

Разыгрывание полярного угла рассеяния электронов на ионах примеси при моделировании процессов переноса заряда в полупроводниках методом Монте-Карло

© В.М. Борздов, А.В. Борздов, Ю.Г. Василевский

Белорусский государственный университет,
220030 Минск, Беларусь

E-mail: borzdov@bsu.by

Поступила в Редакцию 9 декабря 2022 г.

В окончательной редакции 27 января 2023 г.

Принята к публикации 30 января 2023 г.

Рассмотрены процедуры разыгрывания полярного угла рассеяния электронов на ионах примеси в рамках моделей Брукса–Хэрринга, Конуэлл–Вайскопфа и Ридли, чаще всего используемых при моделировании процессов переноса носителей заряда в полупроводниках методом Монте-Карло. Для модели Ридли предложена более корректная процедура разыгрывания полярного угла рассеяния. На примере кремния проанализированы особенности плотностей распределения углов рассеяния, полученных в рамках рассмотренных моделей. Проведено сравнение рассчитанных многочастичным методом Монте-Карло зависимостей подвижности электронов в постоянном электрическом поле с напряженностью $F = 7 \cdot 10^4$ В/м в легированном кремнии при температуре 300 К с использованием этих моделей.

Ключевые слова: ионизованная примесь, рассеяние электронов, метод Монте-Карло.

DOI: 10.21883/FTP.2023.01.54925.4425

1. Введение

Одним из широко известных методов численного моделирования электрофизических свойств и электрических характеристик полупроводников и полупроводниковых приборов является метод Монте-Карло [1–4]. Важнейшими преимуществами данного метода являются возможности использования точных матричных элементов перехода носителя заряда при его взаимодействии с рассеивателем для всех основных механизмов рассеяния в полупроводнике и учета реальной зонной структуры последнего [4].

Особого внимания при моделировании кинетических явлений в полупроводниках заслуживает рассеяние на ионизованной примеси [5–9], особенно в условиях низких температур и при включении в процесс моделирования сильно легированных областей полупроводника. При этом, несмотря на имеющееся достаточно большое число хорошо известных моделей примесного рассеяния в объемных полупроводниках, в алгоритмах моделирования методом Монте-Карло чаще всего используются модели Брукса–Хэрринга (Brooks–Herring) и Конуэлл–Вайскопфа (Conwell–Weisskopf), и несколько реже — модель исключения третьего тела или модель Ридли (Ridley) [6].

Это связано прежде всего с тем, что при моделировании взаимодействия электрона с ионом примеси методом Монте-Карло важную роль играет вопрос определения состояния носителя заряда после акта рассеяния. Рассматривая взаимодействие электрона и иона примеси как абсолютно упругое, в процедуре Монте-Карло данный процесс необходимо характери-

зовать важнейшей случайной величиной — полярным углом рассеяния θ , который в каждой модели рассеяния имеет свое, отличное от других, распределение. При этом азимутальный угол φ обычно считается равномерно распределенной случайной величиной в интервале значений от 0 до 2π [1–4]. В этой связи следует упомянуть также работу [9], в которой для транспортных расчетов методом Монте-Карло была предложена модель изотропного рассеяния на заряженном примесном центре.

Формула, по которой можно разыгрывать угловое распределение для полярного угла рассеяния в модели Брукса–Хэрринга, может быть получена из общего выражения для интенсивности рассеяния носителей заряда (вероятности рассеяния в единицу времени) на заряженной примеси в первом борновском приближении для экранированного кулоновского потенциала с использованием метода обратных функций [2–4]. При этом сам акт взаимодействия предполагается чисто двухчастичным процессом. Формулу для нахождения угла θ для модели Конуэлл–Вайскопфа, как частный случай, можно также получить из общей формулы для вероятности рассеяния в единицу времени [2,3].

Для модели Ридли в работе [10] была предложена двухэтапная процедура нахождения угла θ , согласно которой сначала разыгрывается прицельный параметр b , а затем из выражения для полного сечения рассеяния — угол θ . В настоящей статье с учетом экранирования кулоновского поля и результатов работы [10] предлагается более корректная процедура (методика) разыгрывания углового распределения для полярного угла рассеяния θ в модели Ридли.

