

РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ КРЕМНИЯ

А.В. БЕРЕЗИН, Ю.А. ВОЛКОВ, М.Б. МАРКОВ, И.А. ТАРАКАНОВ

Федеральное государственное бюджетное учреждение Институт прикладной математики имени
М.В. Келдыша Российской академии наук
Москва, Россия
e-mail: liu_roach@mail.ru

Ключевые слова: кинетическое уравнение, радиационная проводимость, плотность состояний, квазиимпульс

Аннотация. На примере кремния рассматривается динамика неравновесных носителей заряда, возникающих при облучении образца фотонами с энергией порядка 1-2 МэВ. Для описания электронно-дырочной плазмы используются кинетические уравнения. Частоты рассеяния включают в себя упругое рассеяние на акустических фононах, неупругое рассеяние на оптических фононах, рассеяние на заряженных примесях и ударную ионизацию. Представлены результаты численного моделирования полей и токов, возникающих в кремнии под действием излучения.

THE RADIATION-INDUCED CONDUCTIVITY OF SILICON

A.V. BEREZIN, Y.A. VOLKOV, M.B. MARKOV, I.A. TARAKANOV

Keldysh Institute of Applied Mathematics
Moscow, Russia
e-mail: liu_roach@mail.ru

Summary. Properties of the nonequilibrium carriers produced by photons radiation with energy 1-2 MeV in silicon are considered. Quantum kinetic equations for electron-hole plasma are used. Scattering rates include both the acoustic and optical phonons interaction. The total scattering rate takes into account also the ionized impurities and the impact ionization. Calculations of radiation-induced electric field strength and density of current are demonstrated.

2010 Mathematics Subject Classification: 97M50, 93A30.

Key words and Phrases: Kinetic equation, radiation conductivity, density of states, quasi-momentum

1. ВВЕДЕНИЕ

Воздействие ионизирующего излучения космического пространства, такого как галактические и солнечные космические лучи, на микроэлектронные приборы спутников является критическим с точки зрения кратковременных отказов в работе и долговременного использования. Источники ионизирующих излучений имеют разную природу – это электроны и протоны радиационных поясов Земли, тяжелые заряженные частицы солнечных вспышек, гамма-излучение и другие источники техногенного происхождения. С учетом различий в физико-химических свойствах материалов, подвергаемых облучению, круг наблюдаемых явлений, которые традиционно относят к радиационной проводимости, очень широк¹. В данной работе, на примере кремния, рассматривается модель радиационной проводимости невырожденных полупроводников, электронный спектр которых имеет зонную структуру. Моделью источника фотонов служит тормозное излучение в экспериментах на линейно-индукционном ускорителе² ЛИУ-10.

Физика взаимодействия тормозного излучения с кристаллом выделяет несколько стадий этого процесса^{3,4}. Сначала фотоны с большими энергиями, проходя через кристалл, порождают некоторое количество релятивистских (первичных) электронов с энергиями порядка 1 МэВ, а ток первичных электронов создает в образце электромагнитное поле. В свою очередь, первичные электроны, теряя энергию при прохождении через кристалл, порождают электрон-дырочные пары. Тем самым, в кристалле создаются большие концентрации неравновесных избыточных носителей заряда. Кинетика избыточных носителей заряда в полях радиационного происхождения уже непосредственно связана с расчетами радиационно-индуцированной проводимости кристалла.

В соответствии с указанным сценарием, расчет осуществляется в два этапа. Внешняя задача учитывает воздействие на кристалл первичных частиц. На этой стадии определяются мгновенные значения тока первичных частиц и полей радиационного происхождения. Для численного решения уравнений Максвелла используется полностью консервативная разностная схема^{5,6}.

Внутренняя задача о кинетике (медленных, с энергией порядка 1эВ) носителей заряда рассматривается в приближении обратной эффективной массы^{7,8}. Эта часть во многом пересекается с зонной теорией строения кристаллов⁹, так как здесь требуются плотность энергетических состояний, эффективные массы и групповые скорости электронов и дырок. Для кремния, ввиду большой практической значимости этого материала, плотность состояний исследована детально¹⁰⁻¹², что позволяет вычислить все необходимые характеристики носителей заряда.

Связь между внешней и внутренней задачами осуществляется посредством источника вторичных частиц. Сам источник рассчитывается через мощность поглощаемой дозы в исследуемом материале. Исходя из мощности дозы и цены ионизации атома, рассчитывается общее число электронно-дырочных пар, рождающихся в единицу времени. Для того, чтобы получить распределение электронов проводимости и дырок валентной зоны по энергиям, используются двухпараметрические приближения, зависящие от энергии как первичных, так и вторичных частиц¹³.

Исследования переноса заряда в полупроводниках тесно связаны с методом Монте-Карло. Этот метод давно и успешно применяется для кремния (см.^{10,11,14-17,19} и цитируемую там литературу). Хотя численное моделирование переноса заряда в кремнии имеет долгую историю, новые аспекты этой проблемы, в первую очередь, обусловленные воз-

действием на кристалл, требуют некоторого пересмотра традиционных методов. Во-первых, все указанные выше процессы, от рождения / уничтожения частиц до их динамики в неидеальной решетке, происходят одновременно. Во-вторых, длительность импульса ЛИУ-10 значительно (на несколько порядков) превышает характерные времена процессов в кремнии. За характерное время, связанное со свойствами самого кристалла, можно принять величину $1/\nu$, где ν - суммарная частота рассеяния носителей заряда. Даже для очень коротких импульсов длительностью $t_0 \propto 10^{-9} - 10^{-8}$ с имеем $\nu t_0 \propto 10^3 - 10^4$. В результате концентрации носителей заряда многократно возрастают и в те же $10^3 - 10^4$ раз превышают свои равновесные значения.

Реализация внешней и внутренней задач в рамках единого кода неизбежно приводит к некоторым упрощениям, касающихся динамики носителей заряда. Этого можно достичь, если для расчета траекторий частиц воспользоваться приближением времени релаксации^{8,9}, т.е. отказаться от детального описания процессов рассеяния. Такой подход позволяет использовать в расчетах реальную форму и длительность импульса, соответствующую экспериментам¹⁸ на ЛИУ-10 и, тем самым, воспроизвести натурные условия воздействия на элементы оборудования.

Оценка проводимости вытекает из связи плотности тока с полем $j = \sigma E$. Другой независимый способ заключается в суммировании подвижностей всех электронов и дырок, т.е. является теоретической оценкой. Сравнение этих величин показывает, что они находятся в согласии друг с другом.

