

МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОЧАСТИЧНЫМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ДРЕЙФОВОЙ СКОРОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ В АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Р. И. Хомюк, В. В. Милошевский

Белорусский Государственный Университет, г. Минск;

romakhomyk@mail.it@mail.ru;

науч. рук. – В. М. Борздов, д-р физ.-мат. наук, проф.

Разработаны алгоритм и программа численного моделирования дрейфовой скорости электронов в GaAs в сильных электрических полях многочастичным методом Монте-Карло с использованием пакета MATLAB. Разработанные алгоритм и программа позволили рассчитать зависимость дрейфовой скорости электронов от напряженности приложенного электрического поля с учетом основных механизмов рассеяния носителей заряда в полупроводниковом материале.

Ключевые слова: метод Монте-Карло; GaAs; перенос электронов; рассеяние.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что одним из наиболее эффективных методов исследования кинетических явлений в объёмных полупроводниках и полупроводниковых приборных структурах является численный метод Монте-Карло [1, 2]. Целью данной работы была разработка алгоритма и программы для расчета многочастичным методом Монте-Карло дрейфовой скорости электронов в GaAs в сильных электрических полях.

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Метод Монте-Карло – статистический метод численного моделирования, позволяющий численно, непрямым методом решать уравнение Больцмана, характеризующее перенос носителей заряда с учётом точного описания зонной структуры полупроводников.

При моделировании переноса ансамбля носителей заряда вероятностным образом определяется начальное состояние каждого носителя, после чего в определенные моменты времени фиксируется состояние носителя заряда в материале полупроводника в процессе переноса. Механизм рассеяния для каждого акта выбирается также статистически, исходя из вероятностей для каждого механизма и суммарной вероятности рассеяния носителя.

В случае модели с несколькими доминирующими механизмами рассеяния N для каждого механизма априори рассчитывается интенсивность рассеяния W (вероятность рассеяния в единицу времени) носителя

заряда по данному механизму. Далее все интенсивности суммируются и выбирается некоторое значение частоты рассеяния Γ , которое соответствует максимальной суммарной интенсивности для всего диапазона рассматриваемых энергий. Зная величину Γ , легко определить время свободного пробега носителя t . В конце свободного пробега случайным образом на отрезке от 0 до Γ разыгрывается механизм для текущего акта рассеяния и определяется новый волновой вектор и соответствующие углы после рассеяния. В случае попадания в диапазон от W_N до Γ полагается, что произошло саморассеяние, при котором кинетические параметры частицы не изменяются. В общем же случае генерируется равномерно распределенная на интервале $[0, 1]$ величина r , и если $W_i(E)$ – интенсивность рассеяния для i -го механизма, то согласно неравенству

$$\sum_{i=1}^j W_i \leq r * \Gamma < \sum_{i=1}^{j-1} W_i$$

выбирается механизм рассеяния с индексом j . При этом важно отметить, что в случае использования многочастичного метода Монте-Карло, в котором, в отличие от одночастичного, рассматривается модель достаточно большого числа крупных частиц (не менее 5000 электронов), усреднение ведётся не по времени, как в одночастичном методе, а по ансамблю в определенные моменты времени. Также следует иметь в виду, что в многочастичном методе состояния носителей статистически накапливаются как через равные промежутки времени, так и перед каждым рассеянием. Таким образом, в связи с тем, что многочастичный метод требует решения большего числа уравнений движения, он является более ресурсоемким и сложным в реализации, чем одночастичный метод.

РАСЧЕТ ДРЕЙФОВОЙ СКОРОСТИ

Как было сказано выше, рассеяние носителей происходит с учётом определенных, наиболее значимых механизмов. В данной работе в алгоритм были включены следующие механизмы рассеяния: рассеяние на акустических и полярных оптических фононах, междолинное рассеяние, рассеяние на ионах примеси и ударная ионизация. Формулы для расчета интенсивностей рассеяния в арсениде галлия взяты из [2, 3, 4]. Наиболее значимые приближения, сделанные в построенной модели, были следующие:

- Так как энергия акустических фононов крайне мала, то рассеяние можно считать упругим, поэтому угловое распределение для данного механизма можно считать равновероятным.

