

# 表面势阱对硅场发射的影响\*

黄庆安

(东南大学微电子中心 南京 210096)

**摘要** 本文比较了半导体硅与金属场发射过程的差别,建立了表面势阱作用下硅场致发射的基本方程.用 WKB 近似,求出了硅场致发射的电流-电场关系.

EEACC: 2320, 2340E

## 1 引言

早在 1928 上 Fowler 和 Nordheim 就用量子力学建立了金属场发射的基本理论<sup>[1]</sup>,利用场发射现象,已经实现了场离子显微镜(FIM)、原子探针(AP)和扫描隧道显微镜(STM)等显微工具.五十年代,开始了半导体的场发射研究<sup>[2,3]</sup>,这些研究都基于 Fowler-Nordheim 的金属场发射的理论框架.由于大规模集成技术的发展,八十年代中期,以场发射现象和微细加工技术相结合而制备的大面积场发射阵列显示出方阔的应用前景<sup>[4]</sup>.因硅集成电路已经发展到了超大规模阶段,硅材料的加工技术已相当完美,人们希望用硅作为场发射阴极<sup>[5,6]</sup>,因此,硅的场发射研究又重新引起人们的重视.实验上发现,硅的场发射特性偏离 FN 理论<sup>[5]</sup>,早期曾认为表面态会对场发射电流-电场关系产生影响<sup>[2,3]</sup>,而最近的研究则指出表面态仅改变发射电子的能量分布,并不影响电流-电场的 FN 关系<sup>[7]</sup>.G. Yang 研究了硅表面本征氧化层的作用<sup>[8]</sup>,K. L. Jensen 研究了硅表面电子偏离平衡态的情况<sup>[9]</sup>.本文比较了硅与金属场发射的差别,将半导体表面的能带弯曲考虑为一势阱,并由此建立了场发射的基本方程,用 WKB 近似,给出了场发射的电流-电场关系,最后详细讨论了计算结果.

## 2 硅场致发射理论

### 2.1 硅与金属场发射的比较

在场发射时,外电场会在物体表面上感生表面电荷,使表面的能带向下弯曲.即外电场在物体内部产生渗透.渗透的深度与电子浓度  $n$  有关,金属的  $n \approx 1 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$ ,电场穿透的深度约为  $1 \times 10^{-8} \text{cm}$ ,故一般可忽略电场的渗透.而硅的  $n \approx 1 \times 10^{14} \sim 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ,则穿透深度

\* 东南大学青年科学基金资助课题

黄庆安 男,1963 年生,副教授,博士,现主要从事真空微电子及微电子机械加工技术研究工作  
1994 年 1 月 20 日收到初稿,1994 年 6 月 15 日收到修改稿

为  $10^{-4} \sim 10^{-6} \text{cm}$ . 因此, 硅的场发射问题, 必须考虑电场的渗透. Stratton 最早指出了硅表面的能带弯曲会对场发射产生影响<sup>[2]</sup>, 但 Stratton 仍用了经典的处理方法, 得到的结果与 FN 理论一致.

考虑硅表面能带弯曲时, 硅场发射时的表面处势能分布如图 1 所示.

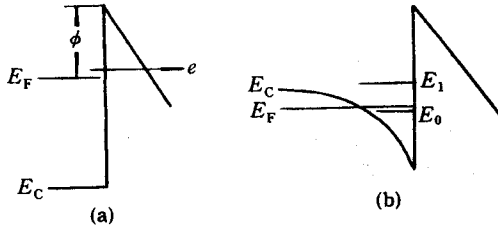


图 1 金属与硅场发射的比较  
(a)金属 (b)硅

如果从势能分布的观点看, 电子从体内运动到表面首先是遇到一势阱, 然后再由隧道效应通过势垒发射到真空中. 根据量子力学, 电子处在势阱中会形成分离的能级, 即电子在硅表面处存在量子化效应. 由于在场发射时, 外加电场通常在  $1 \times 10^7 \text{V/cm}$  量级, 表面势垒的平均宽度约几十个  $\text{\AA}$ . 因此, 硅表面是准两维的电子气.

