ВЛИЯНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО НАНОСЛОЯ НА ЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР AI–Al₂O₃ И Be–BeO

Проведено компьютерное моделирование процессов инжекции и эмиссии электронов в наноструктурах Al-Al₂O₃ и Be-BeO. Проанализированы вклады инжекционных токов Френкеля—Пула и туннельных токов Фаулера– Нордгейма в зависимости от приложенного электрического поля и толщины диэлектрического нанослоя.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, эмиссия Фаулера— Нордгейма, Эффект Пула—Френкеля, диэлектрические нанослои.

D. Nikiforov, A. Korzhavyi, K. Nikiforov

DIELECTRIC NANOLAYER INFLUENCE ON EMITTING PROPERTIES OF Al-Al₂O₃ AND Be–BeO STRUCTURES

Computer simulation of the processes of injection and emission in the emitted $Al-Al_2O_3$ and Be-BeO nanostructures has been carried out. Injection Frenkel— Poole currents and tunnel Fowler—Nordheim ones have been analyzed in the conditions of various applied fields and dielectric layer thickness.

Key words: computer simulation, Fowler—Nordheim emission, Poole— Frenkel effect, dielectric nanolayers.

Контакты металл—диэлектрик широко используются в качестве компонента МДП-структуры во многих полупроводниковых приборах и интегральных схемах [8]. В то же время возможно их использование и в качестве эмитирующих структур. Так, широко применяются электронные устройства — вакуумные СВЧ-приборы, фотоэлектронные умножители и газоразрядные лазеры, важнейшим элементом которых является эмиттер электронов — холодный катод [4; 12; 13]. В последние годы газоразрядные, в частности Не-Ne лазеры, являются основой для создания лазерных систем с большим функциональным спектром применения (хранение информации, средства навигации и локации, печатающие и сканирующие устройства и т. п.) [13]. В отличие от термокатодов, для обеспечения работы холодного источника электронов требуются не высокие температуры, а сильные электрические поля ($\approx 10^9$ В/м) [12; 13].

Одно из важнейших требований, предъявляемых к эмиттерам газовых лазеров, — способность долговременно сохранять рабочие параметры при контакте эмитируюших поверхностей с газовой средой, для обеспечения чего используются оксидные пленки типа Al_2O_3 и BeO [13]. Сочетание высоких температуры плавления, теплопроводности и диэлектрических параметров, характерное для оксидов алюминия и бериллия, по-прежнему оставляет их оптимальными материалами [13], несмотря на очевидные перспективы использования нитрида алюминия [6; 16].

В то же время подобные пленки не только выполняют конструктивную «защитную» функцию, но и являются активными элементами электронных структур. В качестве примера можно привести тонкопленочные гетероструктуры Al_2O_3 –Si [23], многослойные наноструктуры Ta_2O_5 –Al₂O₃ [7] и SrTiO₃– CeO₂–Al₂O₃ [21], металлические одноэлектронные транзисторы на Al(Nb)– Al₂O₃–Al(Nb) [1; 2], оптические элементы на основе BeO для лазерных систем средней ИК-области [28], детекторы CBЧ-излучения на основе BeO для термостимулированных экзоэмиссионных дозиметров [10; 11].

В настоящее время созданы высокоэффективные холодные оксиднопленочные катоды [4; 12]. Их основными преимуществами являются низкий порог эмиссии, высокая плотность эмиссионного тока, стабильность работы, низкий уровень шумов, возможность работы в широком диапазоне вакуумных условий. Переход к тонкопленочным оксидным катодам позволяет обеспечить надежность, долговечность и миниатюризацию лазерных датчиков [13]. Однако в оксидных нанопленках практически отсутствуют объемные дефекты и поэтому должны осуществляться принципиально иные физические механизмы эмиссии электронов и деградации оксидных покрытий. В частности, в диэлектрическом слое возникают управляемые инжекционные и туннельно-эмиссионные токи и формируются эффекты, обусловленные сильным электрическим полем [19].