2. РАВНОВЕСНЫЕ НОСИТЕЛИ ЗАРЯДА

В состоянии равновесия с температурой решетки T у полупроводника имеется собственная проводимость

$$\sigma = en\mu_e + ep\mu_p \quad (1)$$

где e - заряд электрона, n - равновесная концентрация электронов и дырок. Подвижность носителей заряда в (1) определяется средним временем потерь импульса

$$\mu_{e(p)} = \frac{e \langle \tau_{e(p)} \rangle}{m_{e(p)}} \quad (2)$$

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

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

где κ_B - константа Больцмана. Формула (2) заимствована из теории переноса электронов в газовых средах и означает, что в дополнение к хаотической (тепловой) скорости $v_T \propto \sqrt{\kappa_B T / m_e}$, электрон в электрическом поле приобретает дрейфовую составляющую скорости²¹

$$\mathbf{v}_d = \mu \mathbf{E}, \quad \mu = \frac{e\lambda}{\sqrt{m_e \kappa_B T}}.$$

Здесь \mathbf{E} - напряженность поля. Подвижность, а вместе с ней и дрейфовая скорость, определяются средней длиной свободного пробега в газе $\lambda = v_T \langle \tau \rangle$.

В отличие от газовой плазмы оба параметра в правой части (2) должны учитывать влияние решетки кристалла на динамику носителей заряда. В этом контексте носители заряда удобно рассматривать как квазичастицы. Тогда электроны зоны проводимости представляют собой термические возбуждения, расположенные выше уровня Ферми, с избытком отрицательного заряда, а дырки валентной зоны – возбуждения с избытком положительного заряда ниже уровня Ферми⁹. Соответственно, массы m_e и m_p в (2) представляют собой эффективные массы квазичастиц, движущихся в идеальной решетке под действием внешней силы. Неидеальность же решетки учитывается величиной $1/\langle \tau \rangle$ - суммарной частотой рассеяния квазичастиц на дефектах решетки различной природы.

В идеальной решетке динамика носителей заряда полностью определяется зависимостью энергии от волнового числа или законом дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$. В отсутствие внешних

воздействий электрон движется с групповой скоростью $\mathbf{v}_g = \frac{\partial \varepsilon}{\partial(\hbar \mathbf{k})}$. Точный вид закона

дисперсии, как правило, неизвестен. В модели Кейна имеем

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e(1 + \gamma\varepsilon)}, \quad \gamma = \frac{1}{\varepsilon_g} \left(1 + \frac{m_e}{m}\right)^2 \quad (4)$$

где параметр непараболичности γ оценивается через ширину запрещенной полосы ε_g и массу свободного электрона m . Из (4) следует, что групповая скорость связана с квазиимпульсом электрона $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ классическим соотношением

$$\mathbf{v}_g = \mathbf{p}/m_e(\varepsilon),$$

а эффективная масса линейно растет с увеличением энергии

$$m_e(\varepsilon) = m_e(0)(1 + 2\gamma\varepsilon) \quad (5)$$

Соотношение (5), очевидно, применимо только вблизи дна зоны проводимости, поэтому рассмотрим другой способ определения скалярной эффективной массы. Для этого введем плотность состояний электронов: $g(\varepsilon)d\varepsilon$ есть число квантовых состояний в единице объема в заданном интервале энергий $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2} k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} \quad (6)$$

Для модели Кейна формула (6) дает

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \left(1 + \frac{5}{2}\gamma\varepsilon\right) \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e(\varepsilon)}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (7)$$

Если плотность состояний известна, то эффективную массу можно вычислить из (7)

$$\frac{m_e(\varepsilon)}{m_e(0)} = \frac{\hbar^2}{2m_e(0)} \left(\frac{2\pi^2 g(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{2/3} \quad (8)$$

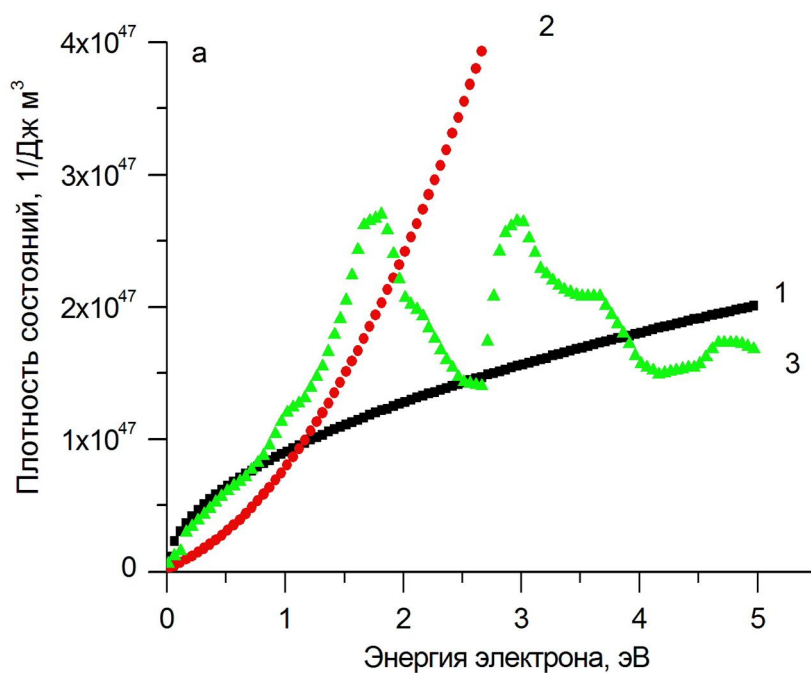


Рис. 1а. Плотность состояний в кремнии.

1 – параболическое приближение, 2 – приближение Кейна, 3 – теория функционала плотности¹²

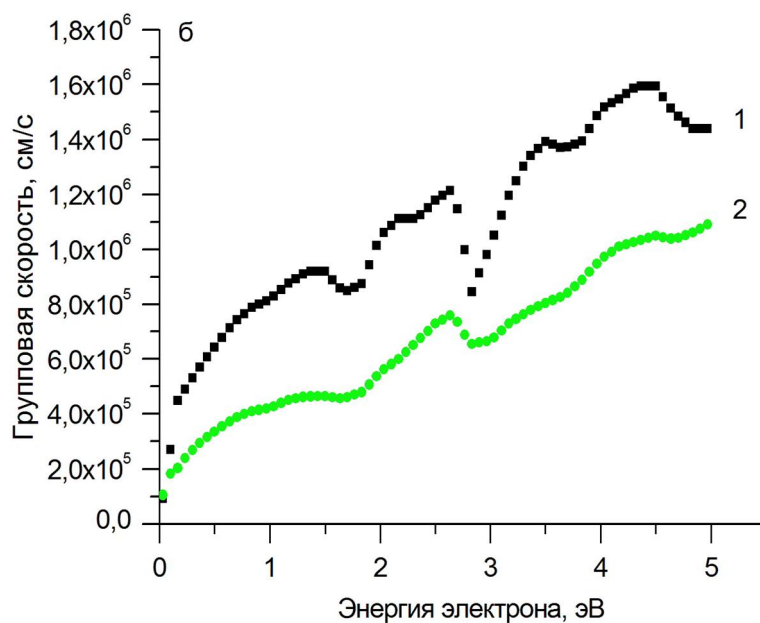


Рис. 1б. Групповые скорости в кремнии.