2. Разыгрывание угла рассеяния в моделях Брукса–Хэрринга и Конуэлл–Вайскопфа

Согласно классической задаче рассеяния электрона на кулоновском потенциале как чисто двухчастичного взаимодействия, полное поперечное сечение рассеяния $\sigma(k)$ имеет следующий вид [4,11]:

$$\sigma(k) = \pi b^2 = 2\pi \int_{\theta}^{\pi} \sigma_d(k, \theta) \sin \theta d\theta, \quad (1)$$

где $\sigma_d(k, \theta)$ — дифференциальное сечение рассеяния, k — модуль волнового вектора электрона.

Подход Брукса–Хэрринга, как известно, учитывает экранирование кулоновского потенциала двухчастичного взаимодействия путем его замены потенциалом Юкавы (Yukawa) $V(R)$:

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

где обратный радиус экранирования Дебая (Debye)

$$\beta_s = \left(\frac{e^2 n_0}{\epsilon\epsilon_0 k_B T} \right)^{1/2}. \quad (3)$$

В (2) и (3) R — расстояние до примесного центра, e — заряд электрона, Ze — заряд иона, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная, ϵ — относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, n_0 — концентрация свободных носителей заряда. Далее для определенности будем рассматривать донорный полупроводник и будем считать, что легирующая примесь полностью ионизована. В этом случае можно положить, что $n_0 = N_I$, где N_I — концентрация ионизованной примеси.

Тогда уравнение (1) для модели Брукса–Хэрринга запишется как

$$\sigma_{\text{BH}}(k) = \pi b_{\text{max}}^2 = 2\pi \int_{\theta_{\text{min}}}^{\pi} \sigma_{d\text{BH}}(k, \theta) \sin \theta d\theta, \quad (4)$$

где θ_{min} — минимальное значение угла рассеяния θ , соответствующее максимальному значению b_{max} прицельного параметра b .

Несложно показать, что плотность распределения полярного угла при рассеянии на примеси для непараболического закона дисперсии в первом борновском приближении в случае потенциала Юкавы и интеграла перекрытия, равного единице [12], можно представить в виде

$$f(\theta) = A \frac{\sin \theta}{\left(\frac{4(1 - \cos \theta)}{\hbar^2} m_d^* E (1 + \alpha E) + \beta_s^2 \right)^2}, \quad (5)$$

где A — нормировочная постоянная, E — энергия электрона, m_d^* — масса плотности состояний, \hbar — редуцированная постоянная Планка.

Тогда на основании метода обратных функций имеем следующее выражение для определения угла θ методом Монте-Карло:

$$r_1 = \frac{\int_{\cos \theta_{\text{min}}}^{\cos \theta} f(\theta) d\theta}{\int_{-1}^{\cos \theta_{\text{min}}} f(\theta) d\theta}, \quad (6)$$

где r_1 — равномерно распределенное на интервале $[0,1]$ случайное число. Решая (6), переходим к выражению для разыгрывания угла θ в явном виде [2,3]:

$$\cos \theta = 1 - \frac{2(1 - r_1)}{1 + 4r_1 \frac{E(1 + \alpha E)}{E_\beta}}, \quad (7)$$

где α — коэффициент непараболичности, $E_\beta = \hbar^2 \beta_s^2 / 2m_d^*$.

Для модели Конуэлл–Вайскопфа, в соответствии со сделанным выше во Введении замечанием, можно получить [2,3]:

$$\cos \theta = \frac{\left(\frac{E(1 + \alpha E)}{E_\beta(1 + 2\alpha E)} \right)^2 r_1 - 1}{\left(\frac{E(1 + \alpha E)}{E_\beta(1 + 2\alpha E)} \right)^2 r_1 + 1}. \quad (8)$$

Формулы (7) и (8) использовались многими авторами для разыгрывания угла θ в процедуре Монте-Карло для моделей Брукса–Хэрринга и Конуэлл–Вайскопфа.

3. Разыгрывание угла рассеяния и прицельного параметра в модели Ридли

Так как модель Брукса–Хэрринга получена в предположении того, что при рассеянии имеет место двухчастичное взаимодействие на ближайшем примесном центре, то она не учитывает возможное участие в акте рассеяния электрона какого-либо другого, более удаленного, третьего центра примесного рассеяния. Для устранения этого недостатка Ридли [6] ввел весовой коэффициент, который можно рассматривать как вероятность того, что данный акт рассеяния является чисто двухчастичным процессом рассеяния на ближайшем центре рассеяния.

