

2. *Mendenhall M. H., Weller R. A.* / An Algorithm for Computing Screened Coulomb Scattering in GEANT// Nuclear Instruments and methods (B), 2004, 1 –19.
3. *Biersack J. P., Haggmark L. G.* / A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // Nuclear Instruments and methods – 1980. – 174 – pp.257–269.
4. *Mendenhall M. H., Weller R. A.* / Algorithms for the rapid computation of classical cross section for screened Coulomb collisions // Nuclear Instruments and methods. – 1991 – B58 – pp.11–17.
5. *Archubi C. D. et al.* Angular dispersion of protons passing through thin metallic films // Nuclear Instruments and methods. – 2005.– B230 – p.53.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНОЧАСТИЧНЫМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ

А. В. Михайлик, Д. П. Чиж

Исследование взаимосвязи электрофизических свойств полупроводников с их зонной структурой, наличием тех или иных механизмов рассеяния носителей заряда, концентрацией примесей, температурой, наличием и видом электрических полей остается на сегодняшний день актуальной задачей, особенно для получения точных количественных оценок. Еще более важным является прогнозирование статических и динамических вольт-амперных характеристик разрабатываемого прибора в зависимости от указанных свойств используемого полупроводника, внешних условий и его реальной геометрии.

Первая задача может быть решена аналитически или итерационным численным анализом кинетического уравнения Больцмана, а вторая — решением электродинамических уравнений при соответствующих граничных условиях или методом эквивалентных схем. Однако получение, например, точных количественных оценок указанными методами для полупроводников $A^{III}B^V$, так же как и анализ гетероструктур или субмикронных приборов, сопряжено с большими сложностями даже при введении ряда существенных упрощений. Для таких случаев огромным преимуществом обладает метод Монте-Карло, позволяющий весьма эффективно решать обе упомянутые выше задачи.

Целью данной работы явилась разработка численной модели переноса электронов в объемном GaAs на основе одночастичного метода Монте-Карло [1,2] и расчет зависимости их дрейфовой скорости в этом материале от величины приложенного электрического поля и температуры.

Идея подхода состоит в том, чтобы моделировать движение электрона в $\vec{p}$ -пространстве. Рассматривается пролет свободного электрона, пре-

рывае́мый процессами рассеяния [1]. Между актами рассеяния изменение импульса электрона определяется электрическим полем $\vec{E}$:

$$\vec{p}(t) = \vec{p}_0 + q\vec{E}t. \quad (1.1)$$

Моменты времени, в которые происходят акты рассеяния, определяются случайным числом r , генерируемым датчиком случайных чисел. Эти моменты времени зависят от полной частоты рассеяния:

$$\Gamma(E) = \sum_{i=1}^n \lambda_i(E), \quad (1.2)$$

где $\lambda_i(E)$ – частота для разных механизмов рассеяния, энергия $E = \frac{\vec{p}^2}{2 \cdot m_{\text{эф}}}$.

Полная частота $\Gamma(E)$ является сложной функцией энергии, что создает трудности при попытке воспроизвести распределение вероятностей актов рассеяния с помощью датчика случайных чисел. Эти трудности легко преодолеть путем включения в рассмотрение дополнительного фиктивного процесса саморассеяния. Функция выбирается таким образом, чтобы $\Gamma(E) + \lambda_0 = \Gamma = \text{const.}$

Полная вероятность рассеяния электрона в интервале времен от t до $t + dt$ равна:

$$Pdt = \Gamma e^{-\Gamma t} dt. \quad (1.3)$$

После того, как вычислено время свободного пролета t , необходимо установить процесс рассеяния, ответственный за прерывание пролета. Вероятность выпадения i -ого процесса зависит от энергии электрона и пропорциональна $\lambda_i(E)$, причем $\lambda_i(E)$ удовлетворяют условию:

$$\frac{1}{\Gamma} \sum_{i=0}^n \lambda_i(E) = 1. \quad (1.4)$$

Для упрощения процедуры выбора рассеяния необходимо сгенерировать таблицу значений вероятности процесса рассеяния от энергии, нормированных на единицу. Далее сгенерировать случайное число s между 0 и 1 и проверить выполнение неравенства:

$$s < \frac{1}{\Gamma} \sum_{i=0}^m \lambda_i(E), \quad (1.5)$$

для $m = 0, 1, 2, \dots, n-1$ и заданной энергии. Следующий шаг состоит в определении конечного состояния после рассеяния. Для саморассеяния ко-

нечное состояние известно, так как при этом направление вектора $\vec{p}$ не изменяется. Для всех же реальных процессов рассеяния необходимо генерировать дополнительные, случайные числа, чтобы смоделировать распределение вероятностей конечных состояний.