关于半导体中准两维电子已经有比较系统的研究<sup>[10]</sup>. 其一般性的结论是: 电子在垂直于界面方向的运动, 能量是量子化的, 在平行于界面方向能量是连续的, 表面处的电子能量对应一系列子带.

### 2.2 硅场发射的基本方程

计算硅场发射的参考坐标系如图 2 所示, 界面处设为原点 ( $z=0$ ), 势能的零能选在界面处硅导带的底部. 在半导体硅内部, 能带的弯曲由电场  $\Phi(z)$  来表征, 电子的势能为  $-q\Phi(z)$ . 如果用  $\xi_i(z)$  和  $E_i$  分别表示垂直于界面方向第  $i$  个波函数和能级, 则根据半导体中的有效质量近似, 一维的薛定谔方程可表示为,

$$\frac{d^2 \xi_i(z)}{dz^2} + \frac{2m_z^*}{\hbar^2} [E_i + q\Phi(z)] = 0 \quad (1)$$

式中  $\hbar$  是约化普朗克常数,  $m_z^*$  是垂直于界面方向的电有效质量.

电势  $\Phi(z)$  满足泊松方程,

$$\frac{d^2 \Phi(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (2)$$

式中  $\epsilon_r = 11.9$  是硅的相对介电常数,  $\epsilon_0$  是真空介电常数,  $\rho(z)$  是电荷密度,

$$\rho(z) = q(N - \sum N_i |\xi_i(z)|^2) \quad (3)$$

式中  $N$  是净电离杂质,  $N$  表示为<sup>[11]</sup>

$$N = N_D^+ - N_A^- = \frac{N_D}{1 + 2e^{-\frac{E_D - E_F}{kT} b}} - \frac{N_A}{1 + 2e^{-\frac{E_F - E_A}{kT} b}} \quad (4)$$

其中  $N_D$  和  $N_A$  分别是硅中的掺杂施主浓度和受主浓度,  $E_D$  和  $E_A$  分别是施主和受主能级,  $b$  表示体内平衡的情况.

$N_i$  和第  $i$  个子带的载流子浓度, 对两维电子系统,  $N_i$  可表示为<sup>[10]</sup>

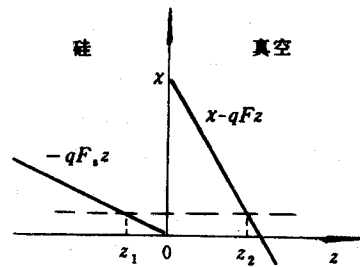


图 2 计算硅场发射的势能分布  
 $z_1, 0, z_2$  为经典转折点

$$N_i = n_i m_{di}^* \left( \frac{kT}{\pi \hbar^2} \right) \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{kT} \right) \right] \quad (5)$$

式中  $n_i$  是能谷的简并度,  $m_{di}^* = (m_{xi}^* m_{yi}^*)^{1/2}$  是状态密度有效质量,  $m_{xi}^*$  和  $m_{yi}^*$  分别是平行于界面的  $x$  方向和  $y$  方向的有效质量. 表 1 给出了不同硅取向的有效质量及能谷简并度,  $k$  是玻耳兹曼常数,  $T$  是绝对温度.

表 1 硅中电子有效质量

硅取向	(100)		(110)		(111)
	低	高	低	高	相同
能谷位置	低	高	低	高	相同
简并因子 $n_i$	2	4	4	2	6
垂直有效质量 $m_z^*$	0.916	0.190	0.315	0.190	0.258
平行有效质量 $m_x^*$	0.190	0.190	0.190	0.190	0.190
平行有效质量 $m_y^*$	0.190	0.916	0.553	0.916	0.674
状态密度有效质量	0.190	0.417	0.324	0.417	0.358

注: 有效质量均指与自由电子的质量  $m_0$  的比值

将式(4)和式(5)代入(3)得到

$$\frac{d^2 \Phi(z)}{dz^2} = - \frac{q}{\epsilon_r \epsilon_0} \left[ \frac{N_D}{1 + 2e^{-\left(\frac{E_D - E_A}{kT}\right)b}} - \frac{N_A}{1 + 2e^{-\left(\frac{E_F - E_A}{kT}\right)b}} - \sum_i n_i m_{di}^* \left( \frac{kT}{\pi \hbar^2} \right) \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{kT} \right) \right) |\xi_i(z)|^2 \right] \quad (6)$$

泊松方程的边界条件为

$$\left. \frac{d\Phi(z)}{dz} \right|_{z=0} = F, \quad (7a)$$

$$\Phi(z)|_{z=0} = 0 \quad (7b)$$

式中  $F$  表示半导体表面处的电场, (7b) 的条件是把电势的参考点选在界面处.