Согласно Ридли, вероятность отсутствия рассеивающих центров с параметром, меньшим b , равна

$$P(b) = \exp(-\pi a N_I b^2), \quad (9)$$

где a — среднее расстояние между ионами.

Тогда, если дифференциальное сечение $\sigma_{d\text{BH}}$, рассчитанное по модели Брукса–Хэрринга, умножить на вероятность (9), то получается простая формула для определения соответствующего дифференциального сечения в модели Ридли [6]:

$$\sigma_{d\text{R}}(k, \theta, b) = P(b) \sigma_{d\text{BH}}(k, \theta). \quad (10)$$

Для расчета параметров θ и b в работе [10] была описана процедура, позволяющая путем генерации одного случайного числа методом Монте-Карло определять эти параметры в модели Ридли. Эта процедура состоит в том, что сначала разыгрывается прицельный параметр b , а затем, путем „инверсии“ уравнения (4) (т.е. его решения), — параметр θ . Для определения параметра b в [10] был использован метод обратных функций:

$$r_2 = \frac{\exp(-\pi a N_I b^2) - \exp(-\pi a N_I b_{\max}^2)}{1 - \exp(-\pi a N_I b_{\max}^2)}, \quad (11)$$

где r_2 , так же как и r_1 , — случайное число с равномерным распределением на интервале $[0, 1]$.

Таким образом, в [10] предполагалось, что параметр b является изначально единственной случайной величиной с нормированной плотностью распределения, равной

$$f(b) = 2\pi b a N_I \exp(-\pi a N_I b^2), \quad (12)$$

а параметр θ является случайной функцией параметра b , явный вид которой определяется решением уравнения (1). В [12] приведено решение этого уравнения относительно $\cos \theta$:

$$\cos \theta = 1 - \frac{1}{2k^2} \left[\left(\frac{2k^2 \pi b^2}{K^2} + \frac{1}{4k^2 + \beta_s^2} \right)^{-1} - \beta_s^2 \right], \quad (13)$$

где

$$K^2 = \frac{Z^2 e^4 (1 + 2\alpha E) m_d^* k}{4\pi h^2 \varepsilon^2 \varepsilon_0^2 v(k)}, \quad (14)$$

где $v(k)$ — групповая скорость электронов.

Можно заметить, что плотность распределения (12) — это плотность распределения Рэля с постоянной плотностью примесных центров в плоскости $\lambda = a N_I$.

Известно, что с помощью этой плотности может быть описано распределение расстояния l от любой точки плоскости до ближайшей к ней соседней точки для пуассоновского поля точек на плоскости с постоянной плотностью λ [13]. Из этого следует, что случайный характер поведения параметра b с плотностью вида (12) определяется только геометрическим расположением примесей в плоскости и не учитывает особенностей случайного характера параметра θ , имеющего при двухчастичном квантово-механическом взаимодействии в модели Брукса–Хэрринга плотность распределения (5). При этом вид плотности (5) непосредственно определяется видом матричного элемента, который рассчитывается в первом борновском приближении для процесса рассеяния электрона на заряженном примесном центре.

С учетом вышесказанного в рамках модели Ридли для более корректного и точного разыгрывания методом Монте-Карло параметров θ и b предлагается рассматривать процесс рассеяния электрона на примесном атоме как двухчастичное взаимодействие, при котором электрон рассеивается на некоторый угол θ , являющийся случайной величиной с плотностью распределения (5)

с учетом вероятности $P(b)$ того, что при этом третий ближайший рассеивающий центр отсутствует. Вероятность такого процесса будет зависеть от двух случайных величин θ и b , каждая из которых характеризуется своей плотностью вероятности. Считая, что случайные параметры θ и b статистически независимы, и используя метод обратных функций, на основании (5) и (12) для двух совместных случайных событий будем иметь:

$$r_1 r_2 = \frac{\int_{\cos \theta}^1 \frac{d \cos \theta'}{\left(\frac{4(1 - \cos \theta')}{h^2} m_d^* E(1 + \alpha E) + \beta_s^2 \right)^2}}{\int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta'}{\left(\frac{4(1 - \cos \theta')}{h^2} m_d^* E(1 + \alpha E) + \beta_s^2 \right)^2}} \times \frac{\exp(-\pi a N_I b^2) - \exp(-\pi a N_I b_{\max \text{BH}}^2)}{1 - \exp(-\pi a N_I b_{\max \text{BH}}^2)}. \quad (15)$$

