

УДК 539.128.417

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ИОНИЗИРОВАННОЙ ПРИМЕСИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Д.С. СПЕРАНСКИЙ, В.М. БОРЗДОВ, Д.В. ПОЗДНЯКОВ

Белорусский государственный университет
пр. Независимости, 4а, 220030, Беларусь

Поступила в редакцию 9 декабря 2010

Рассмотрены основные подходы к описанию процесса рассеяния электронов на ионизированной примеси при численном моделировании электрофизических свойств полупроводников и полупроводниковых структур методом Монте-Карло. Показана возможность корректного описания процесса примесного рассеяния с помощью модели Ридли, в рамках которой предложен эффективный алгоритм нахождения полярного угла рассеяния θ . Для сравнения рассмотренных модельных приближений рассчитаны и проанализированы гистограммы угловых распределений и плотности вероятности для величины $\cos(\theta)$ для легированного объемного кремния при различных значениях концентрации примеси N_i и энергии электрона E .

Ключевые слова: метод Монте-Карло, рассеяние на ионизированной примеси, угол рассеяния θ , угловое распределение.

Введение

При адекватном численном моделировании электрофизических свойств полупроводников и полупроводниковых структур необходимо учитывать множество различных физических эффектов, влияющих на перенос в них носителей заряда. Одним из наиболее перспективных методов такого моделирования является метод Монте-Карло. Важнейшим преимуществом данного метода является возможность использования точных матричных элементов перехода носителя заряда при его взаимодействии с рассеивателем для любого механизма рассеяния в полупроводнике [1–3]. А это, как следствие, дает возможность строить достаточно сложные модели переноса, с помощью которых удается получать результаты, находящиеся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

При моделировании кинетических процессов в полупроводниках методом Монте-Карло особого внимания заслуживает рассеяние на ионизированной примеси, поскольку оно существенно влияет на кинетические свойства сильнолегированных полупроводниковых областей. В частности, этот вид рассеяния будет играть весьма существенную роль при рассмотрении субмикронных полевых МОП-транзисторов из-за высокого уровня легирования истоковых и стоковых областей, а также подложки.

В настоящей работе рассмотрены основные подходы к описанию процесса рассеяния электронов на ионизированной примеси при численном моделировании методом Монте-Карло электрофизических свойств полупроводниковых структур, а также предложен новый эффективный алгоритм нахождения полярного угла рассеяния электрона θ после его взаимодействия с заряженным центром для модели Ридли.

Модели примесного рассеяния

Рассматривая классическую задачу рассеяния электрона на кулоновском потенциале иона, полное поперечное сечение рассеяния можно представить в виде [3]:

$$\sigma = \pi b^2 = 2\pi \int_0^\pi \sigma_d(\theta') \sin \theta' d\theta', \quad (1)$$

где θ – угол рассеяния, b – прицельный параметр, $\sigma_d(\theta)$ – дифференциальное поперечное сечение рассеяния. Хорошо известно, что из-за расходимости величины $\sigma_d(\theta)$, при $\theta \rightarrow 0$ интеграл в выражении (1) расходится, поэтому полное сечение рассеяния для кулоновского взаимодействия стремится к бесконечности, что является следствием бесконечно большого радиуса действия кулоновских сил [1].

На сегодняшний день при моделировании кинетических процессов в полупроводниках методом Монте-Карло чаще всего используются три основных подхода, позволяющие в той или иной мере снять расходимость интеграла в формуле (1): хорошо известные модели Конуэлл-Вайскопфа (CW) и Брукса-Херринга (BH), а также менее распространенная модель исключения третьего тела или метод Ридли.

Приближение Конуэлл-Вайскопфа состоит в ограничении сверху допустимых значений прицельного параметра b половиной среднего расстояния между примесными центрами [1, 4, 5]:

$$b_{\max} = \frac{1}{2}(N_I)^{-1/3}, \quad (2)$$

где N_I – концентрация ионизированной примеси.