1 – групповые скорости, полученные по плотности состояния¹², 2 – групповые скорости в методе обратной эффективной массы

На рис. 1а показана плотность состояний электронов для первой зоны Бриллюэна в зависимости от их энергии в разных приближениях: в параболическом приближении (7), в приближении Кейна (4) и вычисленная методом функционала плотности (DFT)¹².

Равновесные носители движутся с групповой скоростью, зависящей от их энергии. Сравнение групповых скоростей электронов, полученных методом обратной эффективной массы с групповыми скоростями¹², показало (рис. 1б), что они отличаются приблизительно в 1.5 раза.

Для простой параболической зоны константа $m_e(0)$ в (8) представляет собой эффективную массу электрона вблизи дна зоны проводимости. В кремнии же приходится учитывать тот факт, что энергетический спектр электронов состоит из 6 эквивалентных долин, симметрично расположенных в зоне Бриллюэна (рис.2).

Минимум энергии в направлении $\langle 100 \rangle$ находится на расстоянии $k \approx 0,85(2\pi/a)$ от центра зоны Бриллюэна ($a = 5.431 \text{ \AA}$ - постоянная решетки). Если отсчитывать энергию электрона от ее минимального значения в долине, то изоэнергетическая поверхность вблизи каждого минимума имеет вид эллипсоида вращения⁷

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{m_1} + \frac{k_2^2}{m_2} + \frac{k_3^2}{m_3} \right) \quad (9)$$

Здесь $m_1/m = m_2/m = 0,19$, $m_3/m = 0,91$ - компоненты тензора обратной эффективной массы электрона в главных осях

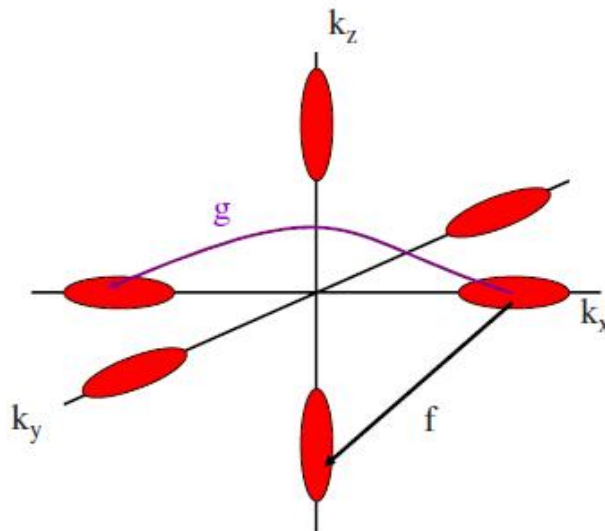


Рис. 2. Схема расположения Δ - долин в чистом кремнии.

Приближение (9) справедливо до пересечения поверхностью $\varepsilon = const$ границы первой зоны Бриллюэна, т.е. для электронов с энергией до $0,13 \text{ эВ}^{19}$. Определение подвижности (2) модифицируют с учетом того, что она теперь представляет собой тензор с диагональными элементами²⁰

$$\mu_{ii} = \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*}, \quad (10)$$

где m^* - скалярная эффективная масса электропроводности

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right)$$

Среднее время потерь импульса в (10) с учётом истинной плотности энергетических состояний носителей заряда определяется как

$$\langle \tau \rangle = \frac{2}{3k_b T} \frac{\int_0^\infty \tau(\varepsilon) g(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^\infty g(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon}. \quad (11)$$

Осреднение проводится по равновесной функции распределения $f_0(\varepsilon)$. Дырки рассматриваются только в параболическом приближении с эффективной массой $m_p = 0,56m$, поэтому их групповые скорости и квазиимпульсы полностью определяются формулами (5), (7).

3. ДИНАМИКА НЕРАВНОВЕСНЫХ НОСИТЕЛЕЙ

Рождаящиеся под действием ионизирующего излучения носители заряда обладают большой энергией $\varepsilon \gg k_b T$ в направлении распространения импульса излучения и по этой причине далеки от равновесия. В этой ситуации уже нельзя считать, что функция распределения в (11) зависит только от энергии. Здесь главную роль играет представление о функции распределения носителей заряда $f = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})$ как функции времени t , положения \mathbf{x} и квазиимпульса \mathbf{p} . Динамика неравновесных электронов проводимости и дырок валентной зоны определяется кинетическими уравнениями, которые, с учетом всех факторов, имеют вид

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{x}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vH}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{f_e - f_{0e}}{\tau_{tr,e}(\varepsilon)} + Q \quad (12)$$

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{x}} + e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vH}] \right) \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{f_p - f_{0p}}{\tau_{tr,p}(\varepsilon)} + Q \quad (13)$$

В уравнениях (12), (13) учтено, что электроны и дырки рождаются парами.

Электромагнитные поля в (12), (13) могут быть как внешними, так и внутренними, т.е. вызванными объемным зарядом и движением самих частиц. Уравнения (12) и (13) следует дополнить уравнениями Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (14)$$

$$\mathbf{j} = e \left(\int \mathbf{v} f_p(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} - \int \mathbf{v} f_e(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \right) + \mathbf{j}_0 \quad (15)$$

Здесь первый член в правой части (15) представляет собой суммарный ток электронов проводимости и дырок. Ток первичных электронов \mathbf{j}_0 отвечает за появление электромагнитных полей радиационной природы. Наличие в правых частях уравнений (12), (13) источника неравновесных носителей Q вместе с током первичных электронов \mathbf{j}_0 в уравнениях Максвелла является отличительной чертой задач радиационной проводимости.

При таком подходе важнейшую роль играет транспортное время релаксации носителей заряда

$$\frac{1}{\tau_r(\varepsilon)} = \frac{1}{\tau^{(ac)}(\varepsilon)} + \frac{1}{\tau^{(opt)}(\varepsilon)} + \frac{1}{\tau^{(imp)}(\varepsilon)} + \frac{1}{\tau^{(ion)}(\varepsilon)} \quad (16)$$

В формуле (16) учтены следующие процессы:

1. Упругое рассеяние на акустических фононах (АС-фононы);
2. Неупругое рассеяние на неполярных оптических фононах (ТО-фононы);
3. Упругое рассеяние на заряженных примесях (для сильно легированных полупроводников);
4. Ударная ионизация.