Таким образом, с помощью формулы (15) удастся вероятностным образом связать два случайных параметра θ и b . Заметим при этом, что детерминированным (неслучайным) образом аналитически эти два параметра остаются связанными с помощью формулы (13). В этом случае дифференциальное сечение Ридли $\sigma_{dR}(k, \theta, b)$ является функцией двух независимых случайных параметров θ и b . Действительно, используя классическую связь между прицельным параметром b и дифференциальным сечением $\sigma_{d\text{BH}}(\theta)$ в виде (см., например, [14])

$$\sigma_{d\text{BH}}(\theta) d\Omega = 2\pi b db, \quad (16)$$

где $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ — элемент телесного угла, в который рассеивается электрон, формулу (10) для дифференциального сечения Ридли можно переписать в следующем виде:

$$\sigma_{dR}(k, \theta, b) = \frac{P(b) b db}{\sin \theta d\theta}, \quad (17)$$

что подтверждает справедливость сказанного выше.

Таким образом, рассматривая формулы (13) и (15) как систему двух уравнений с двумя неизвестными θ и b , можно вычислить распределения $f(\theta)$ и $f(b)$ путем симуляции произведения двух псевдослучайных чисел r_1 и r_2 . При этом уравнение (15) решается численно.

4. Результаты моделирования и обсуждение

На рис. 1 в качестве примера представлены результаты расчета плотности угловых распределений $f(\theta)$ в кремнии с концентрацией донорной примеси $N_I = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ для энергии электрона $E = 10^{-2} \text{ эВ}$ для моделей Брукса–Хэрринга и Ридли с процедурой разыгрывания угла θ , описанной в [10] и предложенной в данной работе. Из данного рисунка видно, что все три кривые плотности заметно различаются между собой

своей формой и значением угла θ , соответствующего максимуму функций $f(\theta)$.

На рис. 2 приведены аналогичные зависимости для энергии электронов $E = 10^{-1}$ эВ. Из рисунка следует, что данные распределения претерпели значительные видоизменения по сравнению с распределениями, показанными на рис. 1. При этом, в частности, видно, что максимальное значение $f_{\max}(\theta)$ для этой энергии соответствует модели Ридли с предложенной нами процедурой.

С целью проверки адекватности моделей Конуэлл-Вайскопфа, Брукса-Хэрринга и Ридли (с учетом разыгрывания угла θ согласно работе [10] и по предложен-

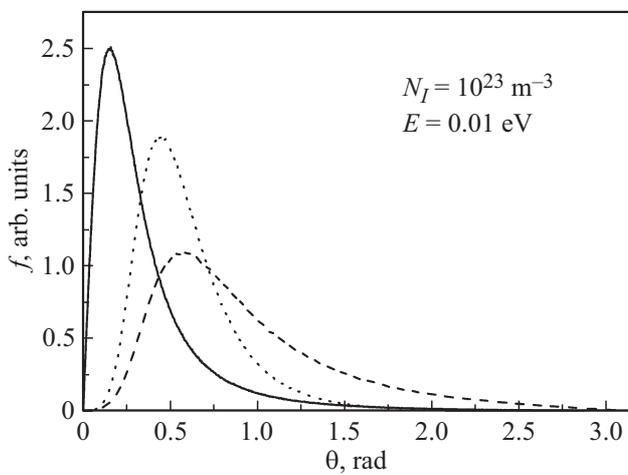


Рис. 1. Плотности распределения полярного угла рассеяния θ для концентрации ионизованной примеси $N_I = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ и энергии электронов $E = 0.01$ эВ. Сплошная кривая — модель Брукса-Хэрринга, штриховая — модель Ридли [10], пунктирная — модель Ридли с предложенной нами процедурой.