根据量子力学原理, 束缚态对电流的贡献等于零, 但我们讨论的是准二维电子气, 电子在平行于界面方向的能量是连续的, 因此, 总能量是连续的, 即电子的总能量  $E_i(\vec{k})$  为

$$E_i(\vec{k}) = E_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} \quad (8)$$

如果用  $T(E_i)$  表示电子在分离能级  $E_i$  上的振荡周期,  $D(E_i)$  表示能级  $E_i$  上的电子通过外部势垒的透射系数, 则场发射电流可表示为

$$J = \frac{qkT}{\pi \hbar^2} \sum_i n_i m_{di}^* \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{kT} \right) \right) \frac{D(E_i)}{T(E_i)} \quad (9)$$

### 2.3 WKB 近似

从(9)式看出, 要得到场发射电流密度, 必须知道量子能级  $E_i$ , 这由方程(1)和(6)自洽的结果确定. 一般情况下, 自洽方程(1)和(6)是没有解析解的. 如果采用某些近似, 可使自洽方程分离. 在研究 MOS 表面的二维电子气中, 常假定半导体表面的电势是线性的, 即

$$\Phi(z) = -Fz \quad (10)$$

这种线性势场近似, 不仅使用问题简化, 同时用它求得的基态和第一激发态近似程度较好, 是目前研究二维电子气常用的一种近似. 如果场发射时, 半导体表面的电势由(10)式描

述,则半导体硅与真空界面附近的势能分布如图 2 所示.

由索末菲-玻尔量子化条件<sup>[12]</sup>

$$2 \int_{-z_1}^0 \sqrt{2m_z^* (E_i + q\Phi(z))} dz = (i + \frac{3}{4})h \quad (i = 0, 1, \dots) \quad (11)$$

将(10)式代入(11)式得到

$$E_i = (\frac{\hbar^2}{2m_z^*})^{1/3} [\frac{3}{2} \pi q F_s (i + \frac{3}{4})]^{2/3} \quad (i = 0, 1, \dots) \quad (12)$$

根据 WKB 近似,振荡周期为

$$T(E_i) = (2m_z^*)^{1/2} \int_{-z_1}^0 \frac{dz^2}{\sqrt{E_i + q\Phi(z)}} \quad (13)$$

将(10)式代入(13)式得到

$$T(E_i) = \frac{2(2m_z^* E_i)^{1/2}}{qF_s} \quad (14)$$

由图 2 知,界面处真空一边的势能为

$$U(z) = \chi - qFz - (\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 1}) \frac{q^2}{4z} \quad (15)$$

式中  $\chi = 3.4\text{eV}$  是硅的电子亲和势,  $F$  是外加电场,上式中最后一项表示镜像力的作用. 根据 WKB 近似,电子透过势垒的几率是

$$D(E_i) = \exp[-\frac{2}{\hbar} |\int_0^{z_2} \sqrt{2m_0 [E_i - U(z)]} dz|] \quad (16)$$

将(15)代入(16)式,并忽略镜像力的作用,得到

$$D(E_i) = \exp[-\frac{4\sqrt{2m_0}}{3\hbar F q} (\chi - E_i)^{3/2}] \quad (17)$$

式中  $m_0$  是自由电子质量.