Так, Хикмотт исследовал структуры Al–Al₂O₃–Au с толщиной диэлектрического слоя ≈ 30 нм [25; 26] и обнаружил, что при напряжениях до ≈ 15 В осуществляется механизм туннелирования Фаулера—Нордгейма, а высота потенциального барьера составляет 1,5 эВ. При толщине слоя диэлектрика 100 нм и напряжении 1 В плотность инжекционного тока была равна 8·10⁶ A/м². Ли и другие авторы [27] исследовали свойства холодных катодов на основе нанослоя Al₂O₃, нанесенного на In-Sn-оксиды (ITO). Обнаружено, что добавление диэлектрического слоя толщиной до 11 нм существенно увеличивает эмиссионный ток. При поле, меньшем чем 2·10⁷ В/м, главными механизмами формирования эмиссионных токов являются туннелирование по ловушкам и термоактивация Френкеля—Пула. В поле $E \leq 6 \cdot 10^7$ В/м осуществляется туннелирование ло-

вушек, а при $E \ge 6 \cdot 10^7$ В/м эмиссионный механизм меняется от резонансного к прямому механизму Фаулера—Нордгейма.

По данным Симмонса и др. [5; 29], в структуре Be–BeO–Au при толщине слоя диэлектрика 20 нм и напряжении 10 В плотность эмиссионного тока достигала $2 \cdot 10^3 \text{ A/m}^2$. При T < 300 К доминировала туннельная эмиссия Фаулера— Нордгейма, а при более высоких температурах — эмиссия по механизму Шоттки.

Как показывает анализ литературных данных, природа физических механизмов, обеспечивающих инжекцию и эмиссию носителей заряда и возможности управления ими в эмитирующих тонкопленочных структурах металл–оксид металла, практически не изучены.

Целью настоящей работы явилось проведение вычислительного эксперимента: компьютерное моделирование процессов формирования инжекционно-эмиссионных токов в нанопленочных структурах металл–оксид металла Al–Al₂O₃ и Be–BeO.

Вычислительный эксперимент проводился на основе системы *Maple* — самой надежной тестированной системы компьютерной математики, обеспечивающей высокую достоверность полученных результатов.

Для моделирования использовались следующие параметры: работа выхода $e\phi_m = 4,28 \ 3B$ (Al) 3,92 3B (Be); электронное сродство $\chi_d = 4,44 \ 3B$ (Al₂O₃) и 4,48 3B (BeO); ширина запрещенной зоны $E_g = 9,4 \ 3B$ (Al₂O₃) и 10,6 3B (BeO); диэлектрическая проницаемость $\varepsilon = 8,0$ (Al₂O₃) и 6,3 (BeO).

В связи с тем, что реальные диэлектрики содержат собственные структурные дефекты — кислородные вакансии (см., например, [3; 14; 15]), величина потенциального барьера φ_B для инжекции электронов из металла в зону проводимости диэлектрика (в сравнении с бездефектным диэлектриком) существенно понижается и составит 1,23 эВ и 1,90 эВ для исследуемых структур Al–Al₂O₃ и Be–BeO. Эти предположения подтверждаются экспериментальными данными [25; 30].

Результаты расчетов показывают, что оксидная нанопленка содержит электроны, инжектированные из металла и захватываемые ловушками, связанными с дефектами (анионными вакансиями) в диэлектрическом нанослое [19; 20].

В сильных электрических полях энергия активации ловушек уменьшается и возрастает вероятность освобождения электронов, захваченных ловушками, — возникают условия для термоэлектронной ионизации Френкеля—Пула [9].

Плотность инжекционного тока Френкеля—Пула ј определяется как [9]:

$$j = \sigma_0 E \, \mathrm{e}^{\frac{\sqrt{Ee^3}}{k_0 T \sqrt{\pi \varepsilon_0 \varepsilon}}},$$

где *E* — напряженность электрического поля, σ_0 — проводимость при отсутствии поля.