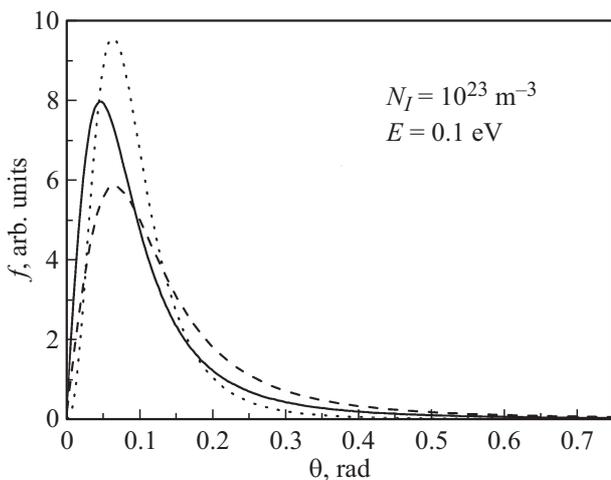


Рис. 2. Плотности распределения полярного угла рассеяния θ для концентрации ионизованной примеси $N_I = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ и энергии электронов $E = 0.1$ эВ. Сплошная кривая — модель Брукса-Хэрринга, штриховая — модель Ридли [10], пунктирная — модель Ридли с предложенной нами процедурой.

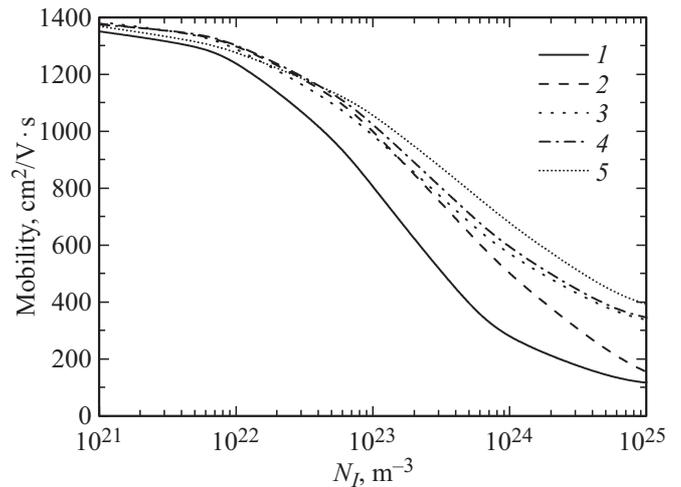


Рис. 3. Зависимости подвижности электронов от концентрации ионизованной донорной примеси в кремнии для различных моделей рассеяния на ионизированной примеси при температуре 300 К. Кривая 1 — интерполяция экспериментальных данных [15], 2 — модель Конуэлл-Вайскопфа, 3 — модель Брукса-Хэрринга, 4 — модель Ридли [10], 5 — модель Ридли с предложенной нами процедурой.

ной нами методике) многочастичным методом Монте-Карло [1] была рассчитана подвижность μ электронов в кремнии, легированном однозарядной донорной примесью, в постоянном электрическом поле с напряженностью $F = 7 \cdot 10^4$ В/м при 300 К с учетом всех основных механизмов рассеяния электронов: фононного акустического внутривалидного и междолинного (учитывались все g - и f -фононы), а также плазмонного и примесного. При этом была использована непараболическая модель зонной структуры с коэффициентом непараболичности $\alpha = 0.5 \text{ эВ}^{-1}$. Подвижность определялась согласно формуле $\mu = v_{dr}/F$, где v_{dr} — дрейфовая скорость, среднее значение которой рассчитывалось многочастичным методом Монте-Карло.

На рис. 3 показаны результаты расчета подвижности электронов методом Монте-Карло для трех моделей примесного рассеяния (Конуэлл-Вайскопфа, Брукса-Хэрринга и Ридли) в интервале концентраций ионизированной примеси $N_I = 10^{21} - 10^{24} \text{ м}^{-3}$. На этом же рисунке показаны соответствующие условиям моделирования экспериментальные данные, полученные в работе [15].