Подход Брукса-Херринга учитывает экранирование кулоновского потенциала двухчастичного взаимодействия. В этой модели кулоновский потенциал заменяется потенциалом Юкавы $V(r)$ [1, 4, 5]:

$$V(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \exp(-r\beta_S), \quad (3)$$

где $\beta_S = \left(\frac{e^2 N_0}{\epsilon\epsilon_0 k_B T} \right)^{1/2}$ – обратный радиус экранирования Дебая, r – расстояние до примесного центра, ϵ_0 – диэлектрическая постоянная, ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника, Ze – заряд иона, N_0 – концентрация свободных носителей, k_B – постоянная Больцмана.

Однако следует иметь в виду, что экранирование может быть не настолько сильным, чтобы ограничить величину поперечного сечения площадью круга с диаметром меньшим, чем среднее расстояние между примесями. Очевидно, что в этом случае процесс рассеяния уже некорректно рассматривать как простое двухчастичное взаимодействие [4]. Таким образом, хотя модель BH строится, исходя из принципа двухчастичного рассеяния на ближайшем примесном центре, она все же не исключает возможности рассеяния электрона на более удаленном, третьем центре рассеяния. Если при этом ввести весовой множитель, который будет играть роль вероятности того, что данный акт рассеяния является чисто двухчастичным процессом рассеяния на ближайшем центре рассеяния, то подходы Брукса-Херринга и Конуэлл-Вайскопфа возможно согласовать [4]. Такой метод получил название эффекта исключения третьего тела или метода Ридли [1, 4, 6]. Его основная суть состоит в следующем.

Если предположить, что вероятность p существования какого-либо другого центра рассеяния, по отношению к которому прицельный параметр b будет находиться в интервале $[b, b+db]$, равна [4]:

$$p = 2\pi N_I a b db, \quad (4)$$

то несложно показать [4], что вероятность отсутствия рассеивающих центров с прицельным параметром, меньшим b_m , можно представить в виде:

$$P(b) = \exp(-\pi a b_m^2 N_I), \quad (5)$$

где a – среднее расстояние между ионами.

Тогда, если дифференциальное поперечное сечение, рассчитанное по модели ВН, умножить на эту вероятность $P(b)$, то приходим к простой формуле для определения соответствующего дифференциального сечения по модели Ридли [6]:

$$\sigma_{R,d}(\vec{k}, \theta) = P(b) \sigma_{ВН,d}(\vec{k}, \theta). \quad (6)$$

Таким образом, вероятность $P(b)$ является множителем, исключаяющим влияние третьего тела.

На рис. 1 приведены зависимости интенсивностей примесного рассеяния в кремнии от энергии электрона E при различных концентрациях N_I и температурах T . Если учесть, что кулоновское рассеяние является остроугольным и требует больших затрат машинного времени [1], то в этой связи использование в алгоритме Монте-Карло модели ВН становится более предпочтительным по сравнению с моделью СW в широком диапазоне энергий электрона, т.к. в первом случае вероятность рассеяния уменьшается при достаточно высоких энергиях. Однако с уменьшением концентрации примеси модель ВН дает неоправданный рост интенсивности рассеяния при малых значениях энергии. Это, очевидно, связано с тем, что использование первого борновского приближения, в условиях которого она получена, становится некорректным. С учетом вышесказанного более приемлемым в данном случае является использование модели Ридли, которая приводит к результатам, находящимся в лучшем согласии с экспериментальными данными [6].

