

# МОДЕЛИРОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ МВС ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ С ПОВЕРХНОСТИ НАНОСТРУКТУР

С.В. Поляков

Одним из перспективных направлений современной наноэлектроники является разработка и использование вакуумных автоэмиссионных приборов с размерами активных элементов (катодов) порядка 15 нм и менее. Такие приборы применяются для создания систем отображения информации (дисплей сверхвысокого разрешения и цветопередачи), источников СВЧ-излучения (наноитография), приборов электронного зондирования поверхностей (электронный туннельный микроскоп высокого разрешения) [1]. В последнее время всерьез рассматривается также применение эмиссионных приборов для реализации сверхкомпактных источников тока, квантовых транзисторов и элементов памяти компьютеров [1,2]. При этом в качестве катодов могут применяться самые различные материалы, в том числе металлы (медь, ванадий и др.), полупроводники (кремний, соединения галлия с арсенидом, индия с фосфором и др.), а также специфические наноматериалы, проявляющие металлические и полупроводниковые свойства (аллотропные формы углерода, азота, оксида фосфора). Результатом применения этих материалов могут стать сверхкомпактные и сверхбыстрые элементы компьютеров и систем связи, которые позволят перейти в терагерцовый диапазон частот при существенном снижении суммарных энергозатрат.

Для создания указанных выше электронных приборов необходимо, прежде всего, всестороннее изучение свойств соответствующих наноматериалов и их взаимодействие с окружающей средой в рамках общей конструкции. Эта задача равно распределяется как на экспериментальные, так и на теоретические исследования. В последнем случае все большую роль играет компьютерное моделирование, в том числе с помощью высокопроизводительных вычислительных систем. Большая вычислительная нагрузка определяется тем, что математические модели, описывающие процессы в новых электронных приборах, стали существенно сложнее. Это определяется тем, что наряду с традиционными факторами (трехмерность, нестационарность, нелинейность, пространственно-временная неустойчивость и некорректность задач) появились такие особенности, как сложная реальная геометрия, длинная иерархия пространственно-временных размеров, нелокальность процессов, наличие очень большого числа компонент среды и множества фаз одной и той же физической величины. В результате современная математическая модель включает целый набор физических описаний, имеющих различную природу и использующих различный математический аппарат (описания механики сплошной среды, квантовые и статистические модели, гибридные подходы) и, как правило, плохо стыкующиеся между собой. Преодоление этих трудностей становится первостепенной задачей математического моделирования. Одним из подходов к ее решению является применение методов расщепления по физическим процессам и согласования исходных данных и результатов на всех уровнях размерной иерархии. При этом очевидно, что без использования высокопроизводительных вычислений и создания специальных баз данных по натурным и вычислительным экспериментам здесь не обойтись.

Представляемая работа лежит в области обсуждаемого поля проблем. Она посвящена моделированию автоэмиссионных электронных процессов на поверхности наноструктур, находящихся в вакууме. В качестве конкретных задач рассматривается полевая электронная эмиссия с поверхности кремниевых автокатодов и углеродных нанотрубок, имеющих нанометровые размеры активного элемента (лезвия или острия). Если рассматривать общую постановку задачи, то она разбивается на несколько подзадач. Во-первых, необходимо описать процесс генерации свободных электронов в катоде (нанотрубке), которые составят эмиссионный электронный пучок. Во-вторых, необходимо учесть конкретный механизм эмиссии, который есть туннелирование свободных электронов через эмитирующую поверхность катода (нанотрубки). В-третьих, необходимо решить задачу электрооптики, то есть распространения электронного пучка в окружающей среде. В-четвертых, следует учесть обратное влияние электронного пучка на процесс туннелирования. В-пятых, необходимо рассчитывать электрическое поле во всей конфигурации, включая анод, катод и вакуумный слой. В-шестых, следует учесть также процессы реструктуризации и разрушения катода как на поверхности, так и в объеме. Очевидно, что все эти задачи имеют разные пространственные и временные масштабы и их решение взаимосвязано.

Пока размеры лезвия (острия) катода больше или порядка 20 нм, каждую из поставленных проблем можно решать почти независимо. При уменьшении размеров активного элемента такой подход становится грубым и не отвечает физике происходящих в катоде процессов. В используемом нами приближении используется предположение о том, что туннелирующие электроны оказывают обратное влияние на потенциальный барьер на очень малых расстояниях (порядка нескольких нанометров), и это влияние можно учесть в виде коррекции барьера с помощью самосогласованного заряда изображения. Это предположение позволяет решать задачу электрооптики независимо. Кроме того, здесь не рассматривается задача разрушения катода, поскольку характерное время этого процесса измеряется несколькими часами.

