

01;05;06

Расчет квантового выхода неравновесных носителей в диэлектрике при действии ионизирующего излучения

© А.И. Назаров, В.В. Сергеев

Петрозаводский государственный университет,
185640 Петрозаводск, Россия

(Поступило в Редакцию 27 мая 1996 г.)

Введение

Рассмотрение вопроса о квантовом выходе свободных носителей при облучении материалов электронной техники имеет как теоретическое, так и прикладное значение, связанное, в частности, с корректным моделированием электронных процессов, приводящих к образованию радиационно-индуцированного заряда в подзатворном диэлектрике полевых транзисторов. Решение данной задачи [1,2] требует учета процессов геминальной рекомбинации, определяющих конечное значение концентрации термализованных неравновесных носителей в диэлектрике.

Геминальная рекомбинация

После завершения размена энергии термализованный электрон и дырка находятся на некотором расстоянии r_0 друг от друга. В дальнейшем возможны два варианта. Один из них — это диссоциация пары и появление двух термализованных неравновесных носителей: свободного электрона и дырки. Второй — рекомбинация электрона и дырки между собой. Такую рекомбинацию принято называть геминальной или парной рекомбинацией [2].

Вероятность того или другого процесса будет зависеть от соотношения длины термализации r_0 и кулоновского радиуса захвата r_k . Определить кулоновский радиус захвата (радиус Онзагера) r_k можно, исходя из предположения о том, что на этом расстоянии кулоновская энергия взаимодействия электрона и дырки будет равна тепловой энергии kT . Тогда получим

$$r_k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 kT}, \quad (1)$$

где e — заряд электрона, ϵ — диэлектрическая постоянная, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость среды, k — постоянная Больцмана, T — температура.

Если $r_0 > r_k$, то пара электрон–дырка является свободной. Если $r_0 < r_k$, то с определенной вероятностью $f(r)$ возможна диссоциация пары, а с вероятностью $1-f(r)$ — ее геминальная рекомбинация. Вероятность диссоциации в присутствии электрического поля F , согласно [2], для слабых полей имеет вид

$$f(r) = \exp(r_k/r)(1 + \beta_0 E), \quad \beta_0 = \frac{qr_k}{2kT}, \quad (2)$$

для сильных полей

$$f(r) = \exp\left(\frac{r_k}{r} \frac{\exp(-2\beta_0 Fr/r_k) - 1}{2\beta_0 Fr/r_k}\right). \quad (3)$$

Зная функцию $f(r)$ и радиальную функцию пространственного распределения электронов $g(r)$ можно получить квантовый выход свободных носителей $Y(E)$. Очевидно, что $Y(F)$ находится путем интегрирования произведения $f(r)$ и $g(r)$

$$Y(F) = \int_0^{\infty} f(r) g(r) dr. \quad (4)$$

Для расчета $g(r)$ используются некоторые полуэмпирические аппроксимации. Наша задача состояла в нахождении $g(r)$, а в дальнейшем и $Y(F)$ из "первых" принципов с помощью метода Монте-Карло.

Приложение метода Монте-Карло к вычислению $g(r)$

Поскольку $g(r)$ — это плотность вероятности нахождения электрона около "исходной" дырки, то ее можно найти численно, определив расстояние, на которое электроны уйдут от этих дырок до полной своей термализации. Понятно, что нас интересуют электроны малых энергий, поскольку в противном случае они пройдут расстояние, значительно большее, чем r_k , и о геминальной рекомбинации речь вести не имеет смысла.

Для проведения расчетов по методу Монте-Карло требуется знать характеристики процессов рассеяния электронов в твердом теле. Основными из них для электронов малых энергий являются процессы рассеяния на фононах. При этом электроны взаимодействуют с полярными оптическими фононами (LO -фононы) и с неполярными акустическими фононами. Интенсивность электрон-фононного взаимодействия характеризуется скоростью рассеяния носителей. В первом случае скорость рассе-

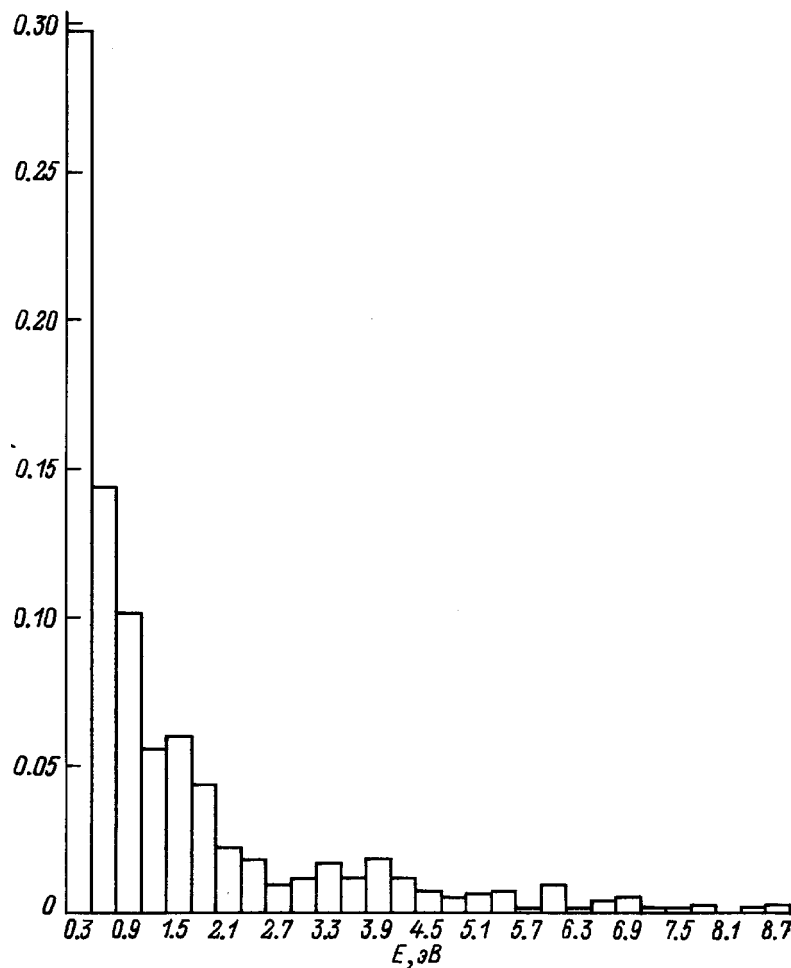


Рис. 1. Дискретное энергетическое распределение, использовавшееся для розыгрыша начальной энергии электрона. Получено из результатов моделирования методом Монте-Карло траекторий электронов, инжектированных в диэлектрик с начальной энергией 10 кэВ.

яния определяется по следующей формуле [3]

$$f_{LO}^{\pm} = \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right) \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{m^*}{2E}\right)^{1/2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \times \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon}\right) \hbar\omega_{LO} L n \frac{1 + \left(1 \mp \frac{\hbar\omega_{LO}}{E}\right)^{1/2}}{\pm 1 \mp \left(1 \mp \frac{\hbar\omega_{LO}}{E}\right)^{1/2}}, \quad (5)$$

где + — испускание, — — поглощение (аннигиляция) LO -фонона с энергией $\hbar\omega_{LO}$; m^* — эффективная масса; ϵ_0 , ϵ и ϵ_{∞} — абсолютная, статическая и оптическая диэлектрические проницаемости, n — функция распределения электронов по энергии

$$n = \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{kT}\right) - 1\right)^{-1}.$$

В случае рассеяния на акустических фононах скорость рассеяния зависит от энергии электронов на краю зоны

Бриллюэна ϵ_{BZ} . При $E \ll \epsilon_{BZ}$ скорость неполярного акустического рассеяния равна [4]

$$f^{\pm} \approx \frac{3m^{*3/2}C_1^2kT}{\sqrt{2}\pi\rho C_s^2\hbar^4} \sqrt{E}. \quad (6)$$

При $E > \epsilon_{BZ}$

$$f^{\pm} \approx \frac{8\pi^3\hbar^2N^2\xi}{m^*M\omega_{BZ}} \left(\frac{E}{\epsilon_{BZ}}\right)^{3/2} \left(n_{BZ} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right), \quad (7)$$

где C_1 — константа деформационного потенциала; ρ — плотность; C_s — скорость звука; N — концентрация атомов решетки; M — масса наиболее тяжелого атома в элементарной ячейке; n_{BZ} , ω_{BZ} — числа и частоты заполнения акустических фононов; $\xi = 3.5 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ для двуокиси кремния — материала, который часто используется в качестве подзатворного диэлектрика транзисторов.

В наших расчетах использовались следующие значения параметров: $m^* \approx m_0$, $T = 300 \text{ К}$, $\hbar\omega_{LO} = 0.15$ и $\hbar\omega_{LO} = 0.06 \text{ эВ}$ — различные моды LO -фононов,

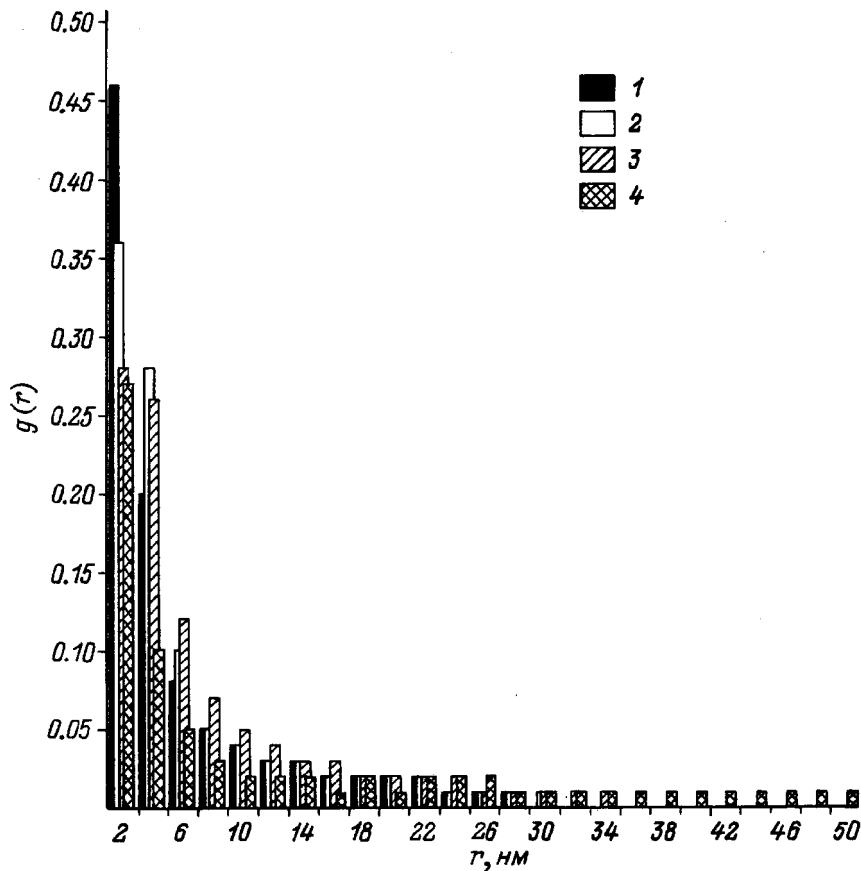


Рис. 2. Зависимость функции $g(r)$ от расстояния r при различных величинах напряженности электрического поля F . E , В/см: 1 — $1e + 5$, 2 — $5e + 5$, 3 — $1e + 6$, 4 — $5e + 6$.

$\epsilon = 3.8$, $\epsilon_\infty = 2.25$, $C_1 = 3.5$ эВ, $\rho = 2.65$ г/см³, $C_s = 4.03 \cdot 10^5$ см/с, $N = 7.95 \cdot 10^{22}$ см⁻³, $M = 45.8 \cdot 10^{-27}$ кг, $\omega_{BZ} = 4.8 \cdot 10^{13}$ с⁻¹, $\epsilon_{BZ} = 5.5$ эВ, $n_{BZ} = 0.816$.

На основании общей теории методом Монте-Карло схема моделирования состояла из следующих этапов.

1. Выбор начальных параметров носителя: координат x_0, y_0, z_0 , скорости $\nu = (2E/m^*)^{1/2}$ и энергии E . Для удобства все траектории моделировались из одного центра. Угол начального движения электрона предполагался равномерно распределенным в интервале от 0 до 2π . Начальная энергия разыгрывалась из распределения, полученного по результатам моделирования методом Монте-Карло траекторий электронов средних энергий в SiO₂ на основе данных о процессах рассеяния, приведенных в [5]. Фиксировалось количество электронов N , обладающих энергией ниже порога ионизации ≤ 8.9 эВ, по завершении последнего неупругого столкновения. Из этого количества электронов определялось n электронов, имеющих энергию в интервале $E + dE$. Тогда вероятность p вылета электрона из центра с энергией в интервале $E - E + dE$ равна отношению n/N . Таблица энергия-вероятность использовалась как дискретное распределение для розыгрыша начальной энергии электрона, образующегося из "исходного" атома (рис. 1).

2. Вычисление плотностей вероятности процессов электрон-фононного рассеяния и определение времени пролета Δt до очередного столкновения на основе формул (5)–(7).

3. Вычисление координат электрона [3]

$$\begin{aligned} x_n &= x_{n-1} + \nu_{n-1} \sin \vartheta_{n-1} \cos \varphi_{n-1} \Delta t, \\ y_n &= y_{n-1} + \nu_{n-1} \sin \vartheta_{n-1} \sin \varphi_{n-1} \Delta t, \\ z_n &= z_{n-1} + \nu_{n-1} \cos \vartheta_{n-1} \Delta t + \frac{qF}{2m^*} \Delta t^2, \end{aligned} \quad (8)$$

где ϑ — угол между направлением движения и осью z и φ — угол между осью y и проекцией направления движения на плоскость xy .

В дальнейшем угол ϑ должен быть скорректирован [3]

$$\begin{aligned} \vartheta_n^F &= \text{arccotg} \left(\text{ctg} \vartheta_{n-1} + \frac{qF}{2E_{n-1} \sin^2 \vartheta_{n-1}} \right. \\ &\quad \left. \times \sqrt{(x_n - x_{n-2})^2 + (y_n - y_{n-1})^2} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

4. Определение энергии после взаимодействия: учет изменения энергии из-за электрического поля

$$E_n^F = E_{n-1} + qF(z_n - z_{n-1}), \quad (10)$$

расчет энергии после взаимодействия

$$E_n = E_n^F \pm \hbar\omega. \quad (11)$$

5. Нахождение углов рассеяния.

Полярный угол рассеяния [3]

$$\cos \alpha_n = \frac{E_n^F + E_n}{2\sqrt{E_n^F E_n}} (1 - B^R) + B^R, \quad (12)$$

где R — случайное число, равномерно распределенное в интервале $(0,1)$ и

$$B = \frac{E_n^F + E_n + 2\sqrt{E_n^F E_n}}{E_n^F + E_n - 2\sqrt{E_n^F E_n}}. \quad (13)$$

Азимутальный угол β равномерно распределен в интервале $(0, 2\pi)$ и дается выражением

$$\beta = 2\pi R, \quad (14)$$

где R — случайное число.

Новые углы ϑ и φ вычислялись согласно формулам, приведенным в [3]

$$\cos \vartheta_n = \cos \alpha_n \cos \vartheta_n^F + \sin \alpha_n \cos \beta_n \sin \vartheta_n^F, \quad (15)$$

$$\varphi_n = \varphi_{n-1} + \arctg \frac{\sin \alpha_n \sin \beta_n}{\cos \alpha_n \sin \vartheta_n^F}. \quad (16)$$

Вышеописанная процедура повторялась с пункта 2 до тех пор, пока энергия электронов не становилась меньше 0.06 эВ. По результатам этих вычислений были найдены функции $g(r)$ (рис. 2) и определены квантовые выходы свободных носителей для различных полей (рис. 3).

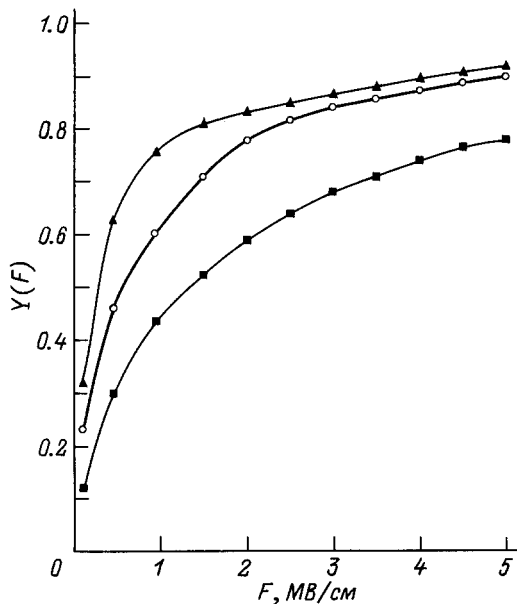


Рис. 3. Зависимость квантового выхода свободных носителей заряда от напряженности электрического поля, результаты наших расчетов и экспериментальные данные [6]. E , кэВ: \circ — 10 (наши расчеты); \blacksquare — 10 [6], рентгеновские лучи; \blacktriangle — Co-60 [6].

Список литературы

- [1] Гуртов В.А., Назаров А.И., Травков И.В. // ФТП. 1990. Т. 24. Вып. 6. С. 969–977.
- [2] Ванников А.В., Матвеев В.П., Сичкарь В.Л., Тюнев А.П. Радиационные эффекты в полимерах. Электрические свойства. М.: Наука, 1982. 270 с.
- [3] Fitting H.-J., Frieman J.-U. // Phys. Stat. Sol. 1982. P. 349–358.
- [4] Гадиак Г.В., Синуца С.П., Травков И.В. // Микроэлектроника. 1988. Т. 17. Вып. 5. С. 448–453.
- [5] Ashley J.C., Anderson V.E. // J. Electr. Spectr. and Related Phenomena. 1981. Vol. 24. P. 127–148.
- [6] Benedetto J.M., Boesch H.E. // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1986. Vol. NS-33. N 6. P. 1318–1323.
- [7] Травков И.В., Швейгерт В.А. // Автометрия. Новосибирск, 1988. С. 67–73.
- [8] Ozturk N., Williamson W. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. N 7. P. 1.
- [9] Есаев Д.Г., Синуца С.П. // Письма в ЖТФ. 1986. Т. 6. Вып. 7.