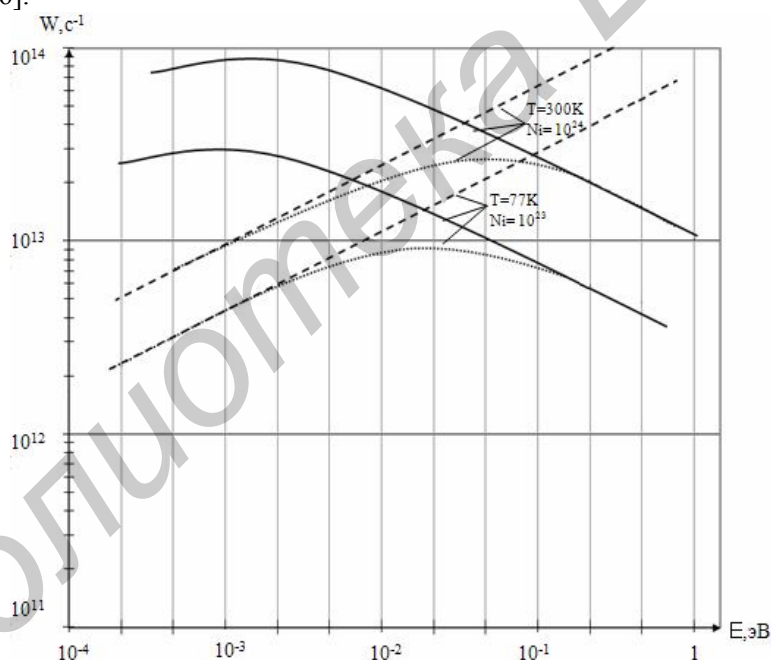


Рис. 1. Зависимость интенсивностей рассеяния на ионизированной примеси от энергии носителя заряда в кремнии при двух значениях N_I и T ; $Z=1$: (---) модель Конуэлл Вайскопфа (CW), (—) модель Брукса-Херринга (ВН), (· · · · ·) модель Ридли [6]

Моделирование угловых распределений

Важную роль при моделировании методом Монте-Карло взаимодействия электрона с ионом примеси играет выбор состояния электрона после рассеяния. Рассматривая этот процесс абсолютно упругим, оно задается единственной величиной – полярным углом θ , а азимутальный угол φ считается равномерно распределенной случайной величиной на интервале от 0 до 2π [1, 5, 8]. Ниже кратко рассмотрим процедуры розыгрыша угла θ .

Как известно, интенсивность рассеяния на примеси в первом борновском приближении для потенциала Юкавы (или вероятность рассеяния в единицу времени) можно представить в виде [8]:

$$P_{e,I}(E) = \frac{Z^2 N_I e^4 m^* k}{2\pi \hbar \epsilon^2 \epsilon_0^2} \int_{-1}^{\cos \theta_{\min}} \frac{d \cos \theta'}{[\beta_s^2 + 2k^2(1 - \cos \theta')]^2}, \quad (7)$$

где m^* – эффективная масса электрона, \hbar – редуцированная постоянная Планка.

Используя метод обратных функций, несложно получить следующее выражение для розыгрыша методом Монте-Карло угла рассеяния θ [8]:

$$z = \frac{P'_{e,I}(E)}{P_{e,I}(E)} = \frac{\int_{\cos \theta_z}^{\cos \theta_{\min}} \frac{d \cos \theta'}{[\beta_s^2 + 2k^2(1 - \cos \theta')]^2}}{\int_{-1}^{\cos \theta_{\min}} \frac{d \cos \theta'}{[\beta_s^2 + 2k^2(1 - \cos \theta')]^2}}, \quad (8)$$

где z – равномерно распределенное на интервале $[0, 1]$ случайное число. Из (8) непосредственно следует:

$$\cos \theta_z = 1 - 2 \frac{\left(1 + 4 \frac{E}{E_D}\right) \sin^2(\theta_{\min}/2) + z \cos^2(\theta_{\min}/2)}{1 + 4 \left(\frac{E}{E_D}\right) [1 - z \cos^2(\theta_{\min}/2)]}, \quad (9)$$

$$\text{где } E_D = \frac{\hbar^2 \beta_s^2}{2m^*}.$$

Для модели ВН, учитывающей экранирование, полагая $\theta_{\min} = 0$, выражение (9) примет вид [1, 8]:

$$\cos \theta_z^{BH} = 1 - \left[2(1 - z) / (4(E/E_D)z + 1)\right]. \quad (10)$$

Для модели СВ $\beta_s = 0$ и тогда [8]:

$$\cos \theta_z^{CW} = \left[\left((E/E_b)^2 z - 1 \right) / \left((E/E_b)^2 z + 1 \right) \right], \quad (11)$$

$$\text{где } E_b = \frac{e^2}{8\pi \epsilon \epsilon_0 b_{\max}}.$$

Для модели Ридли, с учетом выражения (5), несложно получить следующее выражение для расчета вероятности рассеяния в единицу времени [1, 7]:

$$P^R(E) = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2E}{m^*}} \left[1 - \exp\left(-\frac{a \sqrt{m^*} P_{BH}(E)}{\sqrt{2E}} \right) \right], \quad (12)$$

