



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 9 за 2016 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Березин А.В., Волков Ю.А.,
Казымов Ш.А., Марков М.Б.,
Тараканов И.А.

Моделирование
радиационной проводимости
статистическим методом
частиц

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Моделирование радиационной проводимости статистическим методом частиц / А.В.Березин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 9. 20 с. doi:[10.20948/prepr-2016-9](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-9)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-9>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

А.В. Березин, Ю.А. Волков, Ш.А. Казымов,
М.Б. Марков, И.А. Тараканов

Моделирование
радиационной проводимости
статистическим методом частиц

Москва — 2016

Березин А.В., Волков Ю.А., Казымов Ш.А., Марков М.Б., Тараканов И.А.

Моделирование радиационной проводимости статистическим методом частиц

Рассматривается перенос электронов проводимости и дырок валентной зоны в полупроводниках и диэлектриках. Используются квантовые кинетические уравнения для функций распределения электронов и дырок в фазовом пространстве координат и квазиимпульсов. Интеграл столкновения моделируется с помощью статистического метода частиц. Рассмотрены основные типы рассеяния носителей заряда. Проведён расчёт дрейфовой скорости в чистом и легированном кремнии.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, метод частиц, метод Монте-Карло, частота рассеяния, дрейфовая скорость

Andrei Vsevolodovich Berezin, Volkov Yuri Aleksandrovich, Kazymov Shamil Adil Ogly, Markov Mikhail Borisovich, Tarakanov Ilya Alekseevich

Modelling of radiation conductivity by statistic particle method

The transfer of conduction electrons and valence band holes in semiconductors and dielectrics is considered. Quantum kinetic equations for conduction electron and valence band hole distribution functions in phase space of position and quasi-momentum are used. The scattering integral is modeled by statistic particle method. Main types of carriers scattering are considered. Calculation of drift velocity is carried out in non-doped and doped silicon.

Key words: kinetic equation, particle method, Monte-Carlo method, scattering rate, drift velocity

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 14-01-00350, 15-01-03027_2015.

Введение

Ионизирующее излучение космического пространства является одной из причин отказов микроэлектронных приборов космических аппаратов [1]. Ионизирующие излучения имеют разный состав: электроны и протоны радиационных поясов Земли, тяжелые заряженные частицы солнечных вспышек, гамма-излучение, а также источники техногенного происхождения. Одним из каналов воздействия таких излучений на приборы являются объемные ионизационные эффекты, являющиеся следствием рассеяния воздействующих излучений в активной зоне изделий микроэлектроники [2]. Рассеяние электронов и фотонов приводит к возникновению радиационной проводимости активной зоны, многократно превышающей собственную проводимость ее материала. Характеристики прибора при этом отклоняются от штатных значений. При достаточно высоком уровне воздействия в приборе возникает сбой.

Радиационная проводимость обусловлена многими взаимосвязанными процессами. Среди них перенос излучения космического пространства в материалах прибора, генерация и движение в активной зоне избыточных носителей заряда – электронов проводимости и дырок валентной зоны, передача их энергии фононам кристалла, а также многие другие. В активных зонах микроэлектронных приборов распределено внешнее электрическое поле, созданное штатными токами и напряжениями, которое необходимо учитывать при движении зарядов.

В данной работе представлена математическая модель радиационной проводимости невырожденных полупроводников с зонной структурой электронного спектра. Для конкретизации задачи в качестве ионизирующего воздействия рассматривается тормозное излучение электронов сильноточного ускорителя [3]. Фотоны тормозного излучения в результате комптоновского рассеяния и фотопоглощения генерируют в преграде – кристалле полупроводника – поток свободных электронов с энергиями до 1 МэВ. Рассеяние этих электронов порождает в кристалле избыточные носители заряда с энергией порядка 1 эВ. Их состояние описывается в приближении скалярной эффективной массы с поправкой на ее зависимость от энергии [4-6]. В качестве материала преграды выбран кремний, поскольку плотность энергетических состояний для него исследована детально [7-9]. Это позволяет вычислить эффективные массы и групповые скорости электронов и дырок, определяющие кинетику носителей заряда.

Для газовой плазмы в некоторых случаях можно ограничиться бесстолкновительными моделями. Тогда задача переноса заряда сводится к решению уравнения Власова, например, методом частиц. В моделях плазмы твердого тела и задачах твердотельной электроники бесстолкновительное приближение не реализуется [6]. По этой причине перенос заряда в кристаллических полупроводниках и диэлектриках исследуется методом Монте-Карло [7], [8], [10-15]. Данный метод является классическим для линейного уравнения переноса и эффективно применяется для моделирования движения и рассеяния носителей заряда в активной зоне изделия микроэлектроники. Линейность предполагает, что

внешнее излучение не изменяет рассеивающих свойств кремния, а носители заряда движутся в заданном штатном электрическом поле работающего прибора.

Данная работа сохраняет первое из вышеуказанных приближений. Уровни воздействия ионизирующих излучений ограничиваются значениями, при которых перераспределением вещества активной зоны и влиянием ее нагрева на частоты рассеяния можно пренебречь. При этом рассматривается влияние тока свободных электронов и радиационной проводимости на электрическое поле в активной зоне.

По указанным причинам модель строится на основе метода частиц, дополненного статистическим описанием столкновений [14,16]. Отличие предлагаемого подхода от метода Монте-Карло заключается в следующем. Метод Монте-Карло предполагает независимость испытаний. После того, как носитель заряда пройдет всю свою траекторию и внесет вклад в показания детектора, например, в ток радиационной проводимости через заданную поверхность, его можно исключить из рассмотрения. В действительности электрическое поле определяется текущей плотностью тока всех носителей заряда, что не позволяет рассчитывать траектории частиц отдельно друг от друга.

Движение частицы под действием силы Лоренца, подвержено случайным возмущениям, которые соответствуют различным процессам рассеяния. Другими словами, движение частиц описывается стохастическими дифференциальными уравнениями [17] и представляет собой случайный процесс [18,19]. Это не нарушает основополагающий принцип кинетической теории, а именно макроскопические характеристики среды есть средние от характеристик отдельных частиц.