В итоге нами рассматривается только центральная часть задачи, связанная с процессами генерации свободных электронов (и дырок), туннелирование электронов через потенциальный барьер эмитирующей поверхности, изменениями самосогласованного электрического поля во всей структуре. Электрооптическая часть задачи не рассматривается, поскольку она будет важна на последующих этапах моделирования прибора, когда исследуется уже не одна ячейка с катодом, а целая матрица катодов. Задача разрушения прибора также будет исследована отдельно.

Выборную постановку задачи будем рассматривать в случае аксиально-симметричной геометрии. Это позволит несколько упростить математическую модель и рассмотреть с одинаковых позиций эмиссию с острия кремниевого катода и с поверхности одностенной углеродной нанотрубки. Примеры геометрических конфигураций прибора показаны на рис. 1.

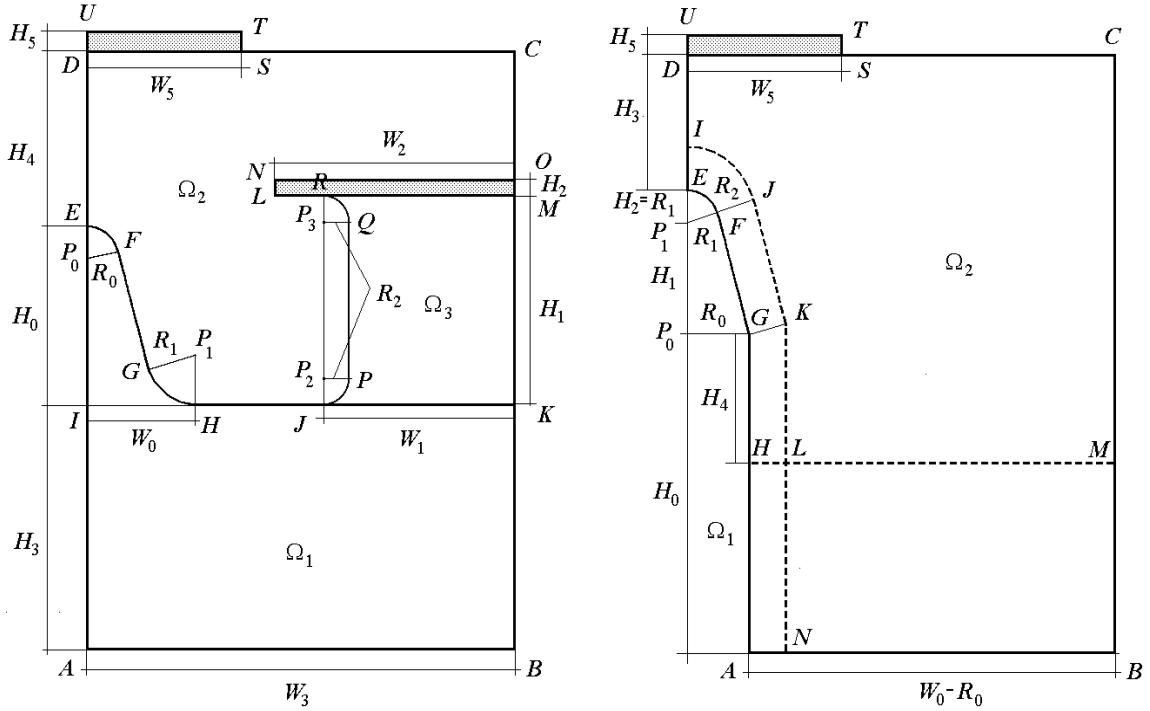


Рис. 1. Расчетная геометрия кремниевого острейного катода (слева) и одностенной углеродной нанотрубки (справа). Характерные размеры в поперечном сечении активных частей конструкции варьируются от нескольких сотен до нескольких единиц нанометров.

Вертикальные размеры конструкции на порядок больше поперечных. Область  $\Omega_1$  – кремний (внутренняя часть нанотрубки), область  $\Omega_2$  – вакуум, область  $\Omega_3$  – изолирующий диэлектрик под управляющим электродом (заштрихован). Сверху конструкции расположен основной электрод (заштрихован), снизу заземленная подложка.

