

Моделирование методом Монте-Карло низкотемпературной подвижности двумерных электронов в инверсионном слое кремния

© В.М. Борздов, Т.А. Петрович

Белорусский государственный университет,
220050 Минск, Белоруссия

(Получена 19 декабря 1995 г. Принята к печати 23 марта 1996 г.)

Методом Монте-Карло моделируется перенос двумерных ($2D$) электронов в инверсионном слое кремния в диапазоне температур $4.2 \div 40$ К, когда имеет место электрический квантовый предел и заселена только одна нижайшая подзона. При этом учитываются два механизма рассеяния — на удаленных ионизированных примесях и шероховатостях поверхности, а также их зависимость от поляризуемости $2D$ электронного газа. Рассчитаны подвижность и коэффициент теплых электронов в слабых электрических полях. Полученные данные сравниваются с результатами, известными в литературе.

Особенности переноса двумерных ($2D$) электронов в инверсионном слое кремния при температурах и концентрациях, при которых справедлив электрический квантовый предел, когда заселена лишь одна самая нижняя энергетическая подзона, изучались давно и интенсивно [1]. Ввиду широкого использования в интегральной электронике кремниевых n -канальных МОП полевых транзисторов, эти исследования имеют важное теоретическое и практическое значение. Известно [1], что основным механизмом рассеяния электронов инверсионного слоя при низких температурах в тех случаях, когда можно пренебречь электрон-электронным рассеянием [2], является рассеяние на ионизированных примесях и шероховатостях поверхности. При этом строгий расчет кинетических свойств $2D$ электронного газа требует учета экранирования рассеивающего потенциала [1,3–10]. Так, например, в работе [5] аналитическим расчетом было показано, что низкотемпературная зависимость экранирования приводит к линейному уменьшению проводимости $2D$ электронного газа при возрастании температуры.

В этой связи несомненный интерес представляет использование для расчета кинетических параметров, характеризующих перенос электронов в инверсионном слое при низких температурах, численного метода Монте-Карло, являющегося мощным средством исследования кинетических явлений в полупроводниках и полупроводниковых структурах [11]. Вместе с тем, насколько нам известно, в электрическом квантовом пределе в случае вырожденного электронного газа такого рода моделирование не проводилось, хотя для диапазона температур и электрических полей, когда помимо самой нижней оказываются заполненными и более высокие подзоны, было выполнено достаточно большое количество работ. Среди них можно отметить, например, работы [12–14], а также ряд недавних работ [15–17], в которых при моделировании разогрева $2D$ электронов учитывался их переход в трехмерное состояние.

В данной работе представлены результаты расчета одночастичным методом Монте-Карло зависимости подвижности $2D$ электронов в инверсионном слое кремния с ориентацией поверхности (100) от их концентрации N_s и температуры T . Была также оценена величина коэффициента теплых электронов β в слабых греющих полях в диапазоне изменения напряженности E от 10 до 100 В/м. При моделировании считалось, что все электроны проводимости находятся в самой нижней подзоне с энергией дна, равной E_0 [1,18].

Расчет подвижности μ проводился по формуле, предполагающей линейную связь между средней дрейфовой скоростью электронов \bar{V}_d и напряженностью продольного электрического поля в канале E [12,13]. В этом случае среднее значение подвижности $\bar{\mu}$ можно рассчитать по формуле

$$\bar{\mu} = \frac{\bar{V}_d}{E} = \frac{e \sum_i t_i (k'_{xi} - k_{xi})}{m^* \sum_i (k'_{xi} - k_{xi})}, \quad (1)$$

где e — заряд электрона, t_i — время его i -го свободного пробега, k_{xi} и k'_{xi} — проекции двумерного волнового вектора электронов на направление поля x , соответственно, в начале и в конце данного свободного пробега. Считалось также, что контур постоянной энергии, образованный проекциями двукратно вырожденных кремниевых долин на плоскость (100), представляет собой окружность, поэтому в качестве эффективной массы электрона при его двумерном движении в плоскости использовалась масса $m_t^* = m_t^* = 0.19 \cdot m_0$, где m_t^* — поперечная эффективная масса электрона в объемном кремнии, а m_0 — масса свободного электрона.

Алгоритм моделирования включал в себя все основные этапы, характерные для одночастичного метода Монте-Карло в объемных полупроводниках. Далее укажем лишь на следующие основные особенности использованного нами метода.