- Для междолинного рассеяния рассматривалась не строгая трехмерная модель зонной структуры GaAs, состоящая из центральной Γ -долины и шести сателлитных L -долин, а упрощенная одномерная модель, в которой одна зона (зона I) соответствует центральному минимуму, а другая зона (зона II) составляет в совокупности шесть объединенных сателлитных минимумов. Также учтено, что электрическое поле может сообщать электронам энергию, большую, чем 0,36 эВ, и они могут рассеиваться в одну из L -долин (зону II) с большей эффективной массой.

- Для расчета интенсивности рассеяния на ионах примеси было использовано приближение Брукса-Херринга [2].

- Интенсивность ударной ионизации была рассчитана в соответствии с формулой (моделью) Келдыша [2].

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Разработанные в данной работе алгоритм и реализующая его программа для расчета дрейфовой скорости электронов в GaAs методом Монте-Карло показали хорошее согласие полученных нами результатов с экспериментальными результатами, взятыми из [4]. На рисунке в качестве примера приведена рассчитанная зависимость дрейфовой скорости электронов v в нелегированном GaAs от величины напряженности электрического поля $\mathcal{E}$ в диапазоне от 0 до $7 \cdot 10^5$ В/м при температуре 300 К.

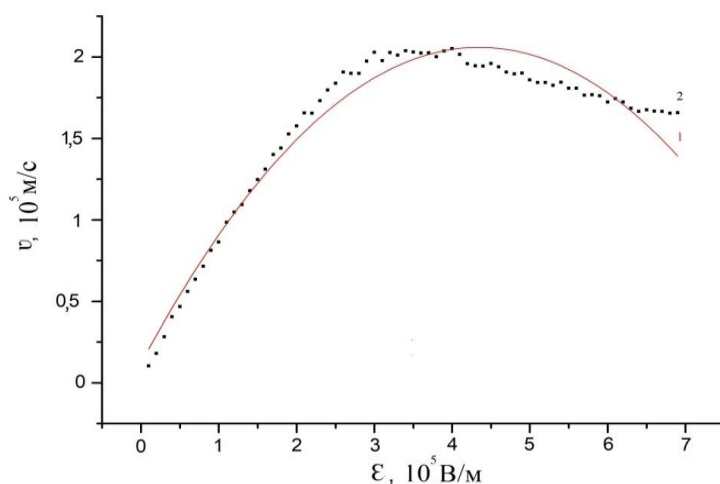


Рис. 1. Зависимость дрейфовой скорости электронов от напряженности электрического поля в нелегированном GaAs при температуре 300 К: кривая 1 показывает экспериментальные результаты, взятые из [4]; точками 2 представлены результаты моделирования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Краткий анализ полученных в работе результатов позволяет сделать следующие выводы:

- При температуре 300 К переходы из центральной в L -долины в нелегированном GaAs наблюдаются при напряженности электрического поля, равной приближённо 0,3 МВ/м, что хорошо согласуется с известными экспериментальными данными для GaAs [4].

- Разработанные алгоритм и программа позволяют помимо дрейфовой скорости рассчитывать и другие кинетические параметры (среднюю энергию, подвижность и др.), описывающие перенос носителей заряда в GaAs в сильных электрических полях при различных температурах и концентрации легирующей примеси.

Библиографические ссылки

1. Борздов В. М., Жевняк О. Г., Комаров Ф. Ф., Галенчик В. О. Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники. Минск: БГУ 2007.
2. Иващенко В. М., Митин В. В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло. Киев: Наукова думка, 1990.
3. Ридли Б. К. Квантовые процессы в полупроводниках. М.: Мир, 1986.
4. Шур М. Физика полупроводниковых приборов, Т1. М.: Мир, 1992.