

УДК 621.315.592

©1995 г.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОГО РАССЕЯНИЯ НА ПЕРЕНОС НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В n -КАНАЛЕ КРЕМНИЕВОГО СУБМИКРОННОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА: МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

В.М.Борздов, О.Г.Жевняк, Ф.Ф.Комаров

Белорусский государственный университет,
220050, Минск, Беларусь

(Получена 26 июля 1993 г. Принята к печати 21 ноября 1993 г.)

Предложен алгоритм моделирования методом Монте-Карло электрон-электронного рассеяния в n -канале кремниевого субмикронного МОП полевого транзистора. Рассчитаны зависимости некоторых кинетических параметров, характеризующих перенос носителей заряда, от координаты вдоль канала с учетом электрон-электронного рассеяния и без него. Показано, что в области исследованных полей межэлектронное рассеяние оказывает на них заметное влияние.

Моделирование дрейфа носителей заряда в n -канале кремниевого МОП полевого транзистора методом Монте-Карло должно основываться на точном знании всех механизмов рассеяния электронов и соответствующих им вероятностей рассеяния в единицу времени (интенсивностей рассеяния), а также распределения потенциала по структуре. Если последнее в МОП транзисторе обычно определяется численным решением уравнения Пуассона с помощью известных алгоритмов [1,2] или же аналитическим расчетом по приближенным формулам [3], то вычисление интенсивностей рассеяния в канале требует учета таких тонких физических явлений, как квантование энергетического спектра носителей в инверсионном слое кремния и их взаимодействие друг с другом. Вместе с тем вплоть до недавнего времени этим вопросам не уделялось должного внимания.

Известно, что электронный газ в инверсном слое является квазидвумерным, при этом энергия электрона в направлении, перпендикулярном границе раздела окисел-полупроводник, квантуется, и, следовательно, характер электронных взаимодействий в канале будет отличным от таковых в объеме полупроводника [4,5]. В то же время, двигаясь от истока к стоку в достаточно сильных продольных полях, существующих в канале транзистора, квазидвумерные носители быстро разогреваются и могут перейти в трехмерное состояние [6].

В данной работе ставилась задача оценить влияние электрон-электронного рассеяния на перенос электронов в n -канале МОП транзистора с учетом квантования их энергетического спектра. Помимо межэлектронного учитывались следующие механизмы рассеяния: для двумерных носителей — на акустических фононах (переходы в пределах одной подзоны), на оптических фононах (межподзонные переходы), на зарядах окисла и на неоднородностях поверхности, а для трехмерных — на акустических внутривалидных фононах, на оптических внутривалидных фононах (случай зоны L), на g - и f -междолинных фононах (случай зоны X), а также на фононах, участвующих в переходах электронов из долин зоны X в долины зоны L и обратно, и в переходах между долинами зоны L ; кроме того, учитывались рассеяние на ионах примеси и ударная ионизация. Для квазидвумерных электронов принимались во внимание первые восемь подзон. За энергетический критерий перехода в трехмерное состояние по аналогии с [6] принималась величина разности $E_{th} = E_{fn} - E_i$, где E_{fn} — квазиуровень Ферми, а E_i — значение энергии, соответствующее середине запрещенной зоны у поверхности полупроводника ($E_{th} \sim 0.3$ эВ в типичном случае [7]). Уравнение Пуассона решалось самосогласованно с теми же граничными и начальными условиями, что и в работах [2,8]. Длина канала транзистора принималась равной 0.4 мкм.

Сложность учета межэлектронного рассеяния при моделировании электронного переноса в полупроводниках методом Монте-Карло связана с необходимостью точного знания функции распределения, а также с достаточно большим объемом общей вычислительной работы, которую при этом необходимо выполнить. В связи с этим при моделировании электронного переноса в n -канале МОП транзистора межэлектронным взаимодействием либо вообще пренебрегали [2], либо учитывали его только в случае трехмерных носителей [9].

Согласно [10-12], вероятность рассеяния электрона с волновым вектором \mathbf{k}_1 в объеме полупроводника на другом электроне будет равна

$$\frac{1}{\tau_{ee}^{3d}(\mathbf{k}_1)} = \frac{N_e m_{3d} e^4}{(4\pi)^3 \hbar^3 \epsilon_0^2 \epsilon^2 \beta^2} \int f(\mathbf{k}_2) \frac{g}{\beta^2 + g^2} d\mathbf{k}_2, \quad (1)$$

где N_e — концентрация электронов, e — заряд электрона, m_{3d} — его эффективная масса, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная вакуума, ϵ — диэлектрическая проницаемость кремния, β — величина, обратная длине экранирования Дебая, \mathbf{k}_2 — волновой вектор второго электрона, участвующего в межэлектронном рассеянии, $f(\mathbf{k}_2)$ — его функция распределения, $g = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|$. Видно, что для нахождения величины $1/\tau_{ee}^{3d}(\mathbf{k}_1)$ по формуле (1) требуется вычислить выражение вида $\int f(\mathbf{k}_2) g d\mathbf{k}_2 / (\beta^2 + g^2)$, которое можно рассматривать как среднее значение подынтегральной функции $g/(\beta^2 + g^2)$.

В [10,11] при вычислении этого интеграла вид функции $f(\mathbf{k}_2)$ предполагается априори известным. В [12] для статической оценки значения подынтегральной функции был предложен подход, не требующий предварительного знания $f(\mathbf{k}_2)$, согласно которому вся электронная среда замещалась конечным ансамблем из N носителей, последовательно проходящих длину полупроводникового образца. В этом случае для каждого временного шага выражения (1) может быть представлено в виде [12,13]

$$\frac{1}{\tau_{ee}^{3d}(\mathbf{k}_1)} = \frac{N_e m_{3d} e^4}{(4\pi)^3 \hbar^3 \epsilon_0^2 \epsilon^2 \beta^2 N} \sum_N \frac{g}{\beta^2 + g^2}. \quad (2)$$

Некоторое видоизменение такого подхода, когда одновременно прослеживались два взаимодействующих между собой носителя, позволило авторам работы [12] точно учесть законы сохранения импульса и энергии и, по их мнению, более адекватно, чем в [10] и [13], осуществить моделирование электрон-электронного рассеяния.

Для квазидвумерных носителей заряда в широком диапазоне температур, включая нормальную, общая интенсивность рассеяния первого электрона, находящегося в i -й подзоне и имеющего волновой вектор \mathbf{k}_1 , в некоторое конечное состояние с волновым вектором \mathbf{k}'_1 , соответствующее m -й подзоне, равна [14]

$$\frac{1}{[\tau_{ee}^{2d}(\mathbf{k}_1)]_{im}} = \frac{m_{2d}e^4}{4\pi\hbar^3\varepsilon_0^2\varepsilon^2A} \sum_n \sum_j \sum_{\mathbf{k}_2} f(\mathbf{k}_2) \int \frac{|F_{ijmn}(q)|^2}{(q_s + q)^2} d\vartheta, \quad (3)$$

где m_{2d} — эффективная масса двумерного электрона, A — нормировочная постоянная, $F_{ijmn}(q)$ — форм-фактор, зависящий от величины $q = |\mathbf{g}' - \mathbf{g}|/2$; $\mathbf{g} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$; $\mathbf{g}' = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2$, где \mathbf{k}_2 и \mathbf{k}'_2 — волновые векторы второго электрона до и после рассеяния, j и n — номера подзон, соответствующие этим состояниям, ϑ — угол между \mathbf{g}' и \mathbf{g} , q_s — величина, обратная длине экранирования в двумерном электронном газе [4].

Как следует из вида формулы (3), непосредственный расчет интенсивности рассеяния с включением ее значения в процедуру Монте-Карло достаточно трудоемок, поэтому в [14] с целью упрощения расчетов по формуле было предложено максимизировать подынтегральную функцию $|F_{ijmn}(q)|^2/(q_s + q)^2$. В этом случае для внутриподзонных электронных переходов $q = 0$, а форм-фактор $F_{ijij}(q)$ будет равен 1. Что касается интенсивности рассеяния, сопровождающегося межподзонами переходами, то важно отметить, что для ям как прямоугольной, так и более сложной формы при $q \rightarrow 0$ эта интенсивность становится пренебрежимо малой из-за резкого уменьшения соответствующих значений форм-фактора. С увеличением же q величина $F_{ijmn}(q)$ сначала возрастает, проходя через максимум $F_{ijmn}^{\max}(q)$, а затем убывает, оставаясь при этом меньше 1 [14,15].

В [16] было показано, что данный способ учета межэлектронного рассеяния корректен и достаточно точно описывает этот процесс. Однако он, как и все другие упомянутые выше алгоритмы, был использован при моделировании полупроводниковых структур с однородным электрическим полем. В этом случае интенсивности, рассчитанные по формулам (1) и (3), при введении процессов саморассеяния могут быть обычным образом включены в процедуру Монте-Карло, если известны правила определения волновых векторов взаимодействующих электронов после их рассеяния [11,14]. Однако в канале субмикронного МОП транзистора электрические поля являются сильно неоднородными и при построении адекватной модели переноса должны определяться самосогласованно. Это обстоятельство усложняет применение упомянутых выше алгоритмов моделирования электрон-электронного рассеяния и значительно увеличивает затраты машинного времени.

В настоящей работе предложен достаточно простой и экономичный алгоритм моделирования межэлектронного рассеяния, позволяющий учесть реальное распределение продольного и поперечного полей в канале МОП транзистора и все основные особенности взаимодействия между носителями, как в квазидвумерном, так и в трехмерном состояниях. Основная его суть заключается в следующем. Прежде всего

весь канал разбивается на определенное число ячеек, совпадающее с числом участков полевой аппроксимации. Начальные приближения для электрических полей рассчитываются аналитически [3]. В дальнейшем уточнение распределения поля осуществляется самосогласованно численным решением уравнения Пуассона по мере накопления статистических данных на каждом полевом участке при последовательном прохождении канала электронами, запускаемыми из истока.

Для расчета интенсивности электрон-электронного рассеяния в качестве второго электрона выбирался носитель, находящийся в той же ячейке t , что и первый, и имеющий энергию, равную средней энергии электронов в ячейке E_t , а также соответствующее этой энергии значение модуля волнового вектора k_t . Для двумерных ($2d$) электронов, кроме того, согласно заселенности подзон в данной ячейке, определялся номер подзоны, в которой находится второй электрон.

Для определения состояния после рассеяния как в квазидвумерном, так и в трехмерном случаях вводился эффективный угол σ_{eff} между волновыми векторами первого и второго носителей до их рассеяния, который рассчитывается согласно теореме о среднем для интеграла

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(\sigma) d\sigma = g(\sigma_{\text{eff}}), \quad (4)$$

где $g(\sigma) = (k_1^2 + k_t^2 - 2k_1 k_t \cos \sigma)^{1/2}$. Априорное определение значения $g(\sigma_{\text{eff}}) \equiv g_{\text{eff}}$ по формуле (4), в частности, позволило упростить процесс вычисления выражения (1). Вынося в нем дробь из-под знака интеграла и учитывая, что $\int f(k_2) dk_2 = 1$, для трехмерных ($3d$) электронов получим следующее выражение для интенсивности межэлектронного рассеяния в t -й ячейке:

$$\frac{1}{[\tau_{ee}^{3d}(k_1)]_t} = \frac{N_e^t m_3 d e^4}{(4\pi)^3 \hbar^3 \varepsilon_0^2 \beta_t^2} \frac{g_{\text{eff}}}{\beta_t^2 + g_{\text{eff}}^2}, \quad (5)$$

где N_e^t — концентрация носителей в t -й ячейке, β_t — величина, обратная длине экранирования Дебая для данной ячейки.

Максимизируя согласно [14] форм-факторы $F_{ijmn}(q)$ и принимая во внимание, что

$$(1/A) \sum_n \sum_j \sum_{k_2} f(k_2) = N_{\text{sub}} N_s,$$

где N_s — поверхностная концентрация электронов в инверсионном слое, а N_{sub} — число учитываемых при моделировании подзон, формулу (3) для $2d$ -носителей, находящихся в t -ячейке, можно переписать в виде

$$\frac{1}{[\tau_{ee}^{2d}(k_1)]_{\text{im}t}} = \frac{N_s m_2 d e^4 N_{\text{sub}} |F_{ijmn}^{\text{max}}(q)|^2}{2\hbar^3 \varepsilon_0^2 \varepsilon^2 q_s^2}. \quad (6)$$

Функции $F_{ijmn}(q)$ для квантовой ямы инверсионного слоя с использованием кусочно-линейной аппроксимации ее потенциала были рассчитаны для первых восьми подзон. В качестве примера на рис. 1 представлены результаты расчета некоторых из них. Из этого рисунка, в частности, следует, что во-первых, все функции $F_{ijmn}(q)$ имеют максимум, и, во-вторых, с увеличением $|i-m|$ их значение при $q = \text{const}$ уменьшаются. В связи с этим в настоящей работе с целью сокращения объема вычислений рассеянием с переходами $|i-m| > 1$ мы пренебрегли.