计算场发射电流,还需知道费米能级的位置. 由半导体/真空界面的电位移连续条件,得到

$$F_s = F/\epsilon_r \quad (18)$$

根据高斯定理,有

$$F_s = q(N_s + N_I)/\epsilon_r \epsilon_0 \quad (19)$$

式中  $N_I$  是表面处单位面积电子数,

$$N_I = \frac{kT}{\pi \hbar^2} \sum_i n_{r,i} m_{d,i}^* \ln[1 + \exp(\frac{E_F - E_i}{kT})] \quad (20)$$

$N_s$  是硅表面处单位面积的电离杂质数. 对于 N 型半导体(若仅有  $N_D$  型掺杂,  $N_A = 0$ ), 表面处于堆积状态,  $N_s = 0$ , 则由(18), (19)和(20)式,得到

$$F \epsilon_0 = \frac{qkT}{\pi \hbar^2} \sum_i n_{r,i} m_{d,i}^* \ln[1 + \exp(\frac{E_F - E_i}{kT})] \quad (21)$$

对于 P 型半导体(若仅有  $N_A$  掺杂,  $N_D = 0$ ), 则

$$N_s = \frac{N_A W}{12e^{-\langle \frac{E_F - E_A}{kT} \rangle} b} \quad (22)$$

式中  $W$  是硅表面的耗尽层宽度. 对于 P 型硅的场发射, 硅表面有两部分电荷: 一部分是电离受主电荷, 另一部分是反型层电子电荷, 对于场发射的情况, 一般  $N_s \ll N_A$ , 所以, 无论对 P 型硅还是对 N 型硅, 都用(21)式近似来确定费米能级. 图 3 给出了 N 型(100)硅表面  $E_F, E_0$  的相对位置.

在  $T=0\text{K}$  时, 所有电子都处于基态, 而即使在  $T=300\text{K}$ , 计算表明, 有 90% 以上的电子仍处于基态, 这是由于强电场作用下, 量子能级的间隔变大. 如果只用基态的能级计算, 可给出较好的近似.

将(14), (17)和(21)式代入(9)式, 得到

$$J = \frac{q\epsilon_0 F^2}{2\epsilon_s (2m_z^* E_0)^{1/2}} \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m_0}}{3\hbar F q} (\chi - E_0)^{3/2}\right] \quad (23a)$$

将有关常数代入,

$$J = \frac{C \times 10^{-7} F^2}{\sqrt{E_0}} \exp\left[-\frac{6.83 \times 10^7}{F} (\chi - E_0)^{3/2}\right] \quad (23b)$$

其中, 对(100), (110)和(111)衬底,  $C$  分别为 1.19, 2.03, 2.24.

$$E_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m_z^*}\right)^{1/3} \left(\frac{9\pi q F}{8\epsilon_s}\right)^{2/3}$$

而 FN 理论的结果为<sup>[1,2]</sup>

$$J_{\text{FN}} = \frac{q^3 F^2}{8\pi\hbar\chi} \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m_0}}{3\hbar F q} \chi^{3/2}\right] \quad (24a)$$

及

$$J_{\text{FN}} = \frac{1.54 \times 10^{-6} F^2}{\chi} \exp\left[-\frac{6.83 \times 10^7}{F} \chi^{3/2}\right] \quad (24b)$$

(23a)和(24b)中的  $F$  单位为  $\text{V/cm}$ ,  $\chi, E_0$  的单位为  $\text{eV}$ ,  $J$  的单位为  $\text{A/cm}^2$ .

(23)式和(24)式中的  $J-F$  依赖关系有非常类似的形式, 但具有不同的系数.

### 3 结果与讨论

FN 理论的推导基于下述假定: (1) 半导体表面是光滑的, 忽略其原子尺度的不规则, (2) 逸出功分布均匀, (3) 考虑经典镜像力. 本文推导忽略了镜像力, 其余与 FN 假定相同. 忽略镜像力主要是因为目前对硅场发射过程是否存在镜像力仍有争议; 另一方面, 即使考虑镜像力其结果与没有考虑镜像力的结果差别不大. 本文的理论与 FN 理论<sup>[2]</sup>的主要差别在于对硅表面区的处理上. 本文主要考虑了表面量子化效应. 图 4 给出了本文计算的结果与 FN 理论的比较. 从场发射的图像看<sup>[13]</sup>, 发射尖端显示出不同的晶面, 本文的计算表明, 不同衬底的晶向, 发射电流不同, 而 FN 理论的  $J-E$  关系与晶向无关.