Интеграл столкновений в кинетических уравнениях

Рождающиеся под действием ионизирующего излучения носители заряда обладают энергией $\varepsilon \gg k_b T$, где k_b – постоянная Больцмана, T – температура кремния. Поэтому функции распределения электронов проводимости $f_e = f_e(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ и дырок валентной зоны $f_p = f_p(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ далеки от равновесных распределений и зависят от времени t , координат \mathbf{r} и квазиимпульса \mathbf{p} . Они подчинены квантовым кинетическим уравнениям [20] с интегралами столкновений, описывающими рассеяние электронов на дефектах решетки:

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} + I[f_e, f_e] = Q_e, \quad (1)$$

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{r}} + e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} + I[f_p, f_p] = Q_p. \quad (2)$$

Электромагнитное поле в (1) и (2) в общем случае создается как рабочим напряжением прибора, так и движением всех заряженных частиц: свободных

электронов и носителей заряда в кристалле. Уравнения (1) и (2) дополняются уравнениями Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\mathbf{j} = e \left(\int \mathbf{v} f_p(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} - \int \mathbf{v} f_e(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \right) + \mathbf{j}_0 + \mathbf{j}_{ext}. \quad (4)$$

Первое слагаемое в правой части (4) описывает плотность тока электронов проводимости и дырок. Свободные электроны генерируют в кремнии плотность тока \mathbf{j}_0 . Она, также, как и источник неравновесных носителей Q , вычисляется как функционал функции распределения свободных электронов. Электрическое поле прибора устанавливается плотностью тока \mathbf{j}_{ext} , генерирующей ток заряжения прибора в его внешней цепи. Влиянием магнитного поля на движения носителей заряда можно пренебречь.

В невырожденном электронном и дырочном газах интеграл столкновений имеет вид:

$$I[f, f] = \int \{W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) - W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}')\} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (5)$$

Электроны проводимости и дырки валентной зоны испытывают упругое рассеяние на акустических фононах (АС-фононы); неупругое рассеяние на неполярных оптических фононах (ТО-фононы); упругое рассеяние на заряженных примесях (для сильно легированных полупроводников); ударную ионизацию; неупругое рассеяние на полярных оптических фононах (ЛО-фононы).

Каждый элементарный процесс рассеяния описывается в терминах скорости рассеяния $W^{(i)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, $i = a, b, c, \dots$ для реакции $\mathbf{p} \leftrightarrow \mathbf{p}'$. Если учитываются сразу несколько элементарных процессов, то полная скорость переходов является суммой по всем процессам $W = \sum_i W^{(i)}$. Скорость перехода отлична от нуля только при сохранении квазиимпульса, т.е.

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' = -\hbar\mathbf{q}$$

в случае поглощения фонона и

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \hbar\mathbf{q}$$

в случае его испускания. Испусканию или поглощению фонона с квазиимпульсом $\hbar\mathbf{q} = \pm(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ соответствует уменьшение или увеличение энергии электрона на величину кванта $\hbar\omega$

$$\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}) = \pm\hbar\omega(\mathbf{p} - \mathbf{p}')/\hbar.$$

Таким образом, вероятности переходов содержат дельта-функцию $\delta(\varepsilon' - \varepsilon \pm \hbar\omega)$. Верхний и нижний знаки относятся к испусканию или поглощению фонона, соответственно.

В соответствии с принципом детального равновесия отношение вероятностей поглощения и испускания зависит от разности энергий начального и конечного состояний электрона: $W^{abs} / W^{emis} \approx \exp(-\hbar\omega_{opt} / \kappa_B T)$. Подставляя сюда характерные значения энергии оптического фонона $\hbar\omega_{opt} = 0.1 \text{ эВ}$ и тепловой энергии электрона $\kappa_B T = 1/40 \text{ эВ}$, получим $W^{abs} / W^{emis} \approx 0.02$. По этой причине для быстрых ($\varepsilon \gg \kappa_B T$) электронов вклад поглощения во времена рассеяния мал по сравнению с испусканием.

В качестве величины, описывающей рассеяние носителя заряда, удобно использовать время релаксации τ_i :

$$\frac{1}{\tau_i} = \int W_i(\varepsilon, \varepsilon', \mu) g(\varepsilon') d\varepsilon' d\mu,$$

где \mathbf{p}' , μ - косинус угла рассеяния, $\mu = \mathbf{p}\mathbf{p}'/pp'$, $g(\varepsilon)$ - плотность энергетических состояний.

Величиной, обратной времени релаксации, является частота рассеяния. Результаты расчёта частот рассеяния для различных приближений относительно плотности состояния можно найти в [7], [15], [21].

Рассмотрим общие сведения о механизмах рассеяния носителей заряда.

Рассеяние на АС-фононах. Потерями энергии электронов пренебрегается, полагая $\hbar\omega_{ac} = 0$. Теория деформационного потенциала дает [22]

$$\frac{1}{\tau_{ac}(\varepsilon)} = \frac{C_1^2 \pi k_b T \cdot g(\varepsilon)}{\rho \hbar c_s^2}, \quad (6)$$

где C_1 - константа деформационного потенциала, ρ - плотность вещества, c_s - скорость звука в данном веществе. Рассеяние изотропно по углам.

Рассеяние на заряженных примесях имеет резерфордское сечение. Потерями энергии электронов пренебрегается, полагая $\Delta\varepsilon = 0$. В этом случае для транспортного времени имеется формула Конвелл-Вейскопфа [23]

$$\frac{1}{\tau_{pr}(\varepsilon)} = \frac{\pi e^4 n (\ln(1+x) - x/(1+x))}{\varepsilon_0 \varepsilon^{3/2} \sqrt{2m_d}},$$

где $m_d = 0,33m_e$ – масса электропроводности электрона, m_e – масса покоя электрона, n – концентрация примесей, $x = 8m_e Z^2 \cdot \varepsilon / h^2$, Z – параметр экранирования (обратный дебаевский радиус):

$$Z = \frac{1}{r_D} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{Si} \varepsilon_t}{4\pi n e^2}}.$$

В формуле для дебаевского радиуса ε_{Si} – диэлектрическая проницаемость кремния, ε_t – тепловая энергия электрона.

Угловое распределение рассеянных частиц имеет вид

$$P(\theta) = \frac{1}{c} \ln \left(\frac{1 + \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{e^2 n^{1/3}} \right)^2}{1 + (\text{ctg}(\theta/2))^2} \right), \quad c = \ln \left(1 + \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{e^2 n^{1/3}} \right)^2 \right). \quad (7)$$

На рис. 1 показана зависимость вероятности рассеяния электронов в легированном кремнии от угла рассеяния для разных концентраций примесей.