Анализ поведения кривых, представленных на этом рисунке, позволяет сделать следующие выводы. Во-первых, можно видеть, что для концентрации примесей $N_I < 10^{22} \text{ м}^{-3}$ наилучшее совпадение результатов моделирования и эксперимента дает модель Ридли, в которой полярный угол θ разыгрывался по предложенной в настоящей статье методике. Во-вторых, для уровней легирования полупроводника $N_I > 3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ наиболее хорошее совпадение с экспериментом обеспечивает модель Конуэлл-Вайскопфа, которая, как известно, достаточно грубо описывает процесс двухчастичного

взаимодействия и примесного центра без учета эффекта экранирования. В-третьих, можно заметить, что кривые, соответствующие модели Брукса–Хэрринга и модели Ридли, для которой полярный угол θ разыгрывается согласно [10] во всем диапазоне изменения концентрации N_I , различаются незначительно. Кроме того, расхождение с экспериментом для всех рассматриваемых моделей увеличивается с ростом концентрации примесных ионов вплоть до значения $N_I = 10^{24} \text{ м}^{-3}$.

Для проведения дальнейшего анализа результатов расчета и эксперимента по подвижности μ на рис. 4 приведены результаты расчета угловых распределений, сделанных нами для моделей Брукса–Хэрринга и Ридли для энергии электронов $E = 4 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$. Эта энергия в численном эксперименте близка к энергии электрона в слабом поле, в котором экспериментально определялась величина низкополевой подвижности электронов при температуре 300 К [15].

В то же время, поскольку представленные на рис. 3 результаты расчета дрейфовой скорости методом Монте-Карло помимо угловых распределений в значительной степени зависят и от интенсивности рассеяния для данного механизма, то для правильного объяснения поведения кривых, изображенных на рис. 3, необходимо обратиться также к зависимостям интенсивности рассеяния на примеси от энергии, изображенным на рис. 5. Интенсивности рассчитаны для кремния, легированного однозарядной донорной примесью согласно формулам, взятым из [1–3,10].

Сопоставление результатов, представленных на рис. 3, 4 и 5, позволяет объяснить достаточно близкое расположение кривых $\mu(N_I)$, соответствующих моделям Брукса–Хэрринга и Ридли [10] формальным совпадением значений подвижности, получающихся за счет больших углов рассеяния θ (см. рис. 4), но при этом одновременно меньшей интенсивности рассеяния для энергии электронов $E = 4 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$ в модели Ридли [10] по сравнению с моделью Брукса–Хэрринга. Несколько более высокую подвижность, которую дали расчеты по нашей методике для концентраций $N_I > 5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, можно объяснить меньшими углами рассеяния, выпадающими при их разыгрывании согласно этой методике. Вышесказанное подтверждается средними значениями углов θ , рассчитанных согласно формуле для среднего значения угла:

$$\bar{\theta} = \int_0^{\pi} \theta f(\theta) d\theta, \quad (18)$$

которые приведены в таблице.

Относительно процедуры [10] следует заметить, что она по сравнению с моделью Брукса–Хэрринга и нашей характеризуется большей вероятностью рассеяния на более тупые углы для всех трех значений концентрации примеси (см. таблицу). Это можно объяснить тем, что, как было уже отмечено выше, форма распределения $f(\theta)$ для этой процедуры зависит прежде

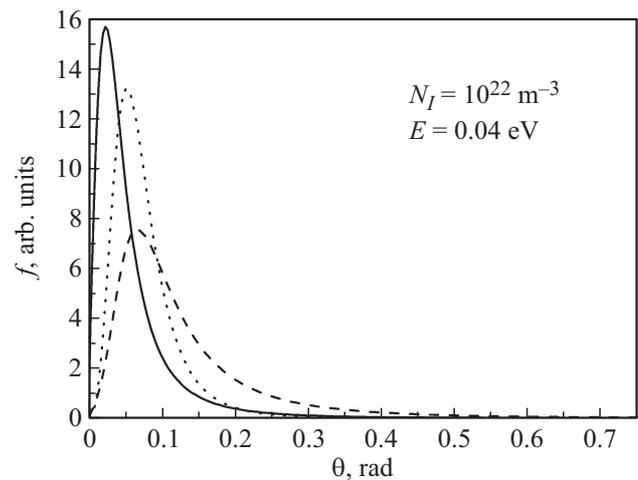


Рис. 4. Плотности распределения полярного угла рассеяния для концентрации ионизованной донорной примеси $N_I = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ и энергии электронов $E = 0.04 \text{ эВ}$. Сплошная кривая — модель Брукса–Хэрринга, штриховая — модель Ридли [10], пунктирная — модель Ридли с предложенной нами процедурой.