В GaAs для рандомизирующих актов рассеяния, таких, как акустическое или междолинное все состояния, соответствующие конечному состоянию, равновероятны. Поэтому для углов θ и φ определяющих направление рассеяния, можно записать:

$$Pd\theta = \frac{1}{2} \sin\theta d\theta \quad (1.6)$$

$$q(\varphi)d\varphi = \frac{1}{2\pi} d\varphi, \quad (1.7)$$

Для полярного оптического рассеяния углы θ близки к 0, т.е. отклонения от первоначального положения будут небольшими, и для розыгрыша угла необходимо использовать процедуру Неймана [3], как для генерации заданного распределения угловой величины.

При построении нашей модели переноса была использована 2-х зонная модель объемного GaAs и учитывались следующие механизмы рассеяния:

Зона 1: а) полярное оптическое рассеяние, б) акустическое рассеяние, в) междолинное рассеяние.

Зона 2: а) полярное оптическое рассеяние, б) акустическое рассеяние в) междолинное рассеяние, г) внутримолинное рассеяние.

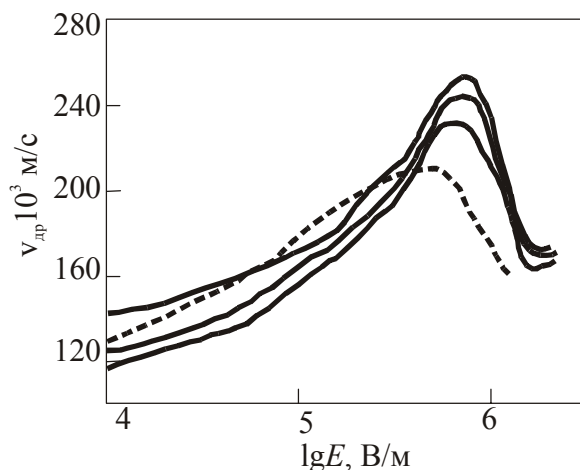


Рис. 1. Зависимость средней дрейфовой скорости $v_{др}$ от приложенного электрического поля ξ при $T_1 = 150$ К, $T_2 = 200$ К и $T_3 = 300$ К ; график пунктиром взят из аналогичных расчетов, выполненных в [1].

С использованием разработанной модели и реализующей ее компьютерной программы были рассчитаны зависимости средней дрейфовой скорости от напряженности приложенного электрического поля при трех различных температурах. Эта зависимость представлена на рис 1. Для сравнения, на этом же графике приведены результаты, аналогичных расчетов при тем-

пературе $T = 300 \text{ K}$, взятые из работы [1].

Анализируя график средней дрейфовой скорости, можно отметить, что при понижении температуры средняя дрейфовая скорость увеличивается. Это связано с уменьшением вероятности рассеяния на акустических и оптических фононах, которые являются следствием тепловых колебаний решетки. Также на графике хорошо просматривается достаточно резкое уменьшение скорости при полях больших 10^6 В/м . Этот эффект, как известно, связан с переходом большинства электронов из зоны 1 в зону 2, где их масса значительно возрастает и включается механизм междолинного рассеяния.

Таким образом, в данной работе были рассчитаны интенсивности основных механизмов рассеяния в GaAs, разработана программа для расчета средней дрейфовой скорости электронов с использованием одночастичного метода Монте-Карло, получены зависимости величины дрейфовой скорости от напряженности электрического поля в интервале его изменения ($10^4 - 10^7$) В/м при температуре 150К и 300К. Показано, что результаты расчета относительно хорошо согласуются с известными в литературе данными.

Литература

1. *Шур М.* Современные приборы на основе арсенида галлия / Пер. с англ.-М.: Мир, 1991.-632 с., ил.
2. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц / Пер. с англ.-М.: Мир, 1987. – 640 с.
3. *Иващенко В., М Митин. В. В.* Моделирование кинетических явлений в полупроводниках методом Монте-Карло. / Отв. Ред. Грибников З. С.; АН УССР. Институт полупроводников. - Киев : Наук. Думка, 1990. – 192 с.

КОМПЬЮТЕРИЗИРОВАННЫЕ СРЕДСТВА ИЗМЕРЕНИЯ

П. В. Петров, А. В. Дымович, П. В. Янкович

Любое современное образовательное учреждение активно и в обязательном порядке использует новые информационные технологии в своем учебном процессе. Использование компьютера, компактных информационных носителей, сети Интернет помогают расширить сферу образовательных услуг и радиус их действий, оперативно актуализировать учебные курсы. Сегодня в Республике Беларусь в активном порядке внедряются различные системы тестирования, методические и учебные пособия переводятся в электронный вид. Однако для образования в области естественных наук наличие электронных учебных материалов является не достаточным. Учащийся в процессе обучения должен на своем опыте