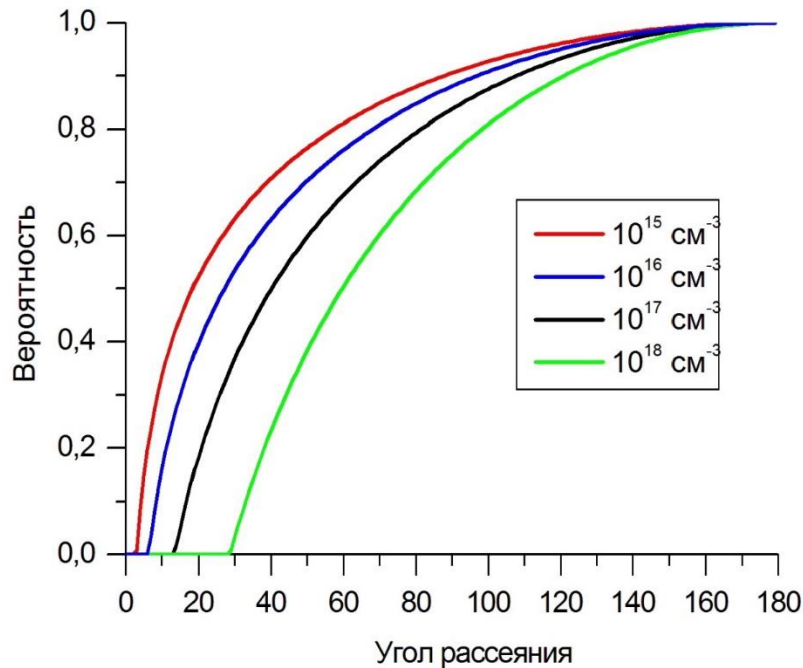


Рис. 1. Зависимость вероятности от угла рассеяния электронов на примесях в Si для концентрации примеси 10^{15} , 10^{16} , 10^{17} , 10^{18} $1/\text{см}^3$. Энергия рассеиваемого электрона 0,5 эВ.

Рассеяние на примесях имеет пороговый угол, который зависит от концентрации примеси. Чем больше концентрация примеси, тем меньше вероятность рассеяния на малые углы. На рис. 2 изображена зависимость $P(\theta)$ при заданных энергиях электрона.

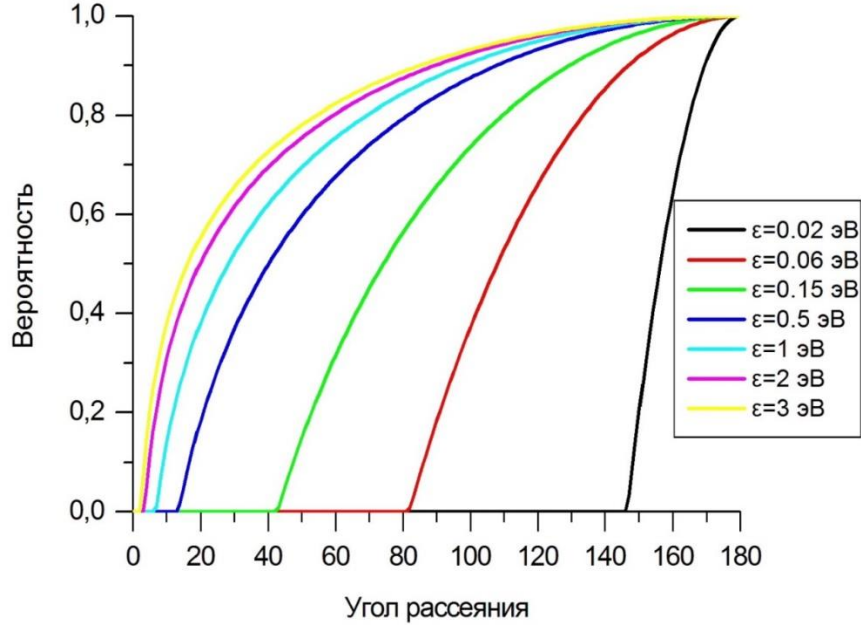


Рис.2. Зависимость вероятности от угла рассеяния электронов на примесях в Si для различных энергий электрона.

Предельный угол зависит от энергии рассеиваемого электрона, при малых энергиях электрона возможно рассеяние лишь на большие углы. Например, для тепловых электронов с энергией $\varepsilon = 0,025 \text{ эВ}$ угол рассеяния превысит 145 градусов.

Изменение энергии электрона при *рассеянии на LO-фононах* квантовано величиной $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_{LO}$, где $\hbar\omega_{LO}$ – энергия оптического фонона соответствующей ветви. Теория Фрелиха дает [15], [22], [24]

$$\frac{1}{\tau_{LO}(\varepsilon)} = \frac{e^2 \hbar^2 \omega_{LO}}{16\pi^2 m_e} \chi g(\varepsilon) N_{ph} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}{1 - \sqrt{1 - \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}, \quad (8)$$

где $\chi = 1/\varepsilon_0 - 1/\varepsilon_\infty$, ε_∞ – динамическая диэлектрическая проницаемость, ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость вещества. При достижении порога испускания

$$\frac{1}{\tau_{LO}(\varepsilon)} = \frac{e^2 \hbar^2 \omega_{LO}}{16\pi^2 m_e} \chi g(\varepsilon) N_{ph} \ln \frac{1 + \sqrt{1 + \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}{-1 + \sqrt{1 + \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}, \quad (9)$$

что соответствует поглощению. Рассеяние изотропно по азимутальному углу, но сильно зависит от полярного угла

$$P(\theta) = \frac{1}{c} \ln \left(\frac{\varepsilon + 2\sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_{LO}} \cdot \cos(\theta) + \varepsilon - \hbar\omega_{LO}}{(\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_{LO}})^2} \right), \quad (10)$$

$$c = \ln \left(\frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_{LO}}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_{LO}}} \right).$$

На рис. 3 и 4 изображены зависимости вероятностей рассеяния электронов в диоксиде кремния от угла рассеяния при взаимодействии с первой или второй ветвью оптических продольных фононов.