где $P_{BH}(E)$ – вероятность рассеяния в единицу времени, рассчитанная по модели Брукса-Херринга.

В этом случае в работе [7] для розыгрыша угла рассеяния θ была предложена процедура, согласно которой сначала разыгрывается прицельный параметр b , а затем путем инверсии выражения (1), где $\sigma_{R,d}(\theta) = \sigma_{BH,d}(\theta) \exp(-\pi a N_I b^2)$ определяется значение θ . Согласно [7], используя метод обратных функций, будем иметь:

$$z = \frac{\int_b^{b_m} b \exp(-\pi a N_I b^2) db}{\int_0^{b_m} b \exp(-\pi a N_I b^2) db}. \quad (13)$$

Поскольку

$$\int_0^{b_m} b \exp(-\pi a N_I b^2) db = \frac{1}{2\pi a N_I} (1 - \exp(-\pi a N_I b_m^2)),$$

то [7]:

$$z = \frac{\exp(-\pi a N_I b^2) - \exp(-\pi a N_I b_m^2)}{1 - \exp(-\pi a N_I b_m^2)}, \quad (14)$$

где b_m определяется из соотношения:

$$\pi b_m^2 = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma_{R,d}(\cos(\theta)) d \cos(\theta).$$

Из (14) следует, что параметр b , очевидно, может быть найден с помощью метода Монте-Карло.

Для оптимизации процедуры нахождения угла θ в методе Ридли, чтобы избежать вначале розыгрыша параметра b согласно (14), а затем процедуры инверсии уравнения (1), в настоящей статье предлагается непосредственно определять угол из выражения (9) с учетом поправки (5), учитывающей вероятность отсутствия другого центра рассеяния. Тогда, с использованием выражения (5), на основании (7) и (13) имеем:

$$z_1 z_2 = \frac{\int_{\cos \theta_z}^{\cos \theta_{\min}} \frac{d \cos \theta'}{[\beta_s^2 + 2k^2(1 - \cos \theta')]^2} \times \frac{\exp(-\pi a N_I b^2) - \exp(-\pi a N_I b_m^2)}{1 - \exp(-\pi a N_I b_m^2)}}{\int_{-1}^{\cos \theta_{\min}} \frac{d \cos \theta'}{[\beta_s^2 + 2k^2(1 - \cos \theta')]^2}}, \quad (15)$$

где z_1 и z_2 два случайных числа, равномерно распределенных на отрезке от 0 до 1.

Таким образом, формула (15) позволяет непосредственно определить угол θ , разыгрывая всякий раз два случайных числа z_1 и z_2 . Эта процедура значительно упрощается, если в правой части (15) экспоненты разложить в ряд Тейлора и ограничиться двумя членами этого ряда. В этом случае можно получить аналитическое выражение для $\cos(\theta)$. Действительно, для модели Ридли можно использовать простую связь прицельного параметра b и угла рассеяния θ [1]:

$$b = K \frac{\sqrt{1 + \cos(\theta)}}{\sqrt{1 - \cos(\theta)}}, \quad (16)$$

где $K = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m^* v^2}$. Выполняя операции интегрирования в выражении (15), а также учитывая