Математическая модель полевой эмиссии из кремния подробно описана в работе [3]. Здесь приведем лишь основные уравнения в безразмерных переменных:

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

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

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

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

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

$$\rho = \begin{cases} 1-n+p, & (r,z) \in \Omega_1, \\ 0, & (r,z) \in \Omega_2 \cup \Omega_3, \end{cases} \quad R_n = w_n - w_l, \quad w_l = nT_l,$$

$$\varepsilon = 1, \quad (r,z) \in \Omega_1; \quad \varepsilon = \varepsilon_2 / \varepsilon_1, \quad (r,z) \in \Omega_2; \quad \varepsilon = \varepsilon_3 / \varepsilon_1, \quad (r,z) \in \Omega_3.$$

Здесь  $n$ ,  $p$  – локальные концентрации электронов и дырок,  $w_n = nT_n$  – энергия электронов,  $T_n$  и  $T_l$  – электронная и решеточная температуры,  $\varphi$  – потенциал и вектор напряженности электрического поля,  $j_n$ ,  $j_p$  – плотности электронного и дырочного токов,  $Q_n$  – вектор плотности потока энергии электронов,  $Q_l$  – вектор плотности потока тепла в кристаллической решетке,  $\mu_n$ ,  $\mu_p$  – подвижности,  $D_n$ ,  $D_p$  – коэффициенты диффузии соответственно электронов и дырок,  $G_n$  – темп ударной ионизации,  $\rho$  – безразмерная плотность заряда,  $\varepsilon_k$  – диэлектрические проницаемости соответственно полупроводника, вакуума и изолятора. Остальные параметры являются константами или функциями электронной температуры. Уравнения (1) – (4) справедливы в слое катода (область  $\Omega_1$ ), а уравнение (5) – во всей области  $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$ . Система уравнений (1)–(5) дополняется следующими условиями на границах

$$\begin{aligned} (\mathbf{j}_n, \mathbf{v}) &= 0, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{v}) = 0, \quad (Q_n, \mathbf{v}) = 0, \quad (Q_l, \mathbf{v}) = 0, \quad (\nabla \varphi, \mathbf{v}) = 0, \quad r = 0, R; \\ (\mathbf{j}_n, \mathbf{v}) &= j_{ns}, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{v}) = j_{ps}, \quad (Q_n, \mathbf{v}) = Q_{ns}, \quad (Q_l, \mathbf{v}) = Q_{ls}, \quad \varphi = 0, \quad z = 0; \\ (\mathbf{j}_n, \mathbf{v}) &= j_{ns}, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{v}) = j_{ps}, \quad (Q_n, \mathbf{v}) = Q_{ns}, \quad (Q_l, \mathbf{v}) = Q_{ls}, \\ \varepsilon_1 E_v^{(1)} &= \varepsilon_2 E_v^{(2)}, \quad E_\tau^{(1)} = E_\tau^{(2)}, \quad (r,z) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2; \\ \varepsilon_1 E_v^{(1)} &= \varepsilon_3 E_v^{(3)}, \quad E_\tau^{(1)} = E_\tau^{(3)}, \quad (r,z) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_3; \\ \varepsilon_2 E_v^{(2)} &= \varepsilon_3 E_v^{(3)}, \quad E_\tau^{(2)} = E_\tau^{(3)}, \quad (r,z) \in \partial\Omega_2 \cap \partial\Omega_3; \\ \varphi &= V_a, \quad z = H. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь  $R, H$  – размеры области  $\Omega$ ,  $\mathbf{n}$  – вектор внешней нормали к границам областей,  $\mathbf{e}_k$  – границы подобластей,  $E_n(\mathbf{k})$ ,  $E_t(\mathbf{k})$  нормальные и тангенциальные компоненты поля на границе  $k$ -ой области,  $V_a$  – потенциал на аноде,  $j_{ns}$ ,  $j_{ps}$ ,  $Q_{ns}$ ,  $Q_{ls}$  – значения поверхностных токов и потоков энергии. На дополнительном управляющем электроде задан потенциал  $V_c$ . В начальный момент времени система находится в равновесном состоянии.