В реально используемых электрических полях все ловушки заполнены электронами [19; 20], и концентрация инжектированных электронов *n* будет равна [17]

$$n=\sqrt{\frac{N_CN_t}{2}}e^{-\frac{E_{t0}}{2k_0T}},$$

где N_t и E_{t0} — концентрация и глубина залегания ловушек при E = 0.

В исследуемых структурах металл-оксид металла с диэлектрическим нанослоем велика вероятность туннелирования через него электронов, причем она возрастает во внешнем электрическом поле за счет уменьшения высоты и толщины потенциального барьера [22]. В условиях сильных электрических полей за счет туннельного эффекта электроны могут покидать твердое тело, образуя ток автоэлектронной (или полевой, или туннельной) эмиссии [18].

В теории автоэлектронной эмиссии Фаулера—Нордгейма, построенной в рамках полуклассического метода Венцеля—Крамерса—Бриллюэна [22], форма потенциального барьера зависит от соотношения между приложенным электрическим полем и высотой потенциального барьера. При этом в случае трапецеидального потенциального барьера ($Ed < \varphi_m$) осуществляется прямое туннелирование через диэлектрический слой, а при треугольном потенциальном барьере ($Ed > \varphi_m$) — туннельная эмиссия «горячих» электронов в зону проводимости диэлектрика. (В исследуемых наноструктурах Al–Al₂O₃ и Be–BeO соответствующее напряжение «перехода» лежит в диапазоне нескольких вольт.)

С учетом сил электрического изображения плотность туннельного тока Фаулера—Нордгейма имеет вид

$$j = \frac{e^2}{8\pi h} \frac{E^2}{\varphi_B} e^{-\frac{8\pi\sqrt{2em}}{3h}} \frac{(\varphi_B)^{3/2}}{E} \vartheta(y),$$

где $\vartheta(y)$ — табулированная функция Нордгейма аргумента $y = 1 - \frac{\varphi_B(E)}{\varphi_B(0)}$, учи-

тывающая понижение потенциального барьера в электрическом поле (эффект Шоттки) [18].

Компьютерное моделирование инжекционных токов Френкеля—Пула и туннельных токов Фаулера—Нордгейма было осуществлено с использованием вышеприведенных параметров исходных материалов. Расчетные зависимости плотности инжекционно-эмиссионных токов от толщины нанослоя оксида металла при различных значениях приложенного электрического поля представлены на рис. 1 и 2.



Рис. 1. Зависимости плотности: *I* — тока Френкеля—Пула и *2* — тока Фаулера— Нордгейма в структуре Al–Al₂O₃ от толщины диэлектрического нанослоя при приложенном напряжении: *a* — 2 В и δ — 5 В (E_t = 2,46 эВ, N_t = 10¹⁸ м⁻³)

Проведенный вычислительный эксперимент показывает, что инжекционными токами Френкеля—Пула можно управлять, меняя положение мелких ловушек внутри запрещенной зоны оксида металла (и в меньшей степени — их концентрацию N_t), например, используя специальное легирование диэлектрического слоя. С другой стороны, это может привести к снижению потенциального барьера φ_B и значительному возрастанию коэффициента его прозрачности, а, следовательно, к увеличению плотности эмиссионного туннельного тока, ограничивающего возможные инжекционные токи внутри структуры металл–оксид металла.



Рис. 2. Зависимости плотности: *I* — тока Френкеля—Пула и *2* — тока Фаулера— Нордгейма в структуре Ве–ВеО от толщины диэлектрического нанослоя при приложенном напряжении: *a* — 2 В и δ — 5 В (E_t = 3,8 эВ, N_t = 10¹⁸ м⁻³)

* * :

Проведенный в работе вычислительный эксперимент показал, что в нанопленочных структурах $Al-Al_2O_3$ и Be–BeO доминирующими для формирования инжекционно-эмиссионных токов являются активационный механизм Френкеля—Пула и туннельный механизм Фаулера—Нордгейма, причем соотношение между ними определяется как свойствами диэлектрика (глубина залегания и концентрация электроактивных дефектов), так и величиной приложенного электрического поля.

При одинаковых значениях толщины диэлектрического слоя и приложенного напряжения инжекционный ток Френкеля—Пула больше по величине в структуре Al–Al₂O₃, чем в Be–BeO, из-за меньшей величины глубины залегания ловушек E_t . При тех же условиях туннельные токи Фаулера—Нордгейма имеют бо́льшие значения в структурах Al–Al₂O₃, чем в Be–BeO, из-за меньшей высоты потенциального барьера φ_B .

Для обеих структур в малых электрических полях вклад механизма Фаулера—Нордгейма в электронную эмиссию доминирует в случае тонких диэлектрических слоев, тогда как аналогичный вклад механизма Френкеля—Пула является основным при увеличении толщины оксидного слоя. В относительно больших электрических полях туннельные токи Фаулера—Нордгейма доминируют во всем диапазоне исследованных толщин нанослоя.

Следует отметить, что уменьшение толщины диэлектрического нанослоя, перспективное для формирования эффективных эмиссионных свойств изучен-

ных структур, в реальности (в условиях ионной бомбардировки) ограничено ≈ 10 нм для Al–Al₂O₃ и ≈ 5 нм для Be–BeO. Это обусловлено процессами деградации как объема оксидного слоя, так и интерфейса металл–оксид металла под действием ионной бомбардировки при газовом разряде [24].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абрамов И. И., Игнатенко С. А., Новик Е. Г. Характеристики многоостровковых одноэлектронных цепочек в зависимости от различных факторов // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37. Вып. 10. С. 1231–1234.

2. Абрамов И. И., Новик Е. Г. Характеристики металлических одноэлектронных транзисторов на различных материалах // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 34. Вып. 8. С. 1014–1019.

3. Беляев Р. А. Окись бериллия. — М.: Атомиздат, 1980. — 224 с.

4. Дефекты и физические свойства многокомпонентных электронных материалов // К. Г. Никифоров, А. П. Коржавый, В. В. Горбачев и др. / Ред. К. Г. Никифоров. — Калуга:

Изд-во КГПУ, 1999. С. 49–91.

5. Добрецов А. Н., Гомоюнова М. В. Эмиссионная электроника. — М.: Наука, 1966. — 564 с.

6. Добрынин А., Казаков Н. П., Найда Г. А., Поддененский Е. Н., Райдин Е. Р., Соколов Е. В. Нитрид алюминия в электронной технике // Зарубежная электроника. 1989. № 4. С. 44–84.

7. *Ежовский Ю. К., Клусевич А. И.* Диэлектрические многослойные наноструктуры оксидов тантала и алюминия // Физика твердого тела. 2003. Т. 45. Вып. 11. С. 2099–2103.

8. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов. — М.: Мир, 1984. Т. 1. — 456 с.

9. Као К., Хуанг В. Перенос электронов в твердых телах. — М.: Мир, 1984. — 326 с.

10. *Кийко В. С., Макурин Ю. Н., Балакирев В.* Ф. Состав и свойства промышленной керамики из оксида бериллия // Химическая технология. 2004. № 1. С. 7–9.

11. Кийко В. С., Софронов А. А., Макурин Ю. Н., Шабунин С. Н., Плетнева Е. Д., Ивановский А. Л. Применение керамики BeO+TiO₂ в различных областях техники и специального приборостроения // Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии: Материалы V Международной конференции. Кисловодск, 2005. — Ставрополь: СевКав-ГТУ, 2005. С. 34–35.

12. *Киселев А. Б.* Металлооксидные катоды электронных приборов. — М.: Изд-во МФТИ, 2002. — 240 с.

13. Коржавый А. П., Марин В. П., Сигов А. С. Некоторые аспекты создания технологий и конструкций изделий квантовой электроники // Наукоемкие технологии. 2002. Т. 3. № 4. С. 20–31.

14. Кортов В. С., Мильман И. И., Никифоров С. В., Моисейкин Е. В., Овчинников М. М. Фототрансферная термолюминесценценция в анион-дефектных кристаллах α-Al₂O₃ // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. Вып. 12. С. 2143–2147.

15. Кортов В. С., Мильман И. И., Никифоров С. В., Пеленев В. Е. Механизм люминесценции F-центров в анион-дефектных монокристаллах оксида алюминия // Физика твердого тела. 2003. Т. 45. Вып. 7. С. 1202–1208.

16. Костенко В. И., Серегин В. С., Грошкова Л. А., Василевич А. И. Перспективы использования высокотемпературной керамики из нитрида алюминия в космическом приборостроении // Вопросы миниатюризации в современном космическом приборостроении: Труды семинара ИКИ РАН. — Таруса, 2004. — С. 250–256.

17. *Ламперт М., Марк П.* Инжекционные токи в твердых телах. — М.: Мир, 1973. — 435 с.

18. *Модинос А.* Авто-, термо- и вторично-электронная эмиссионная спектроскопия. — М.: Наука, 1990. — 320 с. 19. *Никифоров Д. К.* Эмитирующие тонкопленочные структуры Al–Al₂O₃ и Be–BeO в условиях ионно-электронной бомбардировки: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. — М., 2006.

20. Никифоров Д. К., Коржавый А. П., Никифоров К. Г. Вычислительный эксперимент в наноструктурах Ве–ВеО: процессы переноса в рамках модели ТОПЗ // Вестник Калужского университета. 2007. № 2. С. 3–8.

21. Прудан А. М., Гольман Е. К., Козырев А. Б., Кютт Р. Н., Логинов В. Е. Свойства титаната стронция в многослойной структуре SrTiO₃/CeO₂/ Al₂O₃ // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. Вып. 6. С. 1024–1029.

22. Туннельные явления в твердых телах / Ред. Э. Бурштейн, С. Лундквист. — М.: Мир, 1973. — 367 с.

23. Шулаков А. С., Брайко А. П., Букин С. В., Дрозд В. Е. Свойства межфазовой границы Al₂O₃/Si // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. Вып. 10. С. 1868–1872.

24. Bondarenko G. G., Korzhavyi A. P., Nikiforov D. K. Modification of the emitting metal-metal oxide nanostructures under ionic bombardment // Perspective Materials. 2007. Vol. 1. P. 224–225.

25. *Hickmott T. W.* Polarization and Fowler—Nordheim Tunneling in Anodized Al-Al₂O₃– Au Diodes // J. Appl. Phys. 2000. Vol. 87. № 11. P. 7903–7912.

26. *Hickmott T. W.* Voltage-dependent dielectric breakdown and voltage-controlled negative resistance in anodized Al-Al₂O₃-Au // J. Appl. Phys. 2000. Vol. 88. № 5. P. 2805–2812.

27. Lee M. B., Hahm S. H., Lee J. H., Song Y. H. Emission behavior of nm-thick Al_2O_3 film-based planar cold cathodes for electronic cooling // Appl. Phys. Lett. 2005. Vol. 86. No 12. P. 123511–123513.

28. *Makarenko S., Sekirin I.* Control of reflectance spectrum of BeO ceramics surface // Int. Symp. Molecular Spectroscopy Abstr. Columbus. Ohio, US. 1997. P. RG103.

29. Simmons J. G., Unterkofler G. H., Allen W. W. Temperature characteristics of BeO tunneling structures // Appl. Phys. Lett. 1963. Vol. 2. № 4. P. 78–80.

30. Specht M., Stadele M., Jakschik S., Schroder U. Transport mechanisms in atomic-layerdeposited Al₂O₃ dielectrics // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 84. № 3. P. 3076–3078.