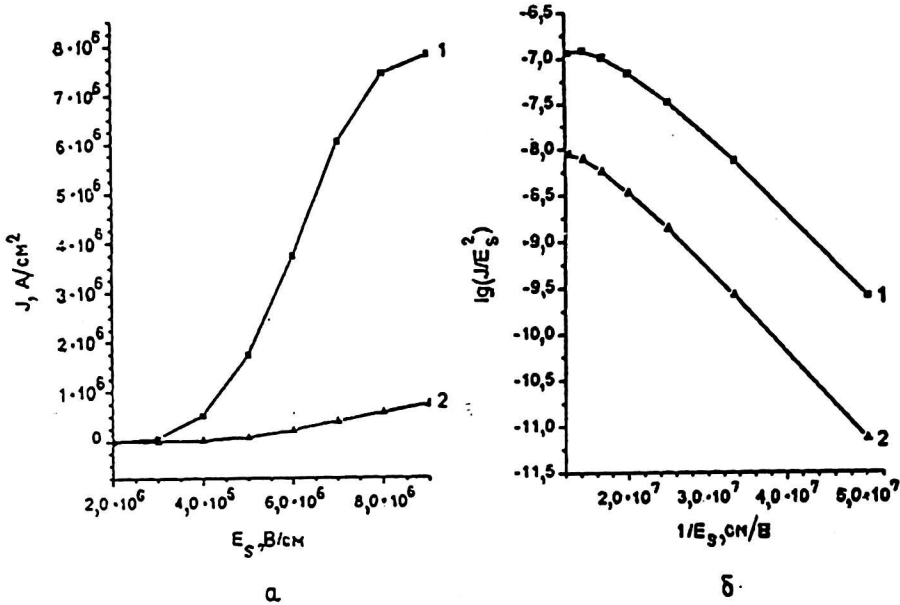


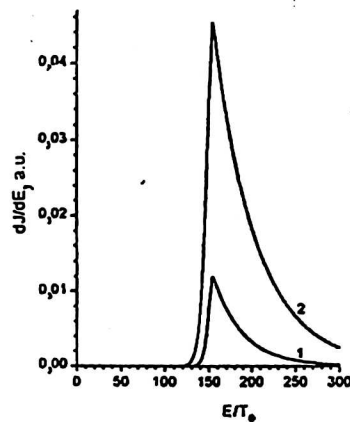
Рис. 5. Полевые зависимости плотности тока эмиссии:

1 — максимальной (в точке А); 2 — средней по эмитирующей поверхности ячейки АВ

На рис. 6 показаны характерные спектральные кривые плотности эмиссионного тока. Численным моделированием установлено, что пик энергетического распределения эмитируемых электронов смещается с ростом тянущего поля в сторону высоких энергий на величину, сравнимую с энергией электронного сродства в кремнии (≈ 4 эВ). Смещение происходит в узком диапазоне полей вблизи $\approx 10^6$ В/см, что соответствует проведенным нами теоретическим оценкам. Полученные результаты хорошо согласуются с проведенными нами теоретическими оценками и экспериментальными результатами по измерению энергетического спектра полевой эмиссии электронов из кремниевых микрокатодов, полученных недавно Г. Греем и Дж. Шоу [5].

Рис. 6. Энергетическое распределение плотности эмиссионного тока:

1 — $E_s = 5 \cdot 10^6$ В/см,
 2 — $E_s = 8 \cdot 10^6$ В/см



Таким образом, разработанные нами модели и численные методы показали высокую эффективность в численном исследовании электронного переноса в полупроводниковых микроавтокатодах при использовании высокопроизводительных систем с распределенной архитектурой. Численным экспериментом показано, что в области рабочих полей ток эмиссии определяется горячими электронами. Установлена существенная роль термодиффузии. Результаты находятся в согласии с выводами, полученными ранее в одномерной модели [5], но демонстрируют существенную роль двумерного подхода при моделировании реальных микрокатодов. Развитые в настоящей работе методы могут быть успешно применены для моделирования вакуумной микроячейки реального массива полупроводниковых полевых эмиттеров для устройств вакуумной микроэлектроники.

Л и т е р а т у р а

1. Федирко В. А., Карамзин Ю. Н., Захарова И. Г., Поляков С. В. Моделирование полевой эмиссии горячих электронов из кремниевого микрокатада // Прикладная физика. 1999, № 1. С. 102–111.
2. Fedirko V., Karamzin Yu., Polyakov S. and Zakharova I. In the book: Recen Advances in Numerical Methods and Applications // Proc. of 4th Intern. Conf. NMA. – Sofia, Bulgaria, Aug. 19–23, 1998). - World Scientific, Singapore/N-Jersey/London/H-Kong, 1998 P. 890–897.
3. Федирко В. А., Карамзин Ю. Н., Захарова И. Г., Поляков С. В. Двумерная модель полевой эмиссии электронов из кремниевого микрокатада // В кн. Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем: Сб. науч. тр. МГТУ “Станкин” и ИММ РАН. — М.: изд-во. МГТУ “Станкин”, 1998. С. 97–105.
4. Федирко В. А., Карамзин Ю. Н., Захарова И. Г., Поляков С. В. Параллельный алгоритм расчета полевой эмиссии из кремниевого микрокатада реальной геометрии. // Там же. 1999. С. 143–150.
5. Федирко В. А., Николаева В. А. Численное моделирование полевой эмиссии из кремния // Математическое моделирование. 1997. Т. 9. № 9. С. 75–82.
6. Shaw J. L. and Gray H. F. // Techn. Dig. of the 11th IVMC'98. 1998. P. 146.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 00-01-00397.

Numerical simulation of electron transport in semiconductor field emitter

V. A. Fedirko

Moscow State University of Technology “Stankin”, Moscow, Russia

S. V. Polyakov

Institute for Mathematical Modelling RAS, Moscow, Russia

Parallel algorithm and the results of numerical simulation of electron transport in silicon field emitter are presented. Hot electrons are shown to dominate the emission current. The numerical methods developed can be applied for effective simulation of a whole vacuum microcell of semiconductor field emitter array for vacuum microelectronics.