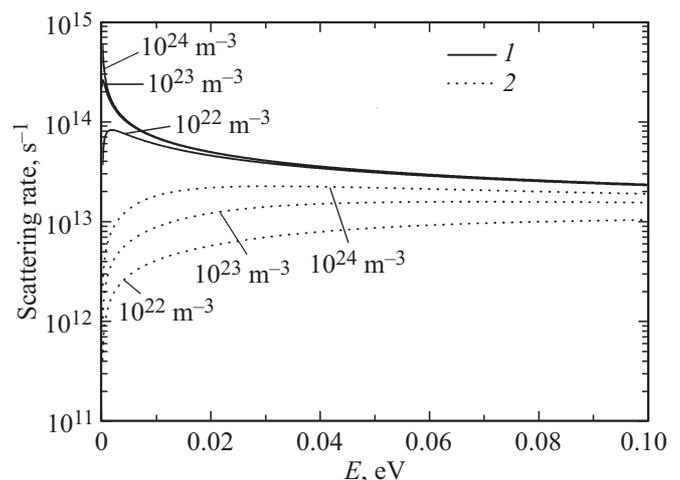


Рис. 5. Интенсивности рассеяния электронов на ионизованной донорной примеси в кремнии при температуре 300 К. Кривые 1 — модель Брукса–Хэрринга, 2 — модель исключения третьего тела Ридли. Интенсивности рассеяния приведены для трех значений концентрации ионизованной примеси ($N_I = 10^{22}, 10^{23}$ и 10^{24} м^{-3}).

всего от характера распределения $f(b)$, которое описывает случайный характер расположения примесей в плоскости сечения решетки и не учитывает квантово-механического остроугового характера взаимодействия носителя заряда с отдельным примесным центром. На важность этого последнего факта было, в частности, указано в работе [9], в которой были аргументированно высказаны критические замечания к описанию процесса двухчастичного взаимодействия с помощью „статического экранирования“ ионами примеси в мо-

Расчитанные средние значения полярного угла рассеяния θ при различных концентрациях ионизованной примеси для трех моделей рассеяния

Концентрация примеси, м^{-3}	Среднее значение угла θ		
	Модель Брукса–Хэрринга, π	Модель [10], π	Предложенная нами модель, π
10^{22}	0.0199	0.0460	0.0242
10^{23}	0.0610	0.0967	0.0572
10^{24}	0.1680	0.2080	0.1460

дели Ридли. В этой связи необходимо отметить, что возрастание популярности последней связано в первую очередь именно с публикацией работы [10], в которой на примере GaAs было получено достаточно хорошее совпадение с результатами эксперимента по подвижности и, конечно, с учетом того, что эта модель дает намного меньшие значения интенсивности рассеяния, чем модель Брукса–Хэрринга при низких значениях энергии (см. рис. 5), что является очень важным при моделировании процессов переноса методом Монте-Карло. Вместе с тем расчеты для кремния с использованием модели Ридли с учетом разработанной нами более корректной процедуры разыгрывания полярного угла рассеяния θ для значений $N_I > 5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ показали худшее совпадение результатов расчета с экспериментом, чем для модели Брукса–Хэрринга.

Таким образом, в данной работе были рассмотрены и проанализированы процедуры разыгрывания полярного угла рассеяния электронов на ионах примеси в рамках наиболее часто используемых в методе Монте-Карло моделей Брукса–Хэрринга, Конуэлл–Вайскопфа и Ридли. Для модели Ридли предложена и апробирована оригинальная методика разыгрывания этого угла. С учетом того что она, в отличие от описанной в работе [10], учитывает как особенности квантово-механического двухчастичного взаимодействия электрона с ионом примеси, так и вероятность отсутствия при этом взаимодействии другого ближайшего иона, является более корректной по сравнению с описанной в работе [10].

5. Заключение

Проведен сравнительный анализ результатов расчета и эксперимента по определению низкополевой подвижности электронов в кремнии при температуре $T = 300 \text{ К}$ для трех рассмотренных моделей: Брукса–Хэрринга, Конуэлл–Вайскопфа и Ридли. Результаты расчетов показали, что наилучшее совпадение с экспериментальными данными для концентрации примесных ионов $N_I < 10^{22} \text{ м}^{-3}$ дала модель Ридли с разработанной нами процедурой разыгрывания угла θ , а для концентраций $N_I > 3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ — модель Конуэлл–Вайскопфа. Модель Брукса–Хэрринга и модель Ридли с процедурой, описанной в [10], дали близкие друг другу резуль-

таты во всем диапазоне исследованных концентраций $10^{21} \text{ м}^{-3} \leq N_I \leq 10^{25} \text{ м}^{-3}$.

Расчеты, проведенные с помощью разработанной нами процедуры для модели Ридли при концентрации примеси $N_I \geq 5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, продемонстрировали менее хорошее совпадение с экспериментом, чем для этой же модели с процедурой, описанной в работе [10]. Это свидетельствует о том, что использование модели Ридли с целью точных расчетов подвижности электронов методом Монте-Карло в полупроводниках, в частности в кремнии, при уровне его легирования $N_I \geq 10^{23} \text{ м}^{-3}$ требует осторожности и дальнейшего критического анализа.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.М. Борздов, О.Г. Жевняк, Ф.Ф. Комаров, В.О. Галенчик. *Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники* (Минск, БГУ, 2007).
- [2] C. Jacoboni, P. Lugli. *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* (Wien–N.Y., Springer Verlag, 1989).
- [3] C. Jacoboni, L. Reggiani. *Rev. Mod. Phys.*, **55** (3), 645 (1983).
- [4] В.М. Иващенко, В.В. Митин. *Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло* (Киев, Наук. думка, 1990).
- [5] D. Chattopadhyay, H.J. Queisser. *Rev. Mod. Phys.*, **53** (4), 745 (1981).
- [6] В.К. Ридли. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **10**, 1589 (1977).
- [7] N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, V.I. Yatskevich, A.A. Kocherzhenko. *J. Appl. Phys.*, **93** (12), 9749 (2003).
- [8] D. Pozdnyakov. *J. Comput. Electron.*, **13**, 338 (2014).
- [9] H. Kosina. *Phys. Status Solidi A*, **163**, 475 (1997).
- [10] T.G. Van de Roer, F.R. Widdershoven. *J. Appl. Phys.*, **59** (3), 813 (1986).
- [11] Б. Ридли. *Квантовые процессы в полупроводниках* (М., Мир, 1986) [Пер. с англ.: В.К. Ридли. *Quantum processes in semiconductors* (Oxford, Clarendon Press, 1982)].
- [12] *Monte Carlo device simulation: full band and beyond*, ed. by K. Hess (Boston–Dordrecht–London, Kluwer Academic Publishers, 1991) chap. 2, p. 27.
- [13] Е.С. Вентцель, Л.А. Овчаров. *Прикладные задачи теории вероятностей* (М., Радио и связь, 1983).

- [14] К. Зеегер. *Физика полупроводников* (М., Мир, 1977)
[Пер. с англ.: К. Seeger. *Semiconductor physics* (Wien–N.Y.,
Springer Verlag, 1973)].
- [15] G. Baccarani, P. Ostoja. *Solid-State Electron.*, **18**, 579 (1975).

Редактор Г.А. Оганесян

Definition of electron polar scattering angle on ionized impurities for Monte Carlo simulation of charge carrier transport in semiconductors

V.M. Borzdov, A.V. Borzdov, Y.G. Vasileuski

Belarusian State University,
220030 Minsk, Belarus

Abstract Procedures of polar scattering angle simulation for electron scattering on ionized impurities are examined for Brooks–Herring, Conwell–Weisskopf and Ridley models as the most frequently used in Monte Carlo simulation of charge carrier transport in semiconductors. A more correct procedure for polar scattering angle simulation is proposed for Ridley model. Peculiarities of scattering angle distribution densities calculated in the framework of regarded models are analyzed taking silicon as an example. Comparison of electron mobility calculated by ensemble Monte Carlo method using considered models has been done for doped silicon at 300 K and for constant electric field strength $F = 7 \cdot 10^4$ V/m.