Во-первых, известно [11,19], что точность метода Монте-Карло в слабых электрических полях падает,

поскольку дрейфовая скорость электрона становится малой по сравнению с его тепловой скоростью. В силу этого, для того чтобы получить данные с приемлемой точностью, объем моделируемой выборки должен выбираться достаточно большим. Как показали оценки, хорошая сходимости и требуемая точность результатов в нашем случае достигались при объеме выборки не менее $5 \cdot 10^4$ столкновений. Во-вторых, так как в исследуемом диапазоне температур и концентраций электронный газ является вырожденным [1], при розыгрыше энергетических состояний электрона после его рассеяния необходимо учитывать принцип Паули, для чего в общий алгоритм моделирования была включена процедура, предложенная для вырожденных полупроводников в работе [20].

Интенсивность рассеяния на удаленных ионизированных примесях $W_i(k)$ рассчитывалась, согласно [1,3,7], по следующей формуле

$$W_i(k) = \frac{m^* N_i}{4\pi\hbar^3} \times \int_{\vartheta_{\min}}^{2\pi} \left[\frac{e^2}{(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ox})\varepsilon_0 \epsilon(q, T, N_s)} \right]^2 \left(1 + \frac{q}{b}\right)^{-6} \frac{d\vartheta}{q}, \quad (2)$$

где $q = 2k \sin(\vartheta/2)$, k — модуль волнового вектора $2D$ электрона, ϑ — угол рассеяния, ϑ_{\min} — его минимальное значение, N_i — концентрация ионизированных примесей на единицу объема, \hbar — редуцированная постоянная Планка, ε_{sc} и ε_{ox} — диэлектрические постоянные полупроводника и окисла соответственно, b — параметр вариационной волновой функции Фэнга и Ховарда [21], $\epsilon(q, T, N_s)$ — диэлектрическая функция. Параметр b равен [1] $b = (12m_z^* e^2 N^* / \varepsilon_{sc} \varepsilon_0 \hbar^2)^{1/3}$, где m_z^* — эффективная масса электрона в направлении, перпендикулярном поверхности, $N^* = N_{\text{DEPL}} + (11/32)N_s$. Здесь N_{DEPL} — поверхностная концентрация заряда в слое обеднения.

Зависимость диэлектрической функции от параметров q , T , N_s в линейном приближении на основании [1,5] можно представить в виде

$$\epsilon(q, T, N_s) = 1 + \frac{e^2}{q(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ox})\varepsilon_0} F(q, N_s) P(q, T, N_s). \quad (3)$$

где $F(q, N_s)$ — форм-фактор, равный [1]

$$F(q, N_s) = \frac{1}{16} \left(1 + \frac{\varepsilon_{ox}}{\varepsilon_{sc}}\right) \left(1 + \frac{q}{b}\right)^{-3} \left[8 + 9\frac{q}{b} + 3\left(\frac{q}{b}\right)^2\right] + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_{ox}}{\varepsilon_{sc}}\right) \left(1 + \frac{q}{b}\right)^{-6}, \quad (4)$$

а $P(q, T, N_s)$ — поляризуемость $2D$ газа, зависимость которой от температуры дана в [22]. Согласно этой работе, в электрическом квантовом пределе при достаточно низких температурах, когда химический

потенциал можно считать равным энергии Ферми [5,6,9,10], $P(q, T, N_s)$ запишется

$$P(q, T, N_s) = \int_0^\infty \frac{P(q, 0, E) E dE}{4k_B T \cos \hbar^2 \left[\frac{E_F - E}{2k_B T} \right]}. \quad (5)$$

где $P(q, 0, E)$ — поляризуемость при температуре $T = 0$, E — энергия электрона, k_B — постоянная Больцмана, E_F — энергия Ферми, равная $E_F = \pi \hbar^2 N_s / 2m^*$.

При расчете интенсивности рассеяния на ионизированной примеси по формуле (2) для устранения расходимости интеграла при $\vartheta \rightarrow 0$ в качестве нижнего предела интегрирования выбирался некоторый ненулевой угол ϑ_{\min} . Поскольку *a priori* теоретическое значение данного угла неизвестно, оно может быть оценено из условия согласования результатов расчета подвижности методом Монте-Карло с экспериментальными или расчетными данными, полученными другими методами. В качестве такого контрольного значения нами была взята ее максимальная величина, равная $2 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, определенная в работе [23] при $T = 4.2 \text{ К}$, $N_i = 3.5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, $L = 1.5 \text{ нм}$ и $\Delta = 0.52 \text{ нм}$ для тех же механизмов рассеяния, что и в настоящей работе, но без учета зависимости поляризуемости $2D$ электронного газа от температуры.