Частоты рассеяния на акустических $1/\tau^{(ac)}$ и оптических $1/\tau^{(opt)}$ фононах вычислены, как для электронов (с поправками на непараболичность зоны), так и для дырок (в параболическом приближении)²⁰. Для частоты рассеяния на заряженных примесях $1/\tau^{(imp)}$ используются формулы Конвелла-Вайскопфа²², либо Брукса-Херринга²³. Последний член в правой части (16) отвечает ударной ионизации. Вычисление величины $1/\tau^{(ion)}$ проводится по формуле Келдыша. Входящие в нее константы взяты из работы³¹, там же проводится сравнение с экспериментальными данными по скорости ударной ионизации. На рис. 3 показаны суммарные частоты рассеяния в диапазоне 0 -5.5 эВ, что приблизительно соответствует первой зоне Бриллюэна. Отметим, что для электронов имеется не только качественное, но и количественное совпадение с результатами аналогичных вычислений, представленными в работах^{10,19,28-30}.

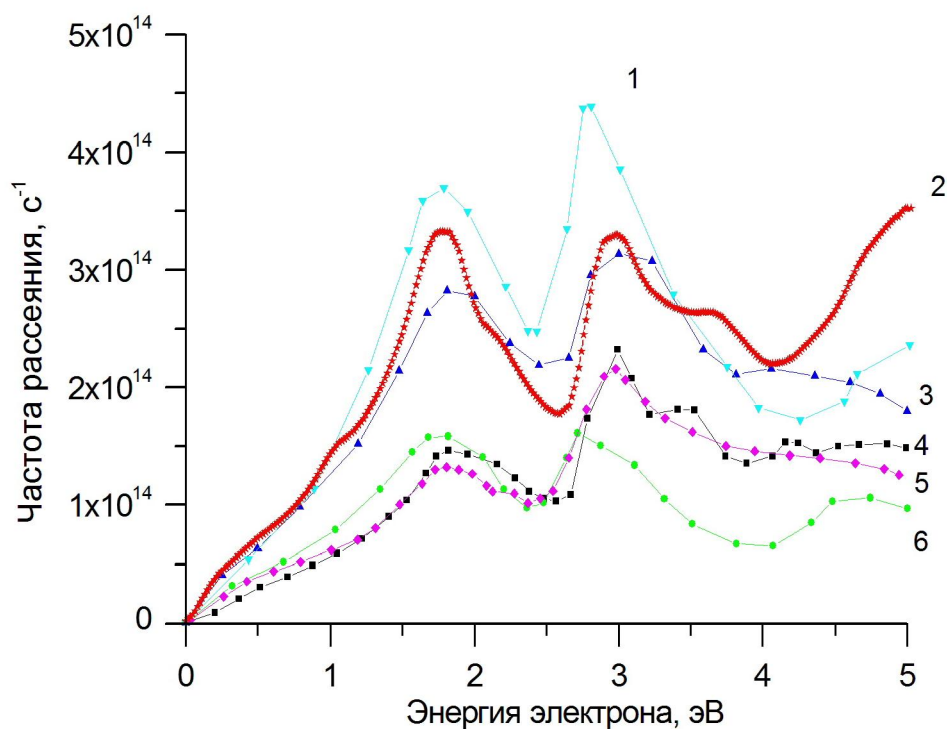


Рис.3. Суммарная частота рассеяния электронов в кремнии.
 1 – [28], 2 – данная работа, 3 – [29], 4 – [19], 5 – [10], 6 – [30].

4. ИСТОЧНИКИ И ПОЛЯ

4.1. Ток первичных частиц.

Схема работы ускорителя в режиме генерации тормозного излучения показана на рис.4.

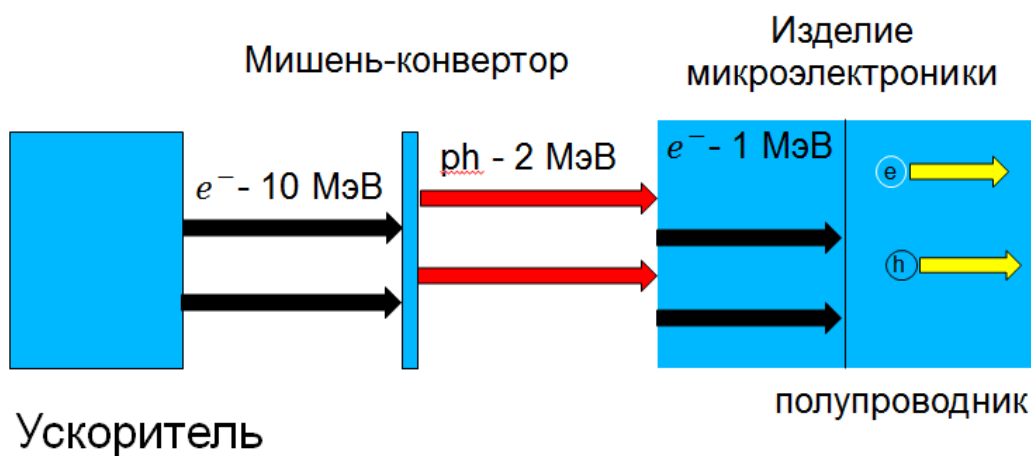


Рис. 4. ЛИУ-10 в режиме генерации тормозного излучения.
 Поток электронов с током 30 кА, падая на танталовую мишень, порождает тормозное излучение с энергией γ -квантов 1-2 МэВ.

Электроны ускорителя с энергией 10 МэВ падают на мишень-конвертор, представляющую собой танталовую пластину. Порождаемые в мишени фотоны тормозного излучения с энергией 2 МэВ падают на изделие микроэлектроники и комптоновски рассеиваются, образуя электроны с энергией 1 МэВ. Эти (первичные) электроны, в свою очередь, порождают в полупроводниках электронно-дырочные пары. Плотность потока фотонов в воздухе за мишенью²⁶

$$J_{\gamma} = \frac{\Lambda_{\gamma} \varepsilon_{iv} X}{e \varepsilon_{\gamma} \rho},$$

где $\Lambda_{\gamma} = 183$ м – пробег γ -кванта с энергией $\varepsilon_{\gamma} = 2$ МэВ в воздухе, $\varepsilon_{iv} = 33$ эВ – цена ионизации воздуха, ρ – плотность воздуха, $X = 10^{10}$ P/c – мощность экспозиционной дозы. Толщина изделий микроэлектроники гораздо меньше длины свободного пробега комптоновского электрона, поэтому пространственным ослаблением электронного пучка можно пренебречь. Тогда плотность потока первичных электронов имеет вид

$$J_e = (\lambda_e / \lambda_{\gamma}) J_{\gamma},$$

где $\lambda_e = 0,231$ см – длина свободного пробега в кремнии электронов с энергией 1 МэВ, $\lambda_{\gamma} = 9,589$ см – длина свободного пробега в кремнии фотона с энергией 2 МэВ. Плотность тока первичных электронов $j_0 = e J_e$ используется в уравнении (15).

4.2. Источник вторичных частиц.