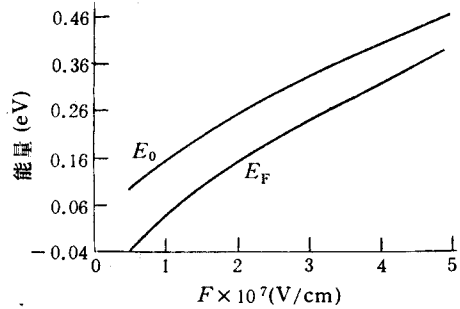


图 3 N 型(100)硅表面  $E_F, E_0$  随电场的变化 ( $T=300\text{K}$ )

另一方面,目前对硅场发射的实验均表明<sup>[4,5]</sup>, $J$ - $E$  曲线明显偏离 FN 理论,其主要特征

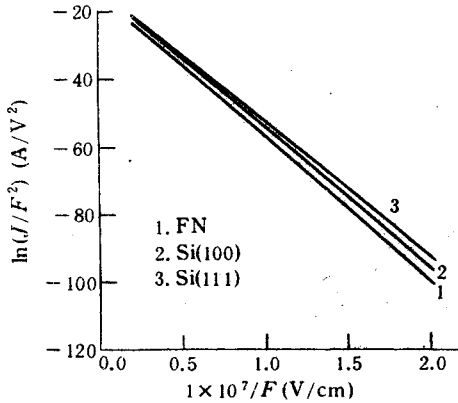


图 4 本文计算结果与 FN 理论的比较

是:在低场区,电流大于 FN 理论;在高场区,电流趋于饱和. 本文的计算说明了表面量子化效应使场发射的电流增大,定性地解释了低场区的实验现象;而在高场区(约 $>5 \times 10^7$  V/cm),本文结果与 FN 结果都显示出电流增大而不趋于饱和,这种现象主要是高电场作用下的硅场发射与电子在硅中的输运性质有关<sup>[14,15]</sup>. 由于本文的理论并没有考虑高场下硅中载流子输运特性,故不能解释高场区发射电流的饱和现象. 在高场区的理论尚需进一步深入研究.

## 4 结论

本文将硅表面的能带弯曲考虑为势阱,建立了硅场致发射的基本方程,用 WKB 近似,求出了场发射的电流-电场关系式. 定性地解释了低场区发射电流偏离的 Fowler-Nordheim 理论的实验现象.

## 参 考 文 献

- [1] 刘学恣著,阴极电子学,第 2 章,北京:科学出版社,(1980).
- [2] R. Stratton, Proc. Phys. Soc., (London), 1955, **B68**, :746.
- [3] A. Modinos, Surf. Sci., 1974, **42**:205.
- [4] H. F. Gray, C. A. Spindt, IEEE Trans. Electron Devices, 1991, **ED-38**(10):2275.
- [5] H. F. Gray, et al., Proc. IEEE Int. Electron Dev. Meeting, 1986, 776.
- [6] 黄庆安,向涛,秦明,张会珍,陈军宁,章勤义,科学通报,1993, **38**(9):780.
- [7] V. G. Litovchenko, J. Vac. Sci. Technol., 1993, **B11**(2):362.
- [8] G. Yang, K. K. Chin, and R. B. Marcus, IEEE Trans. Electron Devices, 1991, **38**(10):2373.
- [9] K. L. Jensen, A. K. Ganguly, J. Appl. Phys., 1993, **73**(9):4409.
- [10] 虞丽生著,半导体异质结物理,第 5 章,北京:科学出版社,(1990).
- [11] 施敏著[美],半导体器件物理,第 1 章,北京:电子工业出版社,(1987).
- [12] 曾谨言著,量子力学,第 1 章,卷 I,北京:科学出版社,(1993).
- [13] L. A. D'Asaero, J. Appl. Phys., 1958, **29**:33.
- [14] L. M. Baskin, Proc. 4th Int. Vacuum Microelectronics Conf., 1991, 36.
- [15] 黄庆安,东南大学学报,1993, **23**(Suppl):25.

## Influence of Surface Potential Well on Field Emission from Silicon

Huang Qing'an

*(Microelectronics Center, Southeast University, Nanjing 210096)*

Received 20 January 1994, revised manuscript received 15 June 1994

**Abstract** Field emission from metals is compared with that from silicon. Basic equation for field emission from silicon is developed in which the surface potential well is considered. The emitted current-field dependence is obtained on the basis of the WKB approximation.

**EEACC:** 2320, 2340E