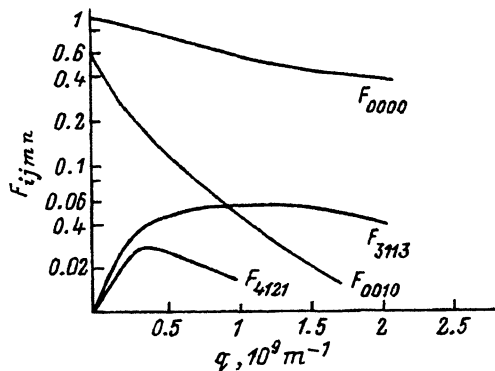


Рис. 1. Зависимости значений некоторых формфакторов F_{ijmn} от величины q .

В частном случае только внутриподзонного электрон-электронного рассеяния, когда суммирование по n отсутствует, а $F_{ijij}(q) = 1$, выражение (3) для t -й ячейки принимает еще более простую, чем (6) форму

$$\frac{1}{[\tau_{ee}^{2d}(\mathbf{k}_1)]_{iit}} = \frac{N_s m_{2d} e^4}{2 \hbar^3 \varepsilon_0^2 \varepsilon^2 q_s^2}. \quad (7)$$

Формулы (5)–(7) были использованы в дальнейшем для определения интенсивностей электрон-электронного рассеяния. При этом выбор данного механизма рассеяния в случае квазидвумерных носителей осуществлялся согласно алгоритму [14]. Кроме того, с помощью параметров σ_{eff} и g_{eff} достаточно просто обеспечить соблюдение законов сохранения энергии и импульса. Согласно [11], для этого необходимо потребовать выполнения условия

$$\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 + \frac{(\mathbf{g}'_{\text{eff}} - \mathbf{g}_{\text{eff}})}{2}, \quad (8)$$

где $\mathbf{g}'_{\text{eff}} = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_t$, $\mathbf{g}_{\text{eff}} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_t$.

Угол ϑ между \mathbf{g}_{eff} и \mathbf{g}'_{eff} для $2d$ -электронов может быть найден из вида функции $F_{ijmn}(q)$ [14], а для $3d$ -электронов — и с помощью известного выражения [10], имеющего в нашем случае следующий вид:

$$\vartheta = \arccos \left[\frac{1 - 2r}{1 + g_{\text{eff}}^2 (1 - r) / \beta_t^2} \right], \quad (9)$$

где r — случайное число, равномерно распределенное на интервале от 0 до 1.

Из (8), используя очевидные соотношения между векторами \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}'_1 , \mathbf{k}_t , \mathbf{k}'_t , \mathbf{g}_{eff} и \mathbf{g}'_{eff} , для модуля вектора \mathbf{k}'_1 можно получить

$$k'_1 = [g_{\text{eff}}^2 (1 - \cos \vartheta) / 2 + k_1^2 - 2k_1 g_{\text{eff}} \cos \gamma \cos \psi]. \quad (10)$$

где $\cos \gamma = ((1 - \cos \vartheta) / 2)^{1/2}$, γ — угол между \mathbf{g}'_{eff} и $\mathbf{g}_{\text{eff}} - \mathbf{g}'_{\text{eff}}$, ψ — угол между \mathbf{k}_1 и $\mathbf{g}_{\text{eff}} - \mathbf{g}'_{\text{eff}}$. Так как для $3d$ -электронов все векторы лежат в пространстве, ψ непрерывно изменяется от $\gamma - \varphi$ до $\gamma + \varphi$ (φ — угол между \mathbf{k}_1 и \mathbf{g}_{eff}). В то же время для $2d$ -электронов все векторы лежат

в плоскости, и поэтому угол ψ равен либо $\gamma - \varphi$, либо $\gamma + \varphi$. Выбирая случайным образом с равной вероятностью возможное значение ψ по формуле (10), можно рассчитать k'_1 , угол α между k_1 и k'_1 , а также проекции k'_1 на оси координат.

Выбор времени свободного пробега, механизмов рассеяния, определение новых значений координат и импульсов осуществлялись по известным алгоритмам [1,2]. Формулы для расчета остальных механизмов рассеяния как двумерных носителей, так и трехмерных приведены в [17].

С помощью описанного выше алгоритма были рассчитаны прежде всего зависимости средней энергии электронов E , средней дрейфовой скорости v_{dr} , средней подвижности μ и напряженности продольного поля E_l у поверхности раздела Si/SiO₂ от координаты x вдоль канала при разных значениях максимальной напряженности поля у стока как с учетом электрон-электронного рассеяния, так и без него. Количественное определение параметров переноса в каждой ячейке осуществлялось по следующей формуле:

$$b^t = \frac{\sum_i b_i^t \tau_i^t}{\sum_i \tau_i^t}, \quad (11)$$

где t — номер ячейки, в которой производится накопление данных, b^t — среднее значение определяемого параметра в данной ячейке, b_i^t — значение определяемого параметра на участке i -го свободного пробега в t -й ячейке, τ_i^t — соответствующее этому участку время свободного пробега. Суммирование проводится по числу всех свободных пробегов в данной ячейке.

На рис. 2 и 3 приведены полученные в результате моделирования данные. Кроме того, на этих рисунках представлены результаты, взятые из работы [2], которые были получены без учета межэлектронного рассеяния, квантования энергии носителей заряда в канале и переходов носителей в долины зоны L .

Видно, что степень влияния электрон-электронного рассеяния на различные параметры переноса различно. Из поведения кривых $E(x)$ на рис. 2, в частности, следует, что оно приводит к некоторому разогреву носителей заряда в канале. Однако данное увеличение энергии электронов незначительно и не сопровождается увеличением дрейфовой скорости.

Первый максимум на кривой $v_{dr}(x)$ связан с переходом носителей их двумерного состояния, где масса проводимости меньше, в трехмерное, где она больше [4]. Очевидно, что в результатах работы [2], в которой не учитывались как квантование, так и электрон-электронное рассеяние, этот максимум не нашел отражения. Второй максимум на данной зависимости связан с насыщением дрейфовой скорости и непараболичностью закона дисперсии. Влияние межэлектронного рассеяния на смещение данных максимумов вдоль оси x , как видно из поведения соответствующих кривых, почти отсутствует.

Оценить влияние электрон-электронного рассеяния на подвижность μ (рис. 3, штриховые линии) можно, используя определение данного параметра. Как известно, он является коэффициентом пропорциональности между дрейфовой скоростью и напряженностью продольного поля.

Рис. 2. Зависимости средней дрейфовой скорости v_{dr} (сплошные линии) и средней энергии электронов E (штриховые линии) от координаты x вдоль канала. Напряжение на стоке V_d , В: 1, 2 — 1, 3-5 — 3; 1, 3 — без учета межэлектронного рассеяния; 2, 4 — с учетом межэлектронного рассеяния; 5 — результаты работы [2]; $N_s = 10^{16} \text{ м}^{-2}$.

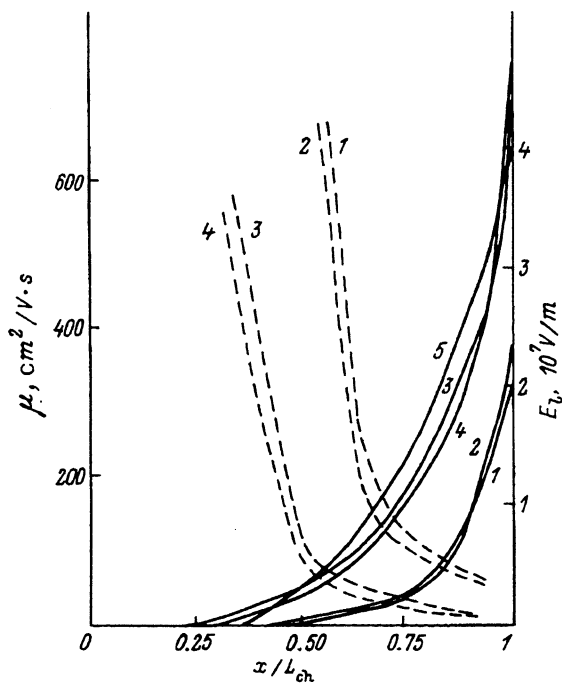
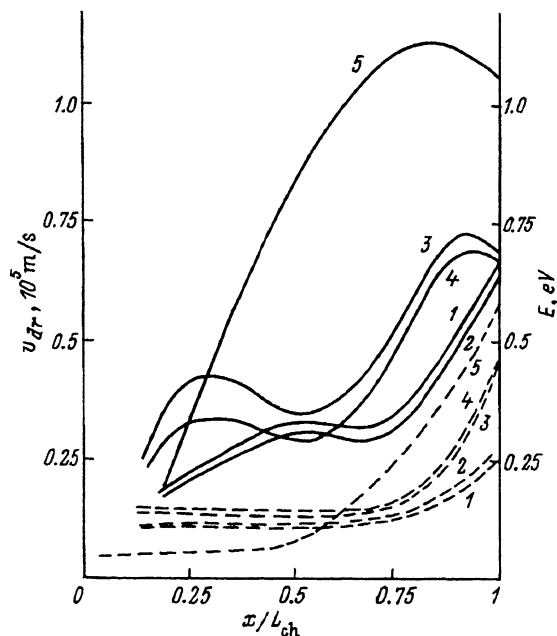


Рис. 3. Зависимости средней подвижности μ (штриховые линии) и напряженности продольного поля E_L (сплошные линии) от координаты x вдоль канала. Напряжение на стоке V_d , В: 1, 2 — 1, 3-5 — 3; 3 — без учета межэлектронного рассеяния; 2, 4 — с учетом межэлектронного рассеяния; 5 — результаты работы [2]; $N_s = 10^{16} \text{ м}^{-2}$.

Ввиду того, что распределение напряженности электрического поля по структуре, как показывают расчеты (рис. 3, сплошные линии), почти не зависит от межэлектронного рассеяния и определяется прежде всего профилем легирования, геометрией структуры и граничными условиями, то, очевидно, уменьшение подвижности при учете данного механизма рассеяния можно связать с уменьшением дрейфовой скорости носителей в канале.

Таким образом, полученные в рамках предложенной в данной работе модели переноса результаты позволяют сделать вывод о целесообразности включения электрон-электронного рассеяния, а также квантования энергии носителей в общую процедуру метода Монте-Карло при адекватном моделировании дрейфа электронов в n -канале кремниевого субмикронного МОП транзистора. Вместе с тем для более детального изучения влияния этого вида рассеяния на кинетические параметры носителей заряда, например, при различных режимах работы транзистора необходимо проведение дальнейших исследований.

Авторы выражают признательность М.М. Врубель за обсуждение результатов статьи.

Список литературы

- [1] Р. Хокни, Дж. Иствуд. *Численное моделирование методом частиц* (М., 1987).
- [2] О.И. Казьмин, Н.А. Баннов. *Микроэлектроника*, **18**, 112 (1989).
- [3] K.W. Terrol, C. Hu, P. Ko. *IEEE Trans. Electron Dev.*, **ED-5**, 440 (1984).
- [4] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., 1985).
- [5] Т.А. Полянская, Ю.В. Шмарцев. *ФТП*, **23**, 3 (1989).
- [6] А.М. Широков, В.М. Борздов, О.Г. Жевняк. *Докл. АН Беларуси*, **36**, 985 (1992).
- [7] Р. Маллер, Т. Кейминс. *Элементы интегральных схем* (М., 1989).
- [8] С.Г. Мулярчик. *Численное моделирование микроэлектронных структур* (Минск, 1989).
- [9] M. Fischetti, S. Laux. *Phys. Rev. B*, **38**, 9721 (1988).
- [10] A. Matulionis, J. Pozela, A. Reklaitis. *Sol. St. Commun.*, **16**, 1133 (1975).
- [11] N. Takenaka, M. Inoue, Y. Inuishi. *J. Phys. Soc. Japan*, **47**, 861 (1979).
- [12] A. Hasegama, K. Miyatsuji, K. Taniguchi, C. Hamaguchi. *Sol. Electron.*, **31**, 547 (1988).
- [13] P. Lugli, D.K. Ferry. *Physica B*, **117-118**, 251 (1983).
- [14] S.M. Goodnick, P. Lugli. *Phys. Rev. B*, **37**, 2578 (1988).
- [15] М.Ю. Мартисов, А.Я. Шик. *ФТП*, **21**, 1474 (1987).
- [16] K. Sadra, C.M. Maziar, V.G. Streeman. *IEEE Proc.*, **135**, 119 (1988).
- [17] В.М. Борздов, О.Г. Жевняк. *Весті АН Беларусі. Сер. фіз-тэхн. навук*, **61** (1991).

Редактор Т.А. Полянская

The influence of electron-electron scattering on the charge carrier transport in the n -channel of a silicon submicron MOS field-effect transistor: Monte Carlo method

V.M. Borzdov, O.G. Zhivnyak, F.F. Komarov

Minsk State University, 220050 Minsk, Belarus