Количество электронно-дырочных пар, рождаемых первичными частицами в единицу времени (рис. 5)

$$N_{e-p} = \frac{J_e \varepsilon_e}{\lambda_e \varepsilon_i}.$$

Здесь $\varepsilon_e = 1$ МэВ – средняя энергия первичных электронов, $\varepsilon_i = 3,6$ эВ – средняя энергия ионизации, необходимая для образования пары в кремнии.

Источник вторичных частиц в уравнениях (12), (13) представим в виде

$$Q = N_{e-p} \Psi(\varepsilon), \quad \int \Psi(\varepsilon) d\varepsilon = 1,$$

где функция $\Psi(\varepsilon)$ представляет собой распределение рождающихся носителей заряда по энергиям. Для распределения Ψ используется двухпараметрическое семейство функций, предложенное в работе¹³ для аппроксимации экспериментальных данных

$$\Psi_e = \frac{105}{8} \varepsilon_2^{1/2} [(\varepsilon_1 - \varepsilon_g) - \varepsilon_2]^2 / (\varepsilon_1 - \varepsilon_g)^{7/2} \quad (17)$$

$$\Psi_p = \frac{105}{16} \varepsilon_2^{1/2} [(\varepsilon_1 - 2\varepsilon_g) - \varepsilon_2]^2 / (\varepsilon_1 - 2\varepsilon_g)^{7/2} \quad (18)$$

В формулах (17), (18) ε_g – ширина запрещенной полосы, ε_1 и ε_2 – энергии первичной и вторичной частицы, соответственно. Энергия электронов проводимости отсчитывается от дна зоны проводимости, энергия дырок отсчитывается от потолка валентной зоны.

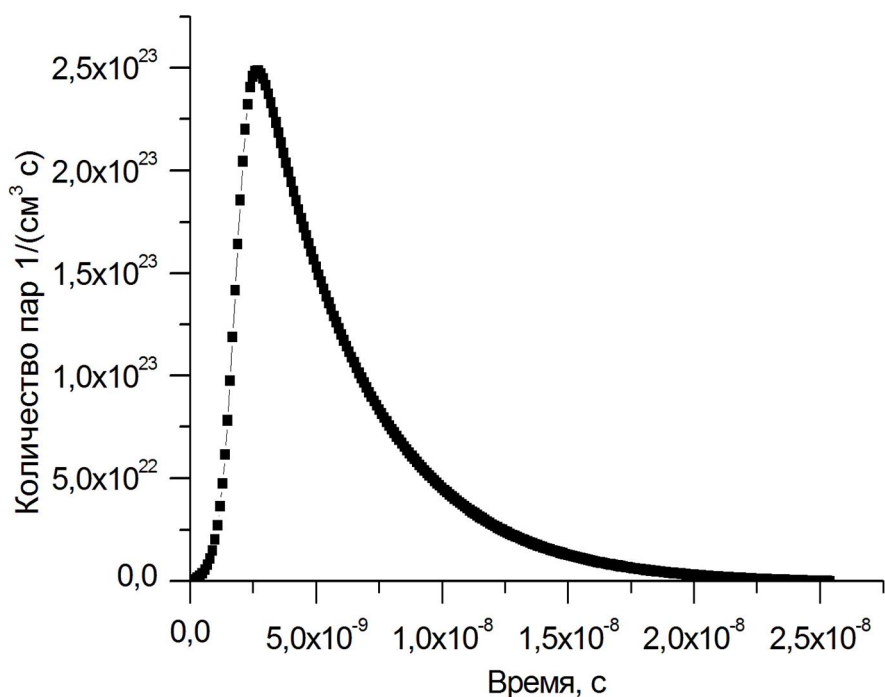


Рис. 5. Зависимость количества электронно-дырочных пар от времени.

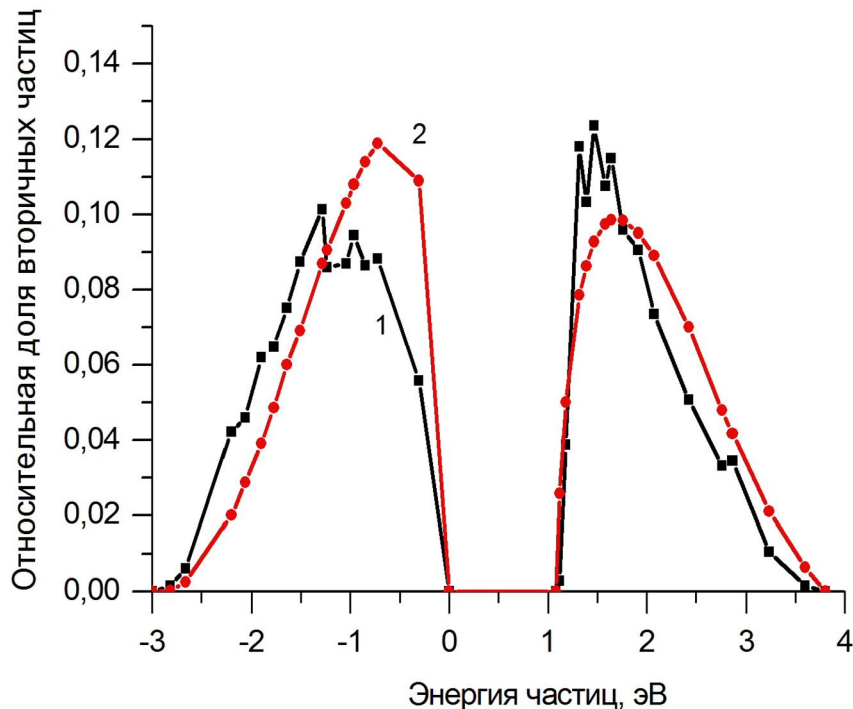


Рис.6. Сравнение экспериментальной зависимости и аналитической формулы относительной доли вторичных частиц в кремнии.
 1 – экспериментальная зависимость, 2 – расчётная зависимость.

На рис. 6 показаны относительные доли вторичных электронов и дырок, которые затем трансформируются в вероятности рождения частицы в диапазоне $\varepsilon_k < \varepsilon < \varepsilon_{k+1}$.

4.3. Электромагнитные поля.

Расчёт электромагнитных полей проводится разностной схемой типа «крест»²⁷ в 3D геометрии. Сеточные компоненты смещены относительно друг друга на полшага разностной сетки (так называемая ячейка Рябенского).