На эмитирующей поверхности  $\partial\Omega_1$  решается задача туннелирования. В первом приближении для значения коэффициента туннелирования можно использовать формулы Фоулера-Нордгейма, в результате чего ток и поток энергии  $j_{ns}$ ,  $Q_{ns}$  можно вычислить с помощью интегрирования функции распределения по энергетическому спектру. Однако, как было указано выше, для малых наносистем с размерами меньше длины диффузии (<15 нм) необходимо решать задачу туннелирования непосредственно. Для этого можно использовать модель Шоттки с заданным потенциальным барьером [4]. В самом простом случае получается следующая краевая задача для одномерного стационарного уравнения Шредингера

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \psi}{ds^2} + k_0^2 [\varepsilon - V(s)] \psi &= 0, \quad s \in [0, 1], \quad \varepsilon \in (0, \infty), \quad k_0 = a \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}}, \\ \psi(0) &= \psi_L(0), \quad \psi'(0) = \psi_L'(0), \quad \psi(1) = \psi_R(1), \quad \psi'(1) = \psi_R'(1), \\ \psi_L(s) &= \exp[ik_L s] + R \cdot \exp[-ik_L s], \quad k_L = a \sqrt{\frac{2m_e(\varepsilon - V(0))}{\hbar^2}}, \\ \psi_R(s) &= T \cdot \exp[ik_R(s-1)], \quad k_R = a \sqrt{\frac{2m_e(\varepsilon - V(1))}{\hbar^2}}, \end{aligned} \quad (7)$$

для волновых функций электронов,  $s$  – координата вдоль нормали к эмитирующей поверхности. В более сложной ситуации решается задача динамического туннелирования на базе нестационарного многомерного уравнения Шредингера.

Математическая модель эмиссии с поверхности нанотрубки похожа на приведенную выше, однако уравнения квазигидродинамики пишутся для поверхностной плотности и температуры электронов, дырочная проводимость при этом не учитывается. Задача туннелирования электронов с поверхности нанотрубки оказывается еще более сложной, поскольку здесь приходится искать распределение коэффициента туннелирования не только по энергии, но и по углу вылета.

Для решения поставленных задач разработаны численные модели [4,5], использующие нерегулярные треугольные сетки и конечно-объемные аппроксимации на этих сетках уравнений квазигидродинамики и уравнения Пуассона. В частности, для решения динамических уравнений (1)-(4) предложены полувязные по времени конечно-объемные экспоненциальные схемы. Используемые в них аппроксимации пространственных операторов являются обобщением схем экспоненциальной подгонки [6] 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 барицентрические объемы. Более подробное описание и вывод экспоненциальных схем содержится в [7].

Для численной реализации построенных конечно-объемных схем используются методы сопряженных и бисопряженных градиентов со специальной структурой предобусловливателя. Построение предобусловливателя использует 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 [5]. 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, то обмен между узлами осуществляется с помощью функций MPI. Внутри узлов при наличии многих ядер и/или процессоров используются параллельные алгоритмы, ориентированные на использование общей памяти и нитей и реализованные в рамках стандарта OpenMP.

Разработанный программный комплекс позволяет качественно и количественно определять распределения электрического поля, плотности зарядов и разогрев в различных подобластях прибора и анализировать их влияние на его 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. Более подробно результаты моделирования предполагается осветить в докладе на конференции.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 05-07-90054-в, 06-01-00097-а, 07-01-12079-офи), Программ Президиума РАН № 2 и Отделения математических наук № 2 и в рамках Гранта Президента РФ НШ-3886.2008.1.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Татаренко Н.И., Кравченко В.Ф. Автоэмиссионные наноструктуры и приборы на их основе. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 192 с.
2. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применение / П.Н. Дьячков. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 293 с.
3. Поляков С.В., Федирко В.А. Программный комплекс для моделирования катодного микроузла с полупроводниковым автоэммиттером. // Прикладная физика, 2008, вып. 2, с. 48-55.
4. Федирко В.А., Зенюк Д.А., Поляков С.В. Численное моделирование стационарного туннелирования электронов через потенциальный барьер. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 12, под ред. Л.А. Уваровой. - М.: "Янус-К", 2009, с. 1-7.
5. Федирко В.А., Поляков С.В. // В кн.: "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", сб. научных трудов МГТУ "Станкин" и ИММ РАН, вып. 6, Изд. «Янус-К», М., 2004. С. 138-147.
6. Дулан Е., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. – М., Мир, 1983. – 198 с.
7. Поляков С.В. Экспоненциальные схемы для решения эволюционных уравнений на нерегулярных сетках. // Ученые записки казанского государственного университета. Серия "Физико-математические науки", 2007, т. 149, кн. 4, с. 121-131.