

О РАЗЫГРЫВАНИИ ПОЛЯРНОГО УГЛА РАССЕЯНИЯ В МОДЕЛИ РИДЛИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В. М. Борздов, А. В. Борздов, Ю. Г. Василевский, Д. С. Дзираев

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: borzdov@bsu.by

Предложен метод разыгрывания полярного угла рассеяния электронов на ионизированной примеси при численном моделировании процессов переноса электронов в легированном кремнии методом Монте-Карло. Проведено сравнение плотностей распределения углов рассеяния, получаемых в рамках известных моделей Брукса-Хэрринга и Ридли, а также предложенной модели.

Ключевые слова: *ионизированная примесь, метод Монте-Карло, рассеяние электронов.*

Хорошо известно, что одним из наиболее широко используемых методов численного моделирования электрофизических свойств и электрических характеристик полупроводников и полупроводниковых приборов является кинетический метод Монте-Карло [1–4]. Важнейшим преимуществом данного метода является возможность использования точных матричных элементов перехода носителя заряда при его взаимодействии с рассеивателем для всех основных механизмов рассеяния в полупроводнике.

Важнейшую роль при моделировании взаимодействия электрона с ионом примеси методом Монте-Карло играет вопрос определения состояния носителя заряда после акта рассеяния. Рассматривая взаимодействие электрона и иона примеси как абсолютно упругое, в процедуре Монте-Карло данный процесс характеризуется важнейшей случайной величиной – полярным углом рассеяния θ , который в каждой модели рассеяния имеет свое, как правило, достаточно сложное распределение. При этом азимутальный угол ϕ обычно считается равномерно распределенной случайной величиной в интервале значений от 0 до 2π [3, 4]. В этой связи можно упомянуть, например, работу [5], в которой для транспортных расчетов методом Монте-Карло была описана модель рассеяния на заряженном примесном центре с изотропным поперечным сечением, в которой угол θ так же, как и угол ϕ , предполагался равномерно распределенной случайной величиной.

Известно, что особого внимания при моделировании кинетических явлений в полупроводниках заслуживает учет рассеяния на ионизированной примеси, особенно при низких температурах, а также при включении в моделирование сильнолегированных областей полупроводника. При этом, несмотря на имеющееся достаточно большое число хорошо

разработанных моделей примесного рассеяния в полупроводниках, в алгоритме моделирования методом Монте-Карло чаще всего используются модели Конуэлл-Вайскопфа и Брукса-Хэрринга, реже – модель исключения третьего тела или модель Ридли.

Формулы, по которым можно разыгрывать угловые распределения для полярного угла в моделях Конуэлл-Вайскопфа и Брукса-Хэрринга, могут быть получены из общего выражения для интенсивности рассеяния носителей заряда (вероятности рассеяния в единицу времени) на заряженной примеси в первом борновском приближении для экранированного кулоновского потенциала с использованием метода обратных функций [2–4]. При этом сам акт взаимодействия предполагается чисто двухчастичным процессом, а формулу для нахождения угла θ для модели Конуэлл-Вайскопфа можно получить из общей формулы для вероятности рассеяния в единицу времени как частный случай для длины экранирования, равной нулю. Для модели Ридли в [6] была предложена двухэтапная процедура нахождения угла θ , согласно которой сначала разыгрывается прицельный параметр b , а затем из выражения для полного сечения рассеяния – угол θ . В настоящей статье с учетом экранирования кулоновского поля и результатов работы [6] предлагается более корректный и более точный метод разыгрывания углового распределения для полярного угла рассеяния θ в модели Ридли.

Согласно двухэтапной процедуре, описанной в работе [6], для расчета параметров θ и b в модели Ридли сначала разыгрывается прицельный параметр b , для чего используется метод обратных функций, а затем вычисляется угол θ . При этом предполагалось, что параметр b является изначально единственным случайным параметром с нормированной плотностью распределения, равной

$$f(b) = 2\pi b a N_1 \exp(-\pi a N_1 b^2), \quad (1)$$

а параметр θ является случайной функцией параметра b . Можно заметить, что плотность распределения (1) — это плотность распределения Рэлея с постоянной плотностью примесных центров в плоскости $\lambda = a N_1$, где a – расстояние между атомами примеси, N_1 – концентрация ионизированной примеси.

Случайный характер поведения параметра b с плотностью вида (1) определяется только геометрическим расположением примесей в плоскости и не учитывает особенностей случайного характера θ при чисто двухчастичном квантовомеханическом взаимодействии. В квантовомеханической модели Брукса-Хэрринга плотность распределения имеет вид [4]

$$f(\theta) = A \left[\frac{1}{2k^2(1 - \cos \theta) + \beta_s^2} \right]^2 \sin \theta, \quad (2)$$

где A – нормировочная постоянная, k – модуль волнового вектора, β_s^2 – параметр экранирования.

Вид плотности (2) определяется, прежде всего, видом матричного элемента, который рассчитан в первом борновском приближении при рассеянии электрона на заряженном примесном центре.

С учетом вышесказанного в рамках модели Ридли для более корректного и точного расчета (симуляции) параметров θ и b предлагается рассматривать процесс рассеяния электрона на примесном атоме как двухчастичное взаимодействие, при котором электрон рассеивается на некоторый угол θ , являющийся случайной величиной с плотностью распределения (2) с учетом вероятности $P(b)$ того, что при этом третий ближайший рассеивающий центр отсутствует. Вероятность такого процесса будет зависеть от двух случайных величин θ и b , каждая из которых характеризуется своей плотностью вероятности. Считая, что случайные параметры θ и b статистически независимы, и используя метод обратных функций, на основании [7] для двух совместных случайных событий будем иметь

$$r_1 r_2 = \frac{\int_{\cos \theta}^1 \frac{d \cos \theta'}{\left[\beta_s^2 + 2k^2(1 - \cos \theta') \right]^2}}{\int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta'}{\left[\beta_s^2 + 2k^2(1 - \cos \theta') \right]^2}} \cdot \frac{\exp(-\pi a N_I b^2) - \exp(-\pi a N_I b_{\max \text{ BH}}^2)}{1 - \exp(-\pi a N_I b_{\max \text{ BH}}^2)}, \quad (3)$$

где r_1 и r_2 – случайные числа, равномерно распределенные на $[0, 1]$, $b_{\max \text{ BH}}$ – максимальное значение прицельного параметра в модели Брукса-Хэрринга.

Таким образом, с помощью формулы (3) удастся вероятностным образом и однозначно связать два случайных параметра θ и b .

На рисунке 1 в качестве примера представлены плотности распределения полярных углов рассеяния, рассчитанные для Si с уровнем легирования донорной примесью 10^{24} м^{-3} при температуре 300 К и для энергии электрона $E = 0.1 \text{ эВ}$.

Сплошная кривая соответствует модели Брукса-Хэрринга, штриховая – модели Ридли, а пунктирная кривая получена путем точного численного решения уравнения (3).

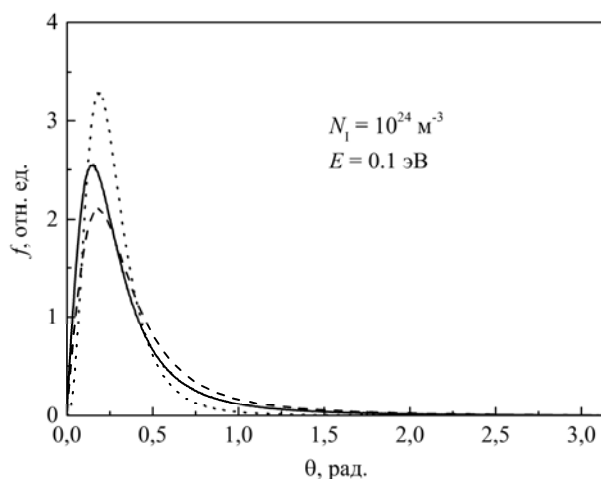


Рис. 1. Плотности распределения полярного угла рассеяния на ионизированной примеси в кремнии

Из рисунка, в частности, следует, что для углов рассеяния $\theta \geq 1.5$ рад все три кривые практически совпадают. Однако для углов $\theta \leq 0.4$ рад, значения которых наиболее вероятны при разыгрывании угла θ в акте рассеяния, между кривыми имеются заметные различия. При этом, хотя максимальные значения плотностей для нашей модели и модели [6] достигаются при одном и том же значении угла $\theta \approx 0.2$ рад, при $0 \leq \theta \leq 0.4$ рад наблюдается существенное различие в поведении этих кривых, что необходимо учитывать при интерпретации данных, полученных при моделировании кинетических явлений в полупроводниках методом Монте-Карло.

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. 175 с.
2. Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation. Wien–New York: Springer–Verlag, 1989. 356 p.
3. Jacoboni C., Reggiani L. The Monte-Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with application to covalent materials // Rev. Mod. Phys. 1983. Vol. 55, No. 3. P. 645–705.
4. Иващенко В. М., Митин В. В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло. Киев: Наукова думка, 1990. 192 с.
5. Kosina H. Efficient evaluation of ionized-impurity scattering in Monte Carlo transport calculations // phys. stat. sol. (a). 1997. Vol. 163. P. 475–489.
6. Van de Roer T. G., Widdershoven F. R. Ionized impurity scattering in Monte Carlo calculations // J. Appl. Phys. 1986. Vol. 59, No. 3. P. 813–815.
7. Сперанский Д. С., Борздов В. М., Поздняков Д. В. Моделирование рассеяния электронов на ионизированной примеси в полупроводниках и полупроводниковых структурах методом Монте-Карло // Доклады БГУИР. 2011. Т 56, № 2. С. 33–39.