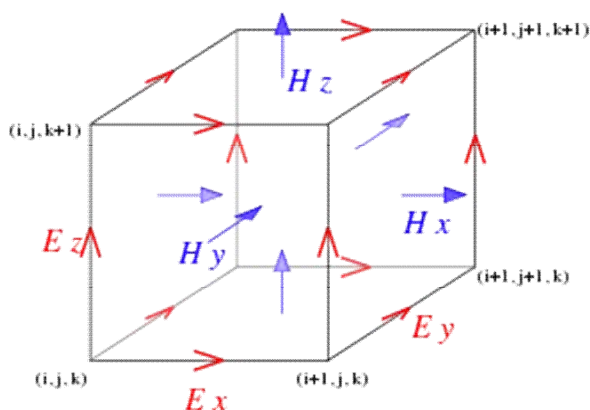


Рис. 7. Поля в ячейке Рябенского

Компоненты напряжённости электрического поля отнесены к целым точкам по времени, а компоненты напряжённости магнитного поля к полуцелым точкам (рис. 7). На границах расчётной области заданы условия идеального проводника. При расчёте напряжённости электрического поля используются значения магнитного поля, полученные на предыдущем шаге по времени. После этого производится пересчёт магнитного поля на основании рассчитанных значений компонент напряжённости электрического поля. Плотность стороннего электрического тока должна быть известна в полуцелые моменты времени. Разностная схема является устойчивой при выполнении условия Куранта, поэтому шаг по времени при расчетах поля можно взять гораздо большим, чем при расчетах динамики частиц.

5. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ

Квазиклассические траектории частиц получаются путем решения уравнений движения в приближении времени релаксации^{8,24,25}

$$\frac{d\mathbf{x}_{e(p)}}{dt} = \mathbf{v}_{e(p)} \quad (19)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_{e(p)}}{dt} = \frac{q_{e(p)}}{m_{e(p)}} \mathbf{E} - \frac{\mathbf{v}_{e(p)}}{\tau_{e(p)}(\varepsilon_{e(p)})} \quad (20)$$

$$\frac{d\varepsilon_{e(p)}}{dt} = q_{e(p)} \mathbf{v}_{e(p)} \mathbf{E} - \frac{\varepsilon_{e(p)}}{\tau_{e(p)}(\varepsilon_{e(p)})/2} \quad (21)$$

После рождения пары частицы движутся с групповой скоростью. Для решения уравнений (19) - (21) используется схема типа «предиктор-корректор» (индекс электронов и дырок опускаем). Обозначим Δt - шаг интегрирования по времени уравнений движения. В начале каждого шага по времени скорость и энергия носителей заряда, а также электрическое поле, действующее на них, считаются известными. Численный метод состоит из следующей последовательности шагов. Для каждой частицы на текущем временном шаге i :

1. Вычисляется эффективная масса состояний $m_i = m(\varepsilon^i)$ и время свободного пробега частицы $\tau_i = \tau(\varepsilon^i)$.

2. С помощью схемы с экспоненциальными весами определяются скорость и энергия частицы

$$\mathbf{v}^{i+1} = \mathbf{v}^i \exp(-\Delta t/\tau_i) + \frac{q\mathbf{E}\tau_i}{m_i} (1 - \exp(-\Delta t/\tau_i)),$$

$$\varepsilon^{i+1} = \varepsilon^i \exp(-2\Delta t/\tau_i) + \frac{q\mathbf{E}\mathbf{v}^i\tau_i}{2} (1 - \exp(-2\Delta t/\tau_i)).$$

3. Проводится итерационное уточнение параметров траектории

$$\varepsilon^{i+1/2} = (\varepsilon^{i+1} + \varepsilon^i)/2, \quad m_{i+1/2} = m(\varepsilon^{i+1/2}), \quad \tau_{i+1/2} = \tau(\varepsilon^{i+1/2}).$$

4. Определяются новые значения скорости и энергии частицы

$$\mathbf{v}^{i+1} = \mathbf{v}^i \exp(-\Delta t/\tau_{i+1/2}) + \frac{q\mathbf{E}\tau_{i+1/2}}{m_{i+1/2}} (1 - \exp(-\Delta t/\tau_{i+1/2})),$$

$$\varepsilon^{i+1} = \varepsilon^i \exp(-2\Delta t/\tau_{i+1/2}) + \frac{q\mathbf{E}\mathbf{v}^{i+1/2}\tau_{i+1/2}}{2} (1 - \exp(-2\Delta t/\tau_{i+1/2})).$$

5. Вычисляется новое положение частицы

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{x}^i + (\mathbf{v}^i + \mathbf{v}^{i+1})/2 \Delta t.$$

6. Вычисляется вклад частицы в плотность тока.

После того, как обработаны все траектории всех типов частиц, известна плотность тока проводимости в уравнениях Максвелла.

В качестве проверки работы алгоритма рассмотрены две задачи. Первая из них состоит в расчете средней дрейфовой скорости электронов в электрическом поле. Известно^{21,32}, что дрейфовая скорость не зависит от напряженности электрического поля в определенном интервале напряженностей (эффект «насыщения») и выходит на постоянное значение $\approx 10^7$ см/с. Это продемонстрировано на рис.8. Изложенный метод приводит к экспоненциальным потерям во всем диапазоне энергий. Наилучшее совпадение с экспериментом дает другая версия метода, ограничивающая потери энергии величиной оптического кванта $\hbar\omega_0 \approx 0.062$ эВ, что приводит к линейным потерям энергии и правильной величине скорости дрейфа в области больших полей. Уравнение (21) модифицируется следующим образом

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = qvE - \frac{\varepsilon}{\tau(\varepsilon)/2}, \quad \varepsilon < \hbar\omega_0,$$

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = qvE - \frac{\hbar\omega_0}{\tau(\varepsilon)/2}, \quad \varepsilon > \hbar\omega_0.$$

Другая задача связана со скоростью передачи энергии от электронов оптическим фононам. Источник (17) генерирует «горячие» электроны со средней энергией ≈ 2 эВ, которая существенно превосходит температуру решетки $k_b T \approx 1/40$ эВ. Уменьшение энергии электронов до тепловых приводит к генерации источника тепла, содержащегося в виде оптических фононов. В работе³³ показано, что энергия от электронов передается оптическим фононам за время порядка 10^{-13} с. Это согласуется с расчетами изменения температуры частиц (рис. 9) предложенным выше методом.