(16), приходим к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} & (\cos \theta_z - 1)^2 (1 + \cos \theta_m) (2Ez_1 z_2 (1 + \cos \theta_m) - (E - E_D)(1 - \cos \theta_m)) - \\ & (\cos \theta_z - 1) [z_1 z_2 E_D (1 + \cos \theta_m)^2 + 4(E_D + 4E)(1 - \cos \theta_m)] + 2(E_D + 4E)(1 - \cos^2 \theta_m) = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Введем обозначения:

$$m = (1 + \cos \theta_m) (2Ez_1 z_2 (1 + \cos \theta_m) - (E - E_D)(1 - \cos \theta_m)),$$

$$n = z_1 z_2 E_D (1 + \cos \theta_m)^2 + 4(E_D + 4E)(1 - \cos \theta_m),$$

$$h = 2(E_D + 4E)(1 - \cos^2 \theta_m).$$

Решением уравнения (17) очевидно будет корень вида $\frac{n - \sqrt{n^2 - 4mh}}{2m}$. Второй корень $\frac{n + \sqrt{n^2 - 4mh}}{2m}$ не имеет смысла, поскольку в этом случае прицельный параметр b больше максимально допустимого значения.

Таким образом, окончательно получаем аналитическое выражение для розыгрыша $\cos(\theta_z)$:

$$\cos\theta_z^R = 1 + \frac{\sqrt{n^2 - 4mh} - n}{2m}. \quad (18)$$

Результаты расчетов угла рассеяния θ

Для подтверждения корректности предложенной процедуры розыгрыша угла θ , в настоящей работе в качестве примера были рассчитаны плотности вероятности $P(\cos(\theta))$ при $T = 300\text{ К}$, $N_I = 10^{24}\text{ м}^{-3}$ и двух различных значениях энергии E (рис. 2, 3).

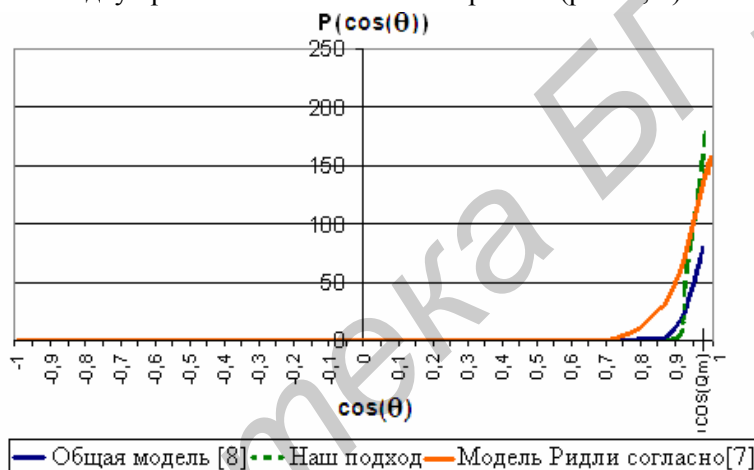


Рис. 2. Плотность вероятности $\cos(\theta)$ при $E=0,1\text{ эВ}$, $N_I=10^{24}\text{ м}^{-3}$, $T=300\text{ К}$

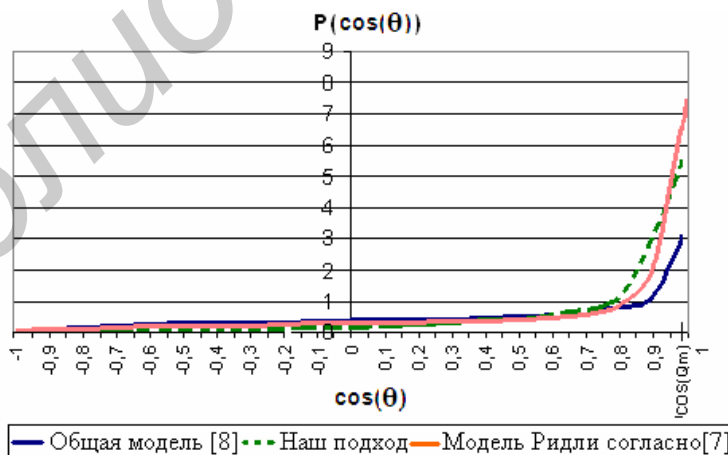


Рис. 3. Плотность вероятности $\cos(\theta)$ при $E=1\text{ эВ}$, $N_I=10^{24}\text{ м}^{-3}$, $T=300\text{ К}$

Из этих рисунков видно, что предложенная модель хорошо согласуется с результатами, рассчитанными по общей формуле [8] и по процедуре розыгрыша угла θ , предложенной в [7].

Угловое распределение, полученное нами согласно формуле (15) при энергии электрона $E=0,01\text{ эВ}$ (рис. 4) носит выраженный остроугольный характер, что говорит об адекватном описании процесса рассеяния электронов на ионизированной примеси [1].

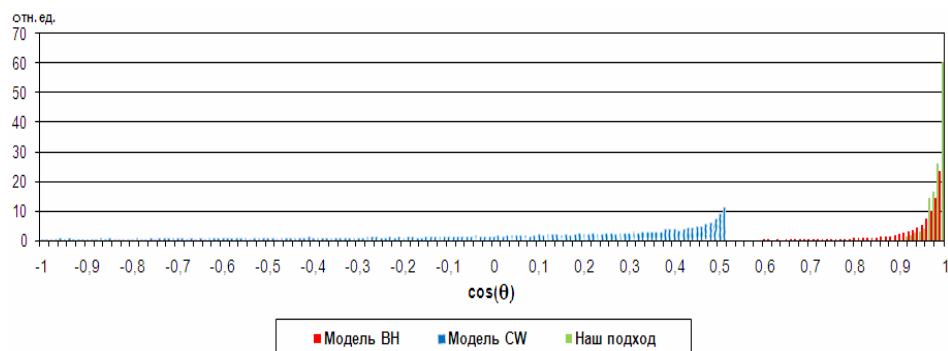


Рис. 4. Гистограмма распределения $\cos\theta$, при $N_I=1023 \text{ м}^{-3}$, $E=0,01 \text{ эВ}$, $T=300 \text{ К}$

Отметим, что предложенная в настоящей статье процедура розыгрыша углового распределения является более общей, чем та, которая была описана в [9].

Заключение

Таким образом, предложенный в данной статье подход позволяет упростить процедуру розыгрыша углового распределения при моделировании процессов рассеяния электронов на ионизированной примеси методом Монте-Карло по модели Ридли. Такой подход позволяет непосредственно определять угол рассеяния из общей формулы (9), минуя процедуру инверсии, описанную в работах [7] и [10].

MONTE-CARLO SIMULATION OF IONIZED IMPURITY SCATTERING IN SEMICONDUCTORS AND SEMICONDUCTOR STRUCTURES

D.S. SPERANSKY, V.M. BORZDOV, D.V. POZDNYAKOV

Abstract

The basic approaches to the description of ionized impurity scattering process at numerical simulation of electrophysical properties of semiconductors and semiconductor structures by Monte-Carlo method are considered. Possibility of its correct description within the frame of Ridley model is shown. Effective algorithm of polar angle θ selection in case of Ridley model is offered.

As an example doped bulk silicon angle distribution histograms and probability density of $\cos(\theta)$ for various values of impurity concentration N_I and electrons energy E are presented.

Литература

1. Иващенко В.М., Митин В.В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло. Киев, 1990.
2. Борздов В.М., Комаров Ф.Ф. Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Минск, 1999.
3. Борздов В.М. Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники. Минск, 2007.
4. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М., 1986.
5. Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation. Wien-New York, 1989.
6. Speransky D.S. Monte Carlo simulation of ionized impurity scattering process in bulk silicon. NDTCS'08
7. Van de Roer T.G., Widdershoven F.R. // J. Appl. Phys. 1986. V. 59, №3. P. 813–815.
8. Jacoboni C., Reggiani L. // Rev. Mod. Phys. 1983. V. 55, №3. P. 645–705.
9. Борздов В.М., Сперанский Д.С. // CriMiCo'2010. 2010. P. 867–868.
10. J. Bude // Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond, edited by Karl Hess, Kluwer Academic Publishers, Boston/Dordrecht/London