Для нахождения текущих значений ϑ , которые должны выбираться случайным образом согласно заданному угловому распределению $P(\vartheta)d\vartheta \sim \frac{(1+q/b)^{-6}}{q^3 \epsilon^2(q, T, N_s)} d\vartheta$, был использован метод отбора [11].

Интенсивность рассеяния на шероховатостях рассчитывалась, согласно [1,3,7], по формуле

$$W_{SR}(k) = \frac{m^* \Delta^2 L^2}{2\hbar^2} \int_0^{2\pi} \frac{\Gamma^2(q, N_s)}{\epsilon^2(q, T, N_s)} \exp\left(-\frac{q^2 L^2}{4}\right) d\vartheta, \quad (6)$$

где Δ — средняя высота шероховатостей, L — среднее расстояние между ними, а функция $\Gamma(q, N_s)$ при $q/b \gg 1$ равна [3]

$$\Gamma(N_s) = \frac{e^2}{\varepsilon_{sc} \varepsilon_0} \left(\frac{N_s}{2} + N_{\text{DEPL}} \right). \quad (7)$$

Розыгрыш угла рассеяния ϑ из углового распределения $P(\vartheta)d\vartheta \sim \frac{\exp(-q^2 L^2/4)}{\epsilon^2(q, T, N_s)} d\vartheta$, как и в случае примесного рассеяния, проводился методом отбора.

На рис. 1 представлены результаты расчета зависимости подвижности μ от поверхностной концентрации электронов в инверсионном слое N_s (кривая 1) при температуре $T = 4.2 \text{ К}$ и $E = 10 \text{ В/м}$. На этом же графике приведена кривая, взятая из работы [23] (кривая 2), и кривая, рассчитанная с использованием правила Маттиссена (кривая 3). Из рисунка следует, что кривые 1 и 2 в точке максимума совпадают, так как именно в этой точке они были согласованы путем

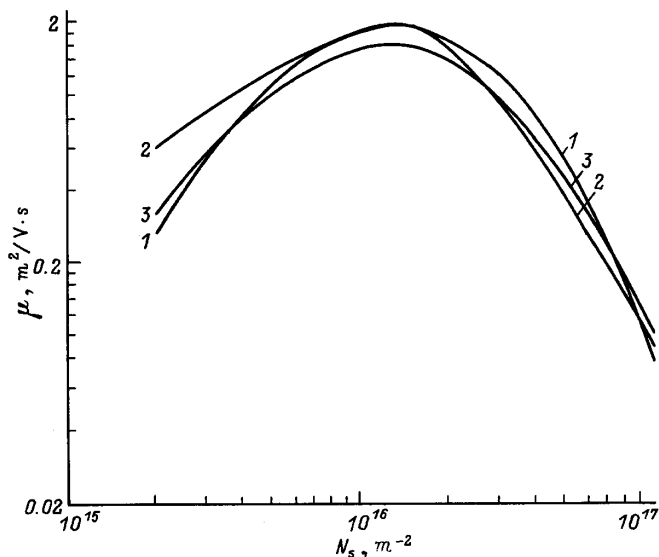


Рис. 1. Зависимость подвижности μ от поверхностной концентрации электронов инверсионного слоя N_s при температуре $T = 4.2$ К: 1 — метод Монте-Карло, $E = 10$ В/м; 2 — результаты работы [23]; 3 — правило Маттиссена. $L = 1.5$ нм, $\Delta = 0.52$ нм, $N_i = 3.5 \cdot 10^{23}$ м⁻³, $\epsilon_{sc} = 11.7$, $\epsilon_{ox} = 4.1$, $N_{DEPL} = 1.92 \cdot 10^{16}$ м⁻².

выбора соответствующего угла ϑ_{min} при одинаковых значениях температуры, а также параметров N_s , Δ , L и N_i . Кроме того, обе кривые достаточно хорошо совпадают во всем диапазоне изменения N_s , за исключением области $N_s < 4 \cdot 10^{15}$ м⁻². Можно отметить и то, что кривые 1 и 3 также хорошо коррелируют друг с другом. Это становится понятным, если учесть тот факт, что для температуры $T = 4.2$ К правило Маттиссена должно быть справедливым [4].