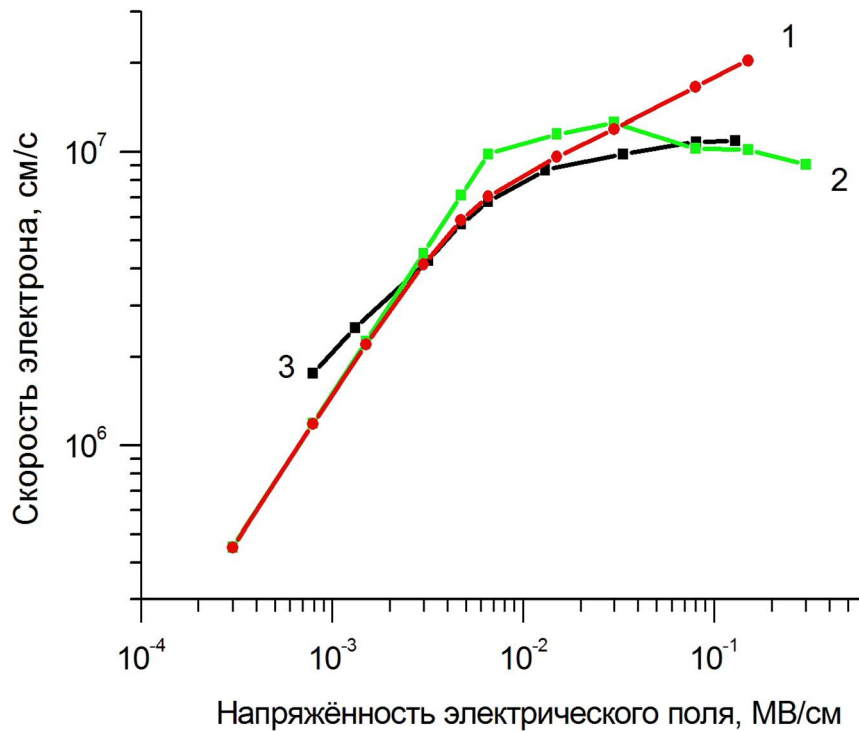


Рис.8. Зависимость дрейфовой скорости электронов от напряжённости электрического поля.
 1- экспоненциальные потери энергии, 2 - линейных потери энергии, 3 – экспериментальные данные [32]

6. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Исследуемый образец представляет собой пластину кремния, размеры которого $1\text{см} \times 1\text{см} \times 0,05\text{см}$.

Поток фотонов тормозного излучения падает на нижнюю грань пластины. Ось z ориентирована вдоль потока первичных электронов, т.е. j_0 является z -компонентой плотности

стороннего тока. Количество рождаемых электронно-дырочных пар в максимуме импульса варьировалось в пределах $(2,4 \cdot 10^{22} - 2,4 \cdot 10^{23}) \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$.

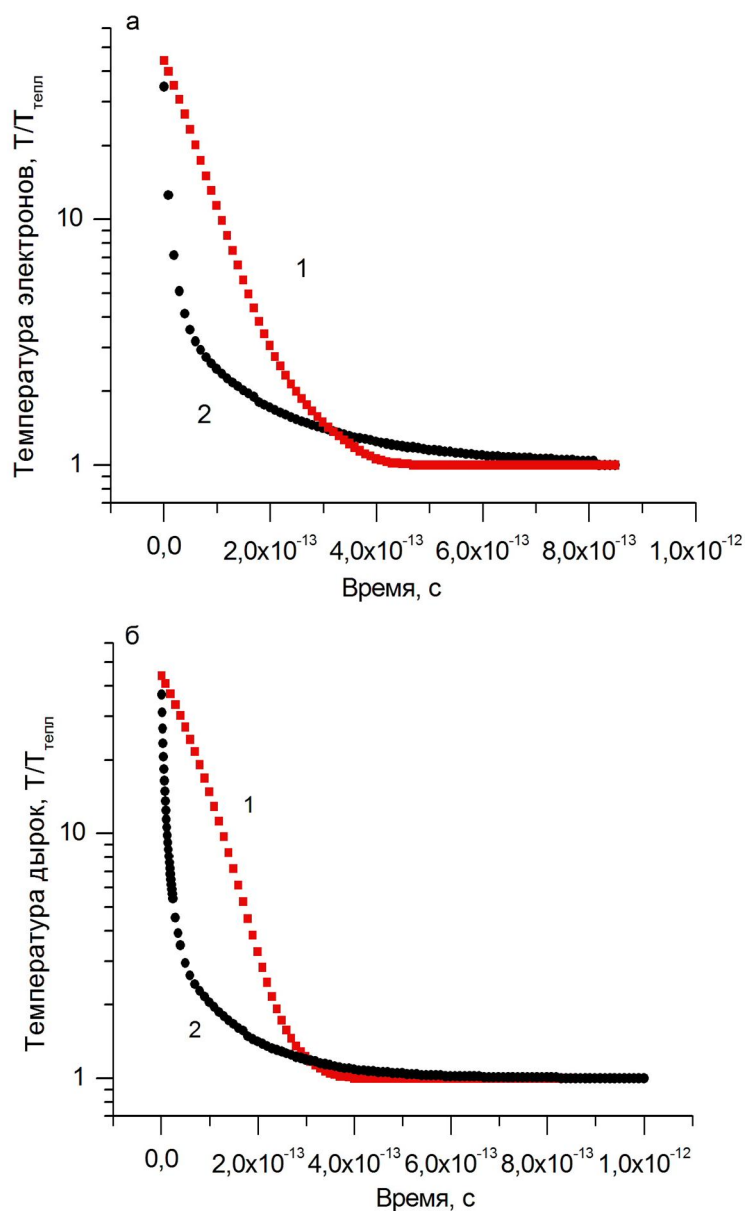


Рис. 9. Зависимости температур электронов (а) и дырок (б) от времени в кремнии.
1 – приближение линейных потерь энергии, 2 – приближение экспоненциальных потерь энергии

Результаты расчетов, относящиеся к центру образца, представлены на рис. 10-12. Если z - компонента электрического поля в целом повторяет форму импульса (рис.10), то токи проводимости спадают гораздо медленнее. Это означает, что значительную часть электронов все еще составляют «горячие» электроны, дрейфовая скорость которых больше или порядка тепловой.

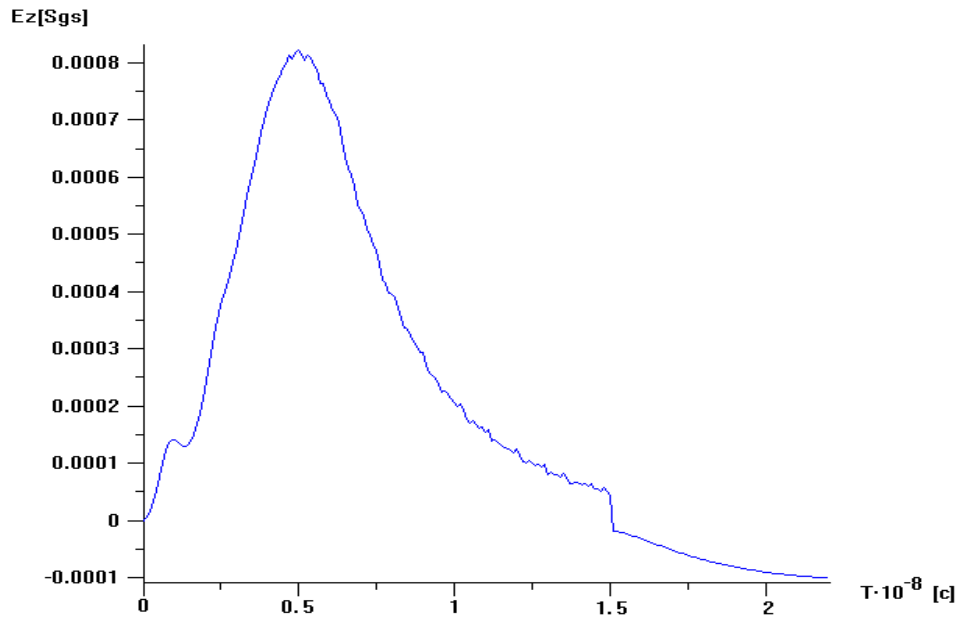


Рис. 10. Напряжённость электрического поля в зависимости от времени.