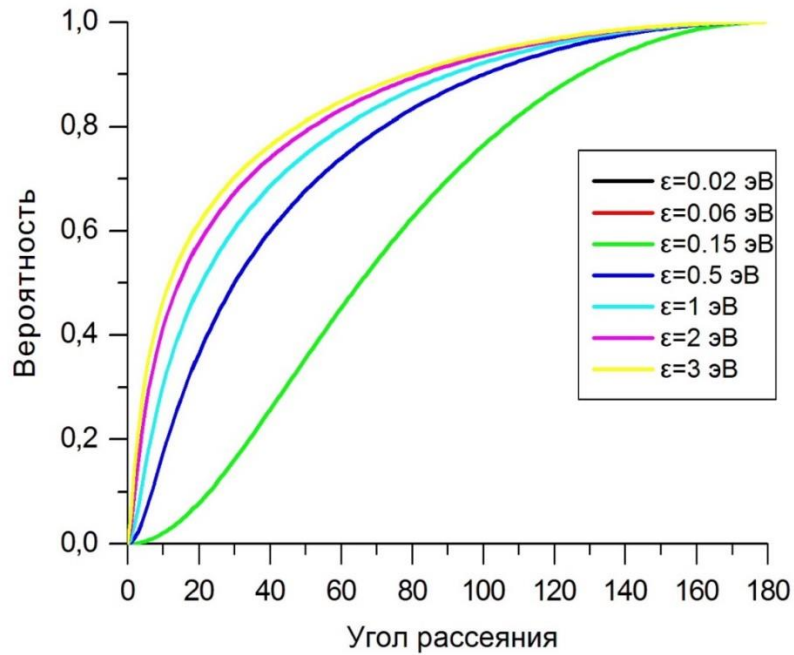


Рис. 3. Зависимость вероятности от угла рассеяния электронов на продольных оптических фононах первой ветви в SiO_2 для различных энергий электрона.

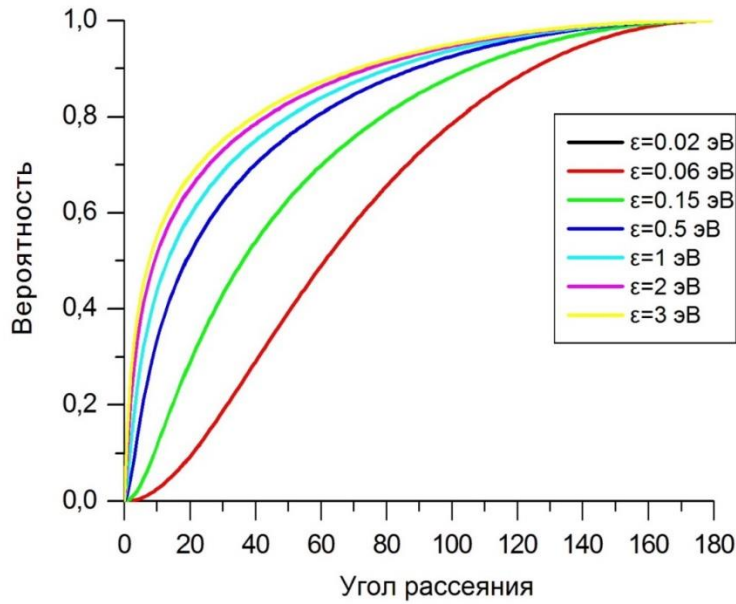


Рис. 4. Зависимость вероятности от угла рассеяния электронов на продольных оптических фононах второй ветви в SiO_2 для различных энергий электрона.

Изменение энергии электрона при *рассеянии на TO -фононах* составляет величину $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_{\text{TO}}$, где $\hbar\omega_{\text{TO}}$ – энергия поперечного оптического фонона. Теория деформационного потенциала дает [22]:

$$\frac{1}{\tau_{\text{TO}}(\varepsilon)} = \frac{C_2^2 N_{ph}}{2\rho\pi\omega_{\text{TO}}} \cdot g(\varepsilon \pm \hbar \cdot \omega_{\text{TO}}). \quad (11)$$

Здесь C_2 – константа деформационного потенциала, ρ – плотность вещества. Вероятность рассеяния не зависит от углов, поэтому формально рассеяние изотропно по углам.

Частота *ударной ионизации* зависит от энергии падающей частицы, которую ей передает свободный электрон или электрическое поле. Существует пороговая энергия, ниже которой частота ударной ионизации не превышает одного процента от суммарной частоты рассеяния [26]. Для кремния эта энергия составляет 2.5 эВ.

Начальный спектр носителей заряда в кристалле сосредоточен в области энергий менее 2.5 эВ. Доля электронов с энергиями больше 2.5 эВ составляет приблизительно 0.0015 [27].

Напряжённость электрического поля, в котором электрон достигает энергии в 2.5 эВ можно оценить в приближении непрерывного торможения [20]. Приращение энергии $\varepsilon(t + \Delta t) - \varepsilon(t)$ и скорости частицы $\mathbf{v}(t + \Delta t) - \mathbf{v}(t)$ в постоянном электрическом поле выражаются следующим образом:

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) \exp(-\Delta t / \tau[\varepsilon(t)]) + \frac{q\mu \mathbf{E} m_e \tau[\varepsilon(t)]}{m_{\text{eff}}[\varepsilon(t)] \langle \tau \rangle} (1 - \exp(-\Delta t / \tau[\varepsilon(t)])),$$

$$\varepsilon(t + \Delta t) = \varepsilon(t) \exp(-\Delta t / \tau[\varepsilon(t)]) + qe \mathbf{E} \mathbf{v}(t) \frac{\tau[\varepsilon(t)]}{2} (1 - \exp(-\Delta t / \tau[\varepsilon(t)]))$$

где $\langle \tau \rangle$ - усредненное по функции распределения время релаксации.

При $\Delta t \gg \tau[\varepsilon(t)]$ потеря энергии на рассеяние уравнивается ее приращением в поле

$$\mathbf{v} = \frac{q\mu \cdot \mathbf{E} \cdot m_e \tau(\varepsilon)}{m_{\text{eff}}(\varepsilon) \langle \tau \rangle}, \quad \varepsilon = qe \mathbf{E} \mathbf{v} \frac{\tau(\varepsilon)}{2}.$$

Отсюда напряженность электрического поля выражается формулой:

$$E = \sqrt{\frac{2m_{\text{eff}}(\varepsilon) \langle \tau \rangle}{q^2 e \mu \cdot m_e \tau(\varepsilon)^2}}. \quad (12)$$

Энергия 2.5 эВ достигается в поле с напряженностью 37000 ед. СГСЭ, что превышает электрическую прочность кремния. По указанным причинам ударной ионизацией можно пренебречь.

Алгоритм решения кинетических уравнений

Движение электрона проводимости между столкновениями описывается уравнением движения

$$\frac{d\mathbf{u}_e}{dt} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{E}. \quad (13)$$

Напряжённость электрического поля подчиняется уравнениям Максвелла (3). Алгоритм их численного решения изложен в [25]. При интегрировании уравнений движения поле не изменяется.

Выбор времени свободного пробега значительно упрощается, если суммарная частота $\nu_i = \sum_i 1/\tau_i$ всех процессов рассеяния является постоянной. По-

скольку в реальных ситуациях частота рассеяния зависит от энергии и не является постоянной, то в список процессов дополнительно включается эффективный процесс «саморассеяния», который не приводит к изменению параметров траектории. Возможный выбор частоты ν_i иллюстрирует рис. 5.

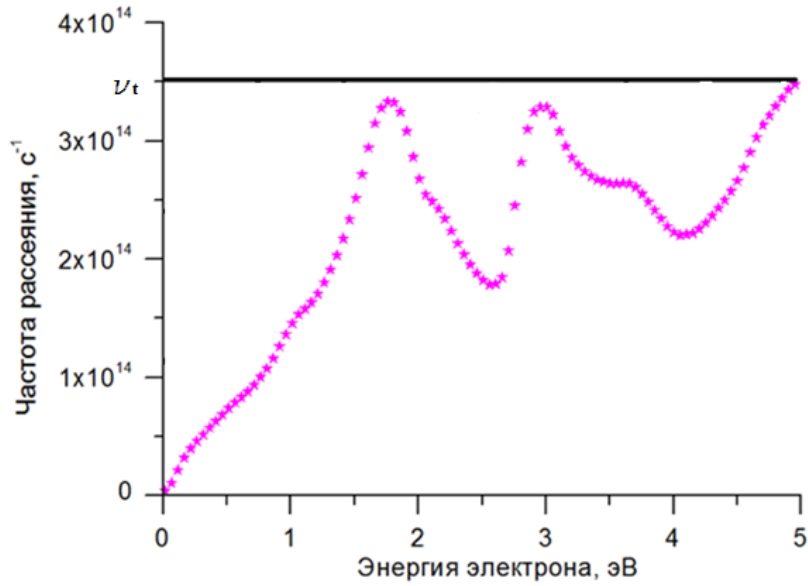


Рис. 5. Определение максимальной частоты рассеяния ν_t

После того, как величина ν_t выбрана, вероятность нахождения времени свободного пробега в интервале $(0, \tau)$ равна

$$P\{0 \leq t < \tau\} = \int_0^{\tau} \nu_t \exp(-\nu_t t') dt' = 1 - \exp(-\nu_t \tau). \quad (14)$$

Обозначим Δt - шаг интегрирования уравнений Максвелла, τ - время свободного пробега частицы, τ_R - время, которое осталось частице до конца шага, ξ - случайные числа, равномерно распределённые от 0 до 1. Схема алгоритма изображена на рис. 6.

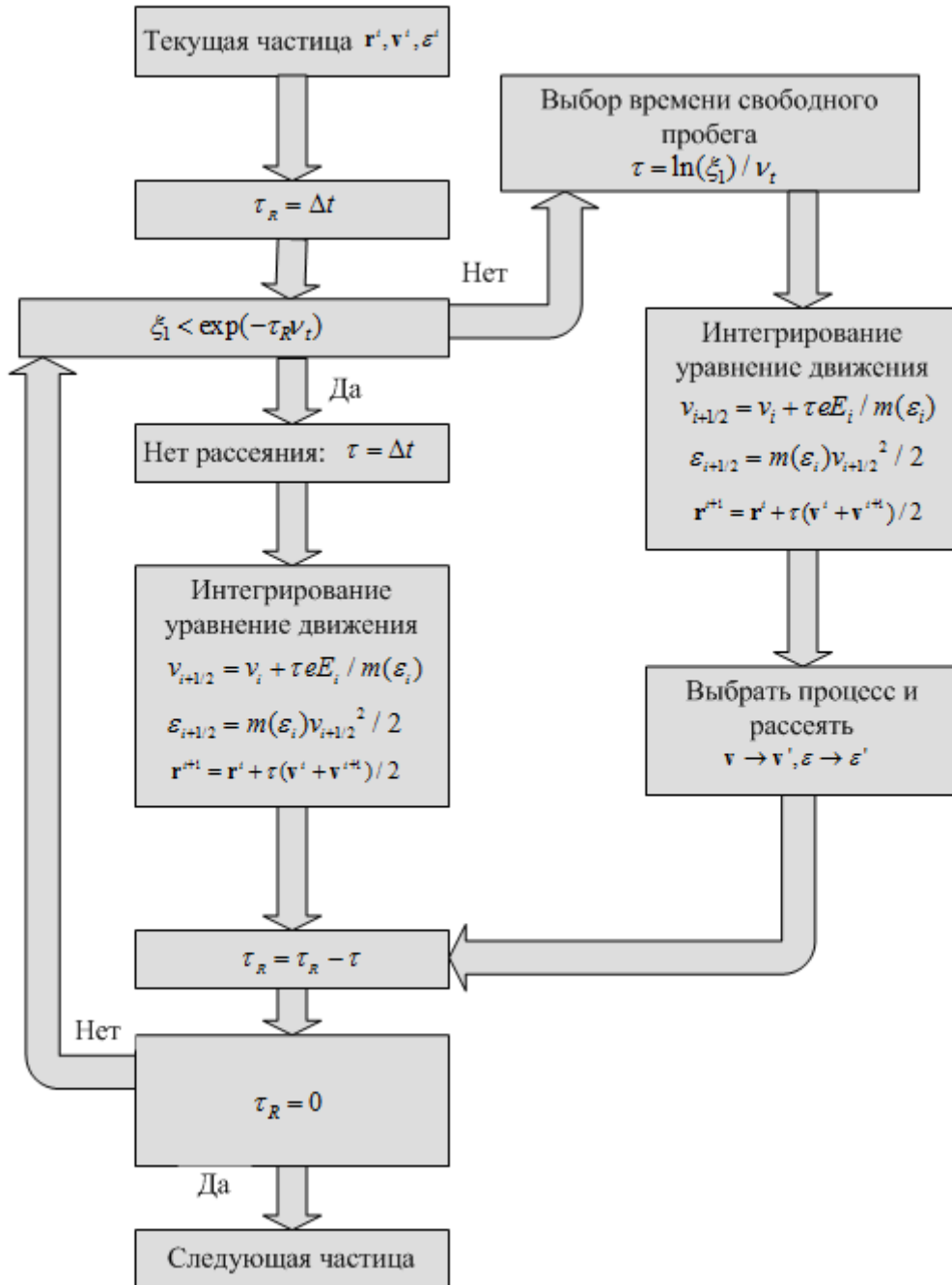


Рис. 6. Схема алгоритма

Угловое рассеяние осуществляется в два этапа (рис.7):

1. $\mathbf{v}' = \hat{S}_1 \mathbf{v}$ - поворот относительно оси $[\mathbf{v} \times \mathbf{z}]$ на угол θ , согласно формулам (7(10)), в зависимости от типа рассеяния.
2. $\mathbf{v}'' = \hat{S}_2 \mathbf{v}'$ - поворот относительно оси \mathbf{v} на угол φ .

Подробный вид матриц поворота \hat{S}_1 и \hat{S}_2 представлен в приложении 1.

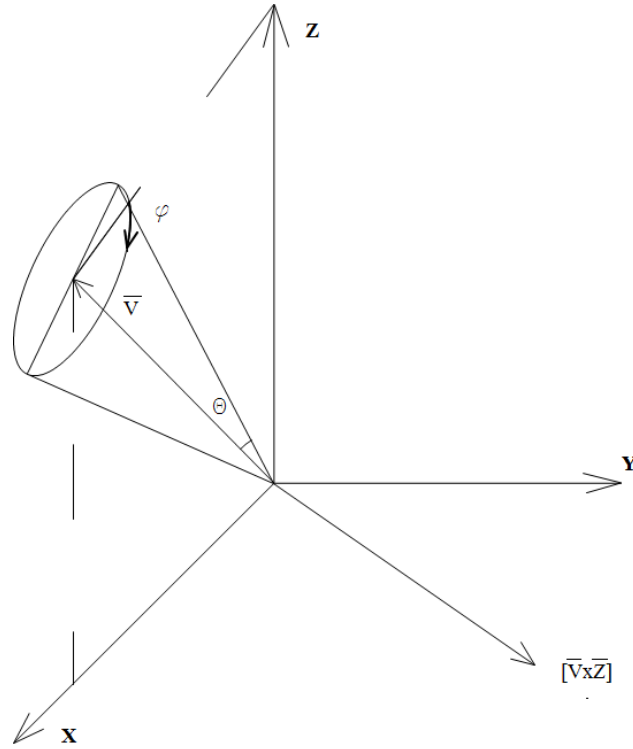


Рис. 7. Определение углов рассеяния θ и φ .

Результаты

Проверка модели и алгоритма проведена путем расчета средней дрейфовой скорости электронов в электрическом поле. В состоянии равновесия с температурой решетки T полупроводник имеет собственную проводимость

$$\sigma = en\mu_e + ep\mu_p, \quad (15)$$

где e - заряд электрона, n - равновесная концентрация электронов и дырок. Подвижность носителей заряда в (15) определяется средним временем потерь импульса

$$\mu_{e(p)} = e \langle \tau_{e(p)} \rangle / m_{e(p)}. \quad (16)$$

Угловые скобки $\langle \bullet \rangle$ означают осреднение по функции распределения частиц. Для невырожденного газа

$$\langle \tau \rangle = \frac{2}{3k_b T} \int_0^{\infty} \tau(\varepsilon) \varepsilon^{3/2} \exp(-\varepsilon/k_b T) d\varepsilon \Big/ \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon/k_b T) d\varepsilon. \quad (17)$$

В электрическом поле электрон приобретает дрейфовую составляющую скорости

$$\mathbf{v}_d = \mu \mathbf{E}, \quad \mu = e\lambda / \sqrt{m_e k_B T}. \quad (18)$$

Подвижность, а вместе с ней и дрейфовая скорость, определяются средней длиной свободного пробега в газе $\lambda = v_T \langle \tau \rangle$.

Дрейфовая скорость [28], [29] перестает зависеть от напряженности электрического поля в определенном интервале ее значений. Наблюдается эффект «насыщения» – дрейфовая скорость с ростом напряженности электрического поля выходит на постоянное значение $\approx 10^7$ см/с.

В работе [20] приведены результаты по расчёту дрейфовой скорости в приближении непрерывного торможения. Приближение позволяет получить совпадение с экспериментом, особенно в зоне низких значений напряжённости электрического поля. Это связано с тем, что при этих значениях напряжённости электроны имеют энергию ниже, чем энергия кванта оптического фонона (0.062 эВ). Модель непрерывного торможения адекватно описывает именно взаимодействие с акустическими фононами.

Применение прямого моделирования столкновений позволяет достичь более точного совпадения с экспериментом в зоне насыщения дрейфовой скорости (рис. 8).

Точность расчёта предлагаемым методом сильно зависит от количества частиц. Если частиц недостаточно, то не набирается приемлемая статистика и дрейфовая скорость не выходит на стационарное значение. Особенно это заметно при малых значениях напряженности электрического поля (рис. 8-10).

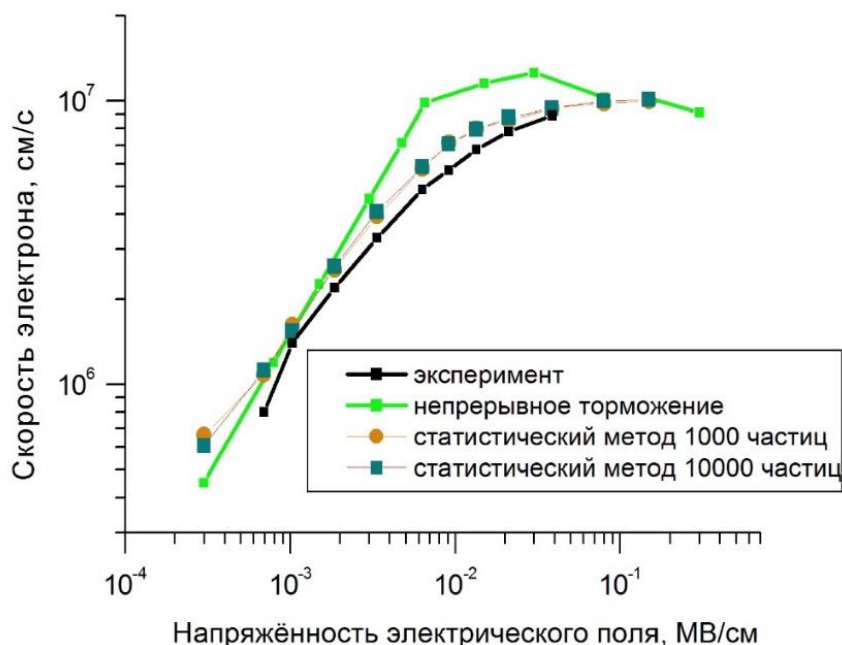


Рис. 8. Сравнение расчётных зависимостей дрейфовой скорости от напряжённости электрического поля с экспериментом.

В рамках предложенной модели исследовался дрейф электронов и дырок в стационарном электрическом поле в легированном кремнии с различными концентрациями доноров или акцепторов. На рис. 9 и 10 представлены графики зависимости дрейфовой скорости от напряженности электрического поля при

концентрациях примесей от 10^{12} до 10^{18} см^{-3} . Рассеяние на примесях концентрацией до 10^{15} см^{-3} не вносит заметного вклада в дрейф электронов и дырок в легированном кремнии. Если легирование достигает 10^{19} см^{-3} , то скорость дрейфа при малых значениях напряженности электрического поля снижается.

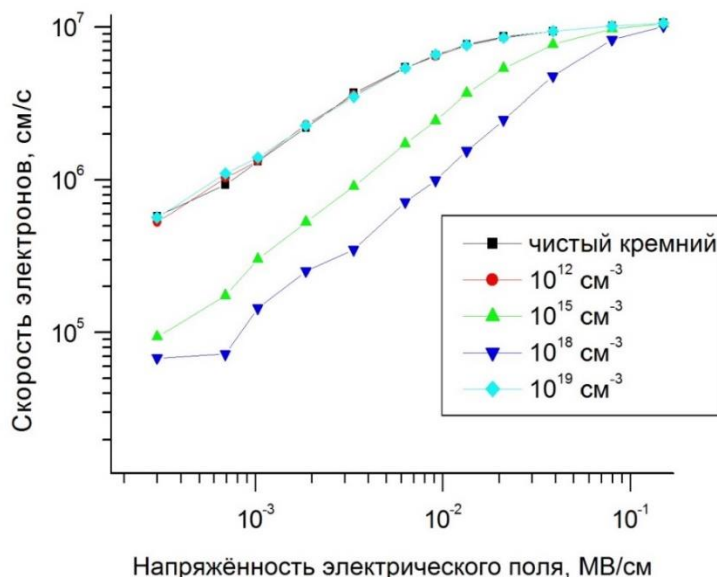


Рис. 9. График зависимостей дрейфовой скорости электронов от напряженности электрического поля в легированном кремнии для разных концентраций примесей.

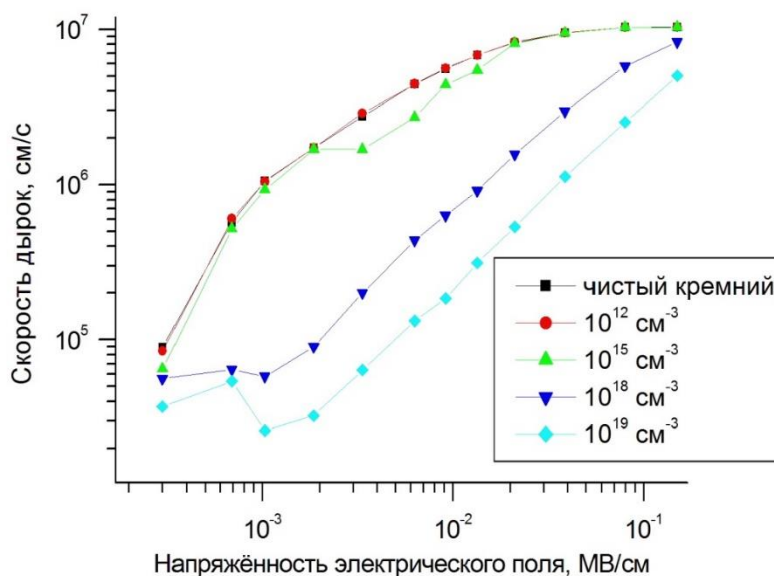


Рис. 10. График зависимостей дрейфовой скорости дырок от напряженности электрического поля в легированном кремнии для разных концентраций примесей.

Заключение

Представленная модель радиационной проводимости полупроводников разработана как составная часть технологии суперкомпьютерного моделирования функционирования изделий микроэлектроники в условиях воздействия ионизирующих излучений космического пространства. Данная технология предполагает использование библиотеки функций, обеспечивающей моделирование переноса ионизирующего излучения в материалах космического аппарата и окружающей среды, расчет распределений плотности тока свободных заряженных частиц и носителей заряда в полупроводниках, диэлектриках и газах, а также электромагнитных эффектов. Поэтому модель построена на тех принципах, которые применены для моделирования рассеяния падающего излучения [16]. Отличие заключается в использовании квантовых кинетических уравнений для электронов проводимости и дырок валентной зоны. Такой подход оказался вполне оправданным хотя бы потому, что прямое моделирование столкновений электронов проводимости и дырок валентной зоны повысило точность вычисления радиационной проводимости.

Приложение 1

Пусть $\mathbf{p} = (\xi \ \eta \ \mu)$ - единичный вектор, направленный вдоль оси вращения. Матрица вращения вокруг вектора \mathbf{p} на угол ψ имеет вид [30].

$$\begin{pmatrix} \xi^2(1-\cos\psi) + \cos\psi & \xi\eta(1-\cos\psi) - \mu\sin\psi & \xi\mu(1-\cos\psi) + \eta\sin\psi \\ \xi\eta(1-\cos\psi) + \mu\sin\psi & \eta^2(1-\cos\psi) + \cos\psi & \eta\mu(1-\cos\psi) - \xi\sin\psi \\ \xi\mu(1-\cos\psi) - \eta\sin\psi & \eta\mu(1-\cos\psi) + \xi\sin\psi & \mu^2(1-\cos\psi) + \cos\psi \end{pmatrix} \quad (19)$$

Используя определение углов рассеяния (рис. 7) и формулу (19), получим вид матрицы поворота \hat{S}_1 относительно вектора $(v_y/\sqrt{(v_x^2+v_y^2)} \quad -v_x/\sqrt{(v_x^2+v_y^2)} \quad 0)$:

$$\hat{S}_1 = \begin{pmatrix} \frac{v_y^2}{v_y^2+v_x^2}(1-\cos\theta) + \cos\theta & -\frac{v_y v_x}{v_y^2+v_x^2}(1-\cos\theta) & -\frac{v_x}{\sqrt{v_y^2+v_x^2}}\sin\theta \\ -\frac{v_x v_y}{v_y^2+v_x^2}(1-\cos\theta) & \frac{v_x^2}{v_y^2+v_x^2}(1-\cos\theta) + \cos\theta & -\frac{v_y}{\sqrt{v_y^2+v_x^2}}\sin\theta \\ \frac{v_x}{\sqrt{v_y^2+v_x^2}}\sin\theta & \frac{v_y}{\sqrt{v_y^2+v_x^2}}\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Матрица поворота \hat{S}_2 относительно вектора $(v_x \quad v_y \quad v_z)$ имеет вид:

$$\hat{S}_2 = \begin{pmatrix} v_x^2(1-\cos\varphi) + \cos\varphi & v_x v_y(1-\cos\varphi) - v_z \sin\varphi & v_x v_z(1-\cos\varphi) + v_y \sin\varphi \\ v_x v_y(1-\cos\varphi) + v_z \sin\varphi & v_y^2(1-\cos\varphi) + \cos\varphi & v_y v_z(1-\cos\varphi) - v_x \sin\varphi \\ v_x v_z(1-\cos\varphi) - v_y \sin\varphi & v_y v_z(1-\cos\varphi) + v_x \sin\varphi & v_z^2(1-\cos\varphi) + \cos\varphi \end{pmatrix}$$

Список литературы

1. Модель космоса: в 2т.. Т.2 : Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов, Ред. Панасюк М.И., Новиков Л.С., М.: КДУ. 2007.
2. Чумаков А.И. Действие космической радиации на интегральные схемы. М.: Радио и связь. 2004.
3. Официальный сайт ФГУП «НИИП» [Электронный ресурс]. URL: <http://www.niipribovov.ru/ckp/base.html> (Дата обращения 04.03.2014)
4. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников /Пер. с англ. М., 1978г.
5. Yu Peter Y., Cardona Manuel. Fundamentals of Semiconductors // Springer Science & Business Media. 2010г.
6. Протасов Ю.С., Чувашев С.Н. Твердотельная электроника. М.: Из-во МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2003. 480 с.
7. Fischetti M.V. Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semi-conductors of the diamond and zinc-blende structures // IEEE Trans. Electron Devices. 1991. 38. 634.
8. Wang X., Chandarmouli V., Mazar C.M., Tasch A.F. Simulation program suitable for hot carrier studies: An efficient multiband Monte Carlo model using both full and analytic band structure description for silicon // J. Appl. Phys. 1993. 73. 3339.
9. Gnani E., Reggiani S., Rudan M. Density of states and group velocity of electrons in SiO₂ calculated from a full band structure // Physical Review. 2002. B66. P. 195205.
10. Jacoboni C., Reggiani L. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials // Rev. Mod. Phys. 1983. 55 (3). 645.
11. Tang J., Hess K. Impact ionization of electrons in silicon (steady state) // J. Appl. Phys. 1983. 54. 5139.
12. Fischetti M.V. Monte Carlo solution to the problem of high-field electron heating in SiO₂ // Phys. Rev. Letters. 1984. 53. 1755-1758.
13. Fischetti M.V., Laux S.E. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band structure and space-charge effects // Phys. Rev. B. 1988. 38. 9721-9745.

14. Баннов Н.А., Рыжий В.И., Волков Ю.А. Методы макрочастиц в математическом моделировании элементов интегральных схем // Микроэлектроника. 1987. Т. 16. Вып. 3. с. 210-219.
15. Kunikiyo T., Takenaka M., Kamakura Y., Yamaji M., Mizuno H. A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact ionization model // J. Appl. Phys. 1995. 75. 297-312.
16. Березин А. В., Воронцов А. С., Жуковский М. Е., Марков М. Б., Паротькин С. В. Метод частиц для электронов в рассеивающей среде // ЖВМ И МФ. 2015. том 55. № 9. с. 1566–1578
17. Гихман И.И., Скороход А.В. Стохастические и их приложения. Киев: Наук. Думка. 1982. 612с.
18. Иванов М.Ф., Швец В.Ф. Метод стохастических дифференциальных уравнений для расчёта кинетики плазмы со столкновениями // ЖВМ и МФ. 1980. том 20. №2. с. 682-690.
19. Волков Ю.А., Полюдов А.Н. Дискретная модель уравнения Фоккера-Планка // ЖВМ и МФ. 1987. т. 27. №3. с. 428-440.
20. Березин А.В., Волков Ю.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. Радиационно-индуцированная проводимость кремния // Mathematica Montisnigri. 2015. Vol XXXIII. 69-82.
21. Волков Ю.А, Тараканов И.А. Радиационно-индуцированная проводимость в кремнии и оксиде кремния. Времена релаксации // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. 2013. № 84. С. 1-27.
22. Займан Дж. Электроны и фононы. М.: Издательство иностранной литературы, 1962.
23. Conwell E., Weisskopf V. F. Theory of impurity scattering in semiconductors // Phys. Rev. 1950. v. 77. p. 388.
24. Murphy-Armando F., Fahy S. First-principles calculation of carrier-phonon scattering in n-type $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys // Physical Review. 2008. B78. P. 035202.
25. Березин А.В., Воронцов А.В., Марков М.Б., Плющенко Б.Д. О выводе и решении уравнений Максвелла в задачах с заданным волновым фронтом полей // Математическое моделирование. 2006. 18 (4), 43-60.
26. Keldysh L.V. Concerning the Theory of Impact Ionization in Semiconductors // ЖЭТФ. 1965. Т. 48. № 6. С. 1692.
27. Childs P. A., Dyke D. W., Analytic expressions for impact ionization rates and secondary particle energy distributions in semiconductors // Appl. Phys. Lett. 1999. 74 (18). 2646 – 2648.

28. Смирнов Б.М. Кинетика электронов в газах и конденсированных системах // УФН. 2002. т.172. с.1411-1447.

29. Canali C., Jacobini C., Nava F., Ottavini G., Quaranta A. A. Electron drift velocity in silicon // Phys. Rev. 1975. В 12. p. 2265.

30. Годунов С.К., Михайлова Т.Ю. Представления группы вращений и сферические функции. Новосибирск: Научная книга. 1998. 197 с.

Оглавление

1. Введение	3
2. Интеграл столкновений в кинетических уравнениях	4
3. Алгоритм решения кинетических уравнений	11
4. Результаты	14
5. Заключение	17
Приложение 1	17
Список литературы	18