На рис. 2 в качестве примера представлены результаты расчета зависимости μ от температуры T при трех значениях N_s и напряженности поля E ,

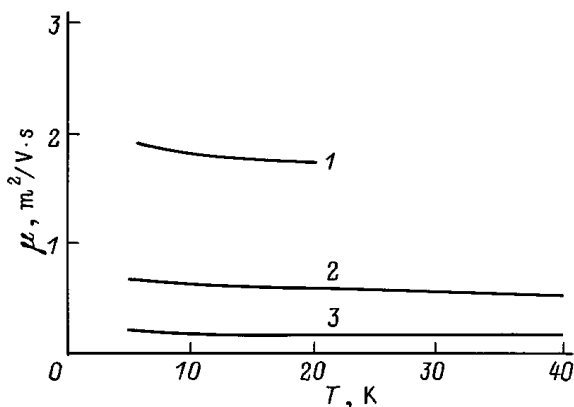


Рис. 2. Зависимость подвижности μ от температуры T при $E = 100$ В/м и различных значениях концентрации N_s : 1 — 10^{16} м⁻², 2 — $5 \cdot 10^{16}$ м⁻², 3 — 10^{17} м⁻². Значения параметров ϵ_{sc} , ϵ_{ox} , N_{DEPL} , L , Δ и N_i — те же, что и на рис. 1.

равной 100 В/м. Как видно из рисунка, с увеличением температуры подвижность слабо падает, что объясняется температурной зависимостью поляризуемости двумерного газа [4–6]. Такое поведение кривых качественно совпадает с результатами, полученными в работе [4] для того же температурного диапазона и тех же механизмов рассеяния с учетом температурной зависимости поляризуемости 2D газа, но в которой подвижность вычислялась путем надлежащего усреднения времени релаксации τ с помощью функции распределения Ферми–Дирака.

Наконец, на рис. 3 представлены результаты расчета зависимости подвижности μ от величины напряженности поля E при $T = 4.2$ К в условиях слабого разогрева электронного газа. На данном рисунке заметен небольшой рост величины μ при изменении напряженности от 10 до 100 В/м. Аппроксимация этой зависимости функцией вида $\mu = \mu_0(1 + \beta E^2)$, где μ_0 — значение подвижности в “нулевом” поле, дала следующие оценки для коэффициента β : $\beta_1 = 3.11 \cdot 10^{-7}$ м²/В² для $N_{s1} = 5 \cdot 10^{15}$ м⁻² и $\beta_2 = 2.38 \cdot 10^{-6}$ м²/В² для $N_{s2} = 10^{16}$ м⁻². Значение β_2 согласуется по порядку величины с результатами, приведенными в [24], согласно которым при $N_s < 10^{16}$ м⁻² и $T = 4.2$ К $\beta \approx 10^{-6}$ м²/В².

Таким образом, в данной работе была продемонстрирована возможность эффективного использования метода Монте-Карло для расчета низкотемпературной подвижности 2D электронного газа в инверсионном слое кремниевых МОП структур в условиях, когда электронный газ является вырожденным. При этом было учтено два основных механизма рассеяния — рассеяние на зарядах в окисле и шерохова-

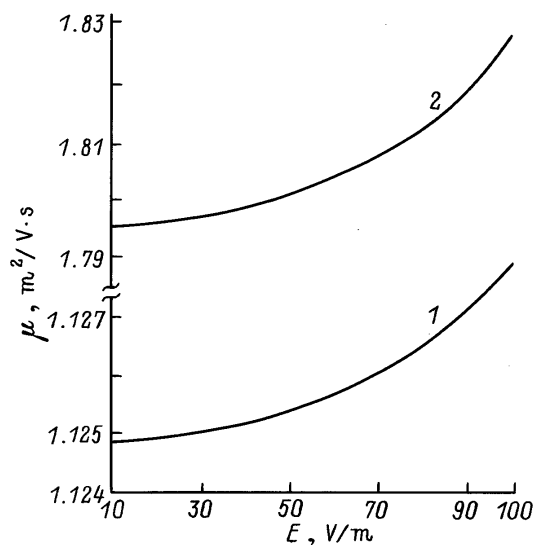


Рис. 3. Зависимость подвижности μ от напряженности электрического поля E при температуре $T = 4.2$ К и различных значениях концентрации N_s : 1 — $5 \cdot 10^{15}$ м⁻², 2 — 10^{16} м⁻². Значения параметров ϵ_{sc} , ϵ_{ox} , N_{DEPL} , L , Δ и N_i — те же, что и на рис. 1.

тостях поверхности. И хотя к настоящему времени накоплено большое количество как теоретических, так и экспериментальных результатов, описывающих перенос электронов в инверсионных слоях при низких температурах, рассмотренный в настоящей статье подход имеет то преимущество, что позволяет использовать в расчетах любое число значимых процессов рассеяния и независимо от сложности модельного описания достаточно просто включать их в общий алгоритм моделирования.

Abstract In the extreme quantum limit, in which only one subband is populated in the temperature range 4.2 K, the low-dimensional (2D) electron transport in a silicon inversion layer is simulated by Monte-Carlo technique. Scattering by remote ionized impurities and surface roughness have been considered and their dependence on the value of polarizability of 2D electron gas has been taken into account. The mobility and the warm electron coefficient for weak electric fields are calculated. Obtained results are compared with known literature data.

Список литературы

- [1] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., 1985).
- [2] С.Э. Есипов, И.Б. Левинсон. *ЖЭТФ*, **90**, 330 (1986).
- [3] Т. Андо. *J. Phys. Soc. Japan*, **43**, 1616 (1977).
- [4] F. Stern. *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 1469 (1980).
- [5] A. Gold, V.T. Dolgoplov. *J. Phys. C*, **18**, L463 (1985).
- [6] Е.А. Выродов, В.Т. Долгополов, С.Н. Дорожкин, Н.Б. Житенев. *ЖЭТФ*, **94**, 234 (1988).
- [7] V.K. Karavolas, M.J. Smith, T.M. Fromhold, P.N. Butcher, B.G. Mulimani, B.L. Gallagher, J.P. Oxley. *J. Phys. C*, **2**, 10 401 (1990).
- [8] Г.И. Зебрев. *ФТП*, **26**, 1550 (1992).
- [9] V.M. Borzdov, F.F. Komarov, T.A. Petrovich, M.M. Vrubel, O.G. Zhevnyak. *Phys. St. Sol. (b)*, **183**, K47 (1994).
- [10] V.M. Borzdov, F.F. Komarov, T.A. Petrovich. *Phys. St. Sol. (b)*, **188**, K5 (1995).
- [11] C. Jacoboni, L. Reggiani. *Rev. Phys.*, **55**, 645 (1983).
- [12] P.K. Basu. *Sol. St. Commun.*, **27**, 657 (1978).
- [13] Chu-Hao, J. Zimmerman, M. Charef, R. Fauquembergue, E. Constant. *Sol. St. Electron.*, **28**, 733 (1985).
- [14] M. Shirahata, K. Taniuchi, C. Hamauchi. *Japan. J. Appl. Phys.*, **26**, 1447 (1987).
- [15] S. Imanaga, Y. Hayafuji. *J. Appl. Phys.*, **70**, 1522 (1991).
- [16] M.V. Fischetti, S.E. Laux. *Phys. Rev. B*, **48**, 2244 (1993).
- [17] В.М. Борздов, О.Г. Жевняк, Ф.Ф. Комаров. *ФТП*, **29**, 193 (1995).
- [18] F. Stern, W.E. Howard. *Phys. Rev.*, **163**, 816 (1967).
- [19] C. Canali, C. Jacoboni, F. Nova, G. Ottaviani, A. Alberigi-Quaranta. *Phys. Rev. B*, **12**, 2265 (1975).
- [20] S. Bosi, C. Jacoboni. *J. Phys. C*, **9**, 315 (1976).
- [21] F.F. Fang, W.E. Howard. *Phys. Rev. Lett.*, **16**, 797 (1966).
- [22] P.F. Maldaque. *Surf. Sci.*, **73**, 296 (1978).
- [23] Y. Matsumoto, Y. Uemura. *Proc. 2nd Int. Conf. on Solid Surfaces* (1974) p. 367.
- [24] F.F. Fang, A.B. Fowler. *J. Appl. Phys.*, **41**, 1825 (1970).

Редактор В.В. Чалдышев

Monte-Karlo simulation of the low-temperature electron mobility in a silicon inversion layer

V.M. Borzdov, T.A. Petrovich

Belarus State University,
220050 Minsk, Belarus