ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЯРНОГО УГЛА РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ИОНИЗИРОВАННОЙ ПРИМЕСИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В. М. Борздов, Д. С. Сперанский, А. В. Борздов

Белорусский государственный университет, Минск
E-mail: borzdov@bsu.by

Известно, что одним из наиболее перспективных методов численного моделирования электрофизических свойств и электрических характеристик различных полупроводниковых структур, в частности, приборных структур микро- и оптоэлектроники, является метод Монте-Карло [1]. Важнейшим преимуществом данного метода является возможность использования точных матричных элементов перехода носителя заряда при его взаимодействии с рассеивателем для любого механизма рассеяния в полупроводнике.

Известно также, что особого внимания при моделировании кинетических явлений в полупроводниках заслуживает учет рассеяния на ионизированной примеси, особенно когда рассматриваются сильно легированные области. При этом на сегодняшний день при включении примесного рассеяния носителей заряда в общий алгоритм Монте-Карло чаще всего используются хорошо известные модели Конуэлл-Вайскопфа (CW) и Брукса-Херринга (BH), реже – модель Ридли.

Важнейшую роль при моделировании взаимодействия электрона с ионом примеси играет определение состояния носителя заряда после акта рассеяния. Как правило, рассматривая взаимодействие электрона и иона примеси как абсолютно упругое, в процедуре Монте-Карло данный процесс задается единственной величиной – полярным углом θ. При этом азимутальный угол φ считается равномерно распределенной случайной величиной в интервале от 0 до 2π.

Формулы, по которым можно разыгрывать полярный угол θ для моделей CW и BH могут быть получены из общего выражения для интенсивности рассеяния носителей заряда (вероятности их рассеяния в единицу времени) на примеси в первом борновском приближении для экранированного потенциала с использованием метода обратных функций [2]. При этом сам акт взаимодействия предполагается чисто двухчастичным процессом. Для модели Ридли в [3] была предложена двухэтапная процедура нахождения угла θ из выражения для дифференциального сечения рассеяния с учетом коэффициента, являющегося функцией прицельного параметра и представляющего собой вероятность отсутствия влияния на процесс рассеяния какого-либо третьего тела.

В настоящем докладе, с учетом результатов работы [4] получена формула, описывающая интенсивность рассеяния носителя заряда на ионизированной примеси по модели Ридли, для которой корректирующий коэффициент, записывается в виде

$$P(\theta) = \exp\left(-\pi N_I a K^2 \mathrm{ctg}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right), \tag{1}$$

где $K = Ze^2 / 4\pi\varepsilon\varepsilon_0 m^* v^2$, Ze – заряд иона, ε – относительная диэлектрическая проницаемость среды, ε_0 – диэлектрическая постоянная, m^* – эффективная масса электрона, v – его скорость, N_I – концентрация ионизированной примеси, a – среднее межпримесное расстояние. В докладе представлены результаты расчета методом Монте-Карло угловых распределений $P(\cos\theta)$ при рассеянии электрона на примеси в кремнии, легированном фосфором при концентрации $N_I = 10^{24}$м$^{-3}$, $T = 300$ K и двух различных значениях энергии носителя заряда $E = 0{,}2$ эВ и $E = 0{,}7$ эВ.

Для разыгрывания $\cos\theta$ была получена следующая формула

$$z_1 z_2 = \frac{\displaystyle\int_{\cos\theta_z}^{\cos\theta_{\min}} \frac{d\cos\theta'}{\left[\beta_s^2 + 2k^2(1-\cos\theta')\right]^2}}{\displaystyle\int_{-1}^{\cos\theta_{\min}} \frac{d\cos\theta'}{\left[\beta_s^2 + 2k^2(1-\cos\theta')\right]^2}} \times$$

$$\times \frac{\exp\left(-\pi a N_I K^2 \mathrm{ctg}^2\left(\frac{\theta_z}{2}\right)\right) - \exp\left(-\pi a N_I K^2 \mathrm{ctg}^2\left(\frac{\theta_{\min}}{2}\right)\right)}{1 - \exp\left(-\pi a N_I K^2 \mathrm{ctg}^2\left(\frac{\theta_{\min}}{2}\right)\right)}, \tag{2}$$

где z_1, z_2 – случайные числа, равномерно распределенные на отрезке от 0 до 1, β_s– обратный радиус экранирования Дебая, k – волновой вектор электрона, $\theta_{\min}$ – минимальное значение полярного угла рассеяния.

Корректность предложенной процедуры разыгрывания угла θ подтверждена сравнением полученных нами результатов с данными расчета по двухэтапной процедуре, описанной в [3].

1. *Борздов В. М., Жевняк О. Г., Комаров Ф. Ф., Галенчик В. О.* Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники. Минск: БГУ, 2007. 175 с.
2. *Jacoboni C., Reggiani L.* // Rev. Mod. Phys. 1983. V. 55, No 3. P. 645–705.
3. *Van de Roer T. G., Widdershoven F. R.* // J. Appl.Phys. 1986. V. 59, No 3. P. 813–815.
4. *Сперанский Д. С., Борздов В. М., Поздняков Д. В.* // Доклады БГУИР. 2011. № 2. С. 33–39.