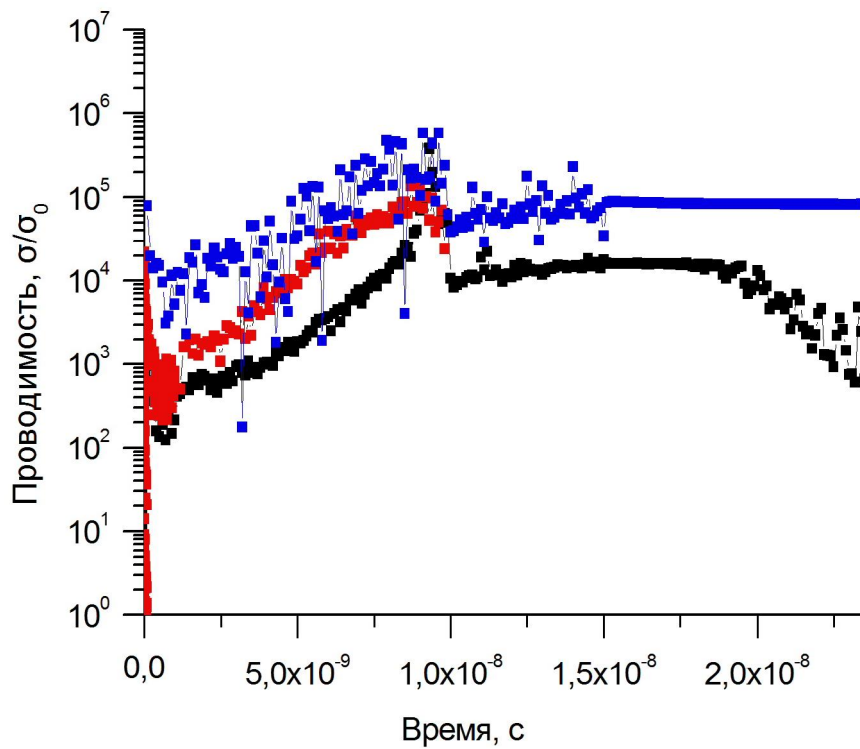


Рис. 11. Зависимость радиационной проводимости от времени.
 Красная линия - амплитуда источника $2,4 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, $3 \cdot 10^6$ частиц в расчете, синяя линия - амплитуда источника $2,4 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, $45 \cdot 10^6$ частиц в расчете, чёрная линия - амплитуда источника $2,4 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, $3 \cdot 10^6$ частиц в расчете.

Кроме того, концентрации носителей заряда примерно в 10^5 раз превосходят их равновесные значения. Из-за того, что среднее объемное время жизни носителей заряда на несколько порядков больше длительности импульса, убыль числа частиц за счет рекомбинации несущественна, что и приводит к столь большим концентрациям. Поэтому, после окончания импульса воздействия, радиационная проводимость выходит на плато (рис. 11, 12), соответствующее мощности источника.

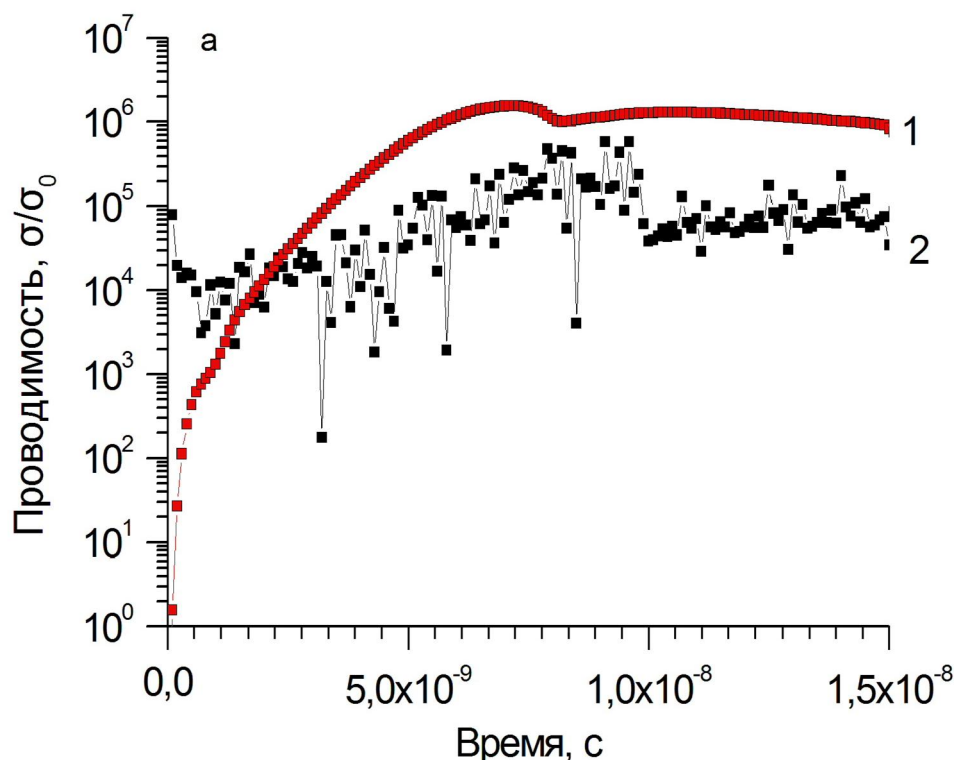


Рис.12. График зависимости радиационной проводимости в кремнии от времени. Амплитуда источника $8,64 \cdot 10^{22}$ эв $\text{см}^{-3}\text{с}^{-1}$: 1 – расчет по концентрации носителей, 2 – расчет по плотности тока

Теоретическая оценка проводимости в пределе больших времен $t \gg 1/\nu$ вытекает из формулы (11). Входящая в них подвижность носителей заряда, вообще говоря, сама зависит от напряженности поля. Но поскольку поля радиационного происхождения невелики (рис. 10) и лежат вне области «насыщения» дрейфовой скорости, то соответствующими поправками в подвижность можно пренебречь, взяв стандартные значения $\mu_e \approx 1500 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ для электронов и $\mu_p \approx 500 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ для дырок. Рассчитанная таким образом проводимость показана на рис. 12 (кривая 1). Кривая 2 - средняя по образцу проводимость, полученная из соотношения $j_z = \sigma E_z$.

Рис. 12 показывает, что результаты дрейфовой теории количественно совпадают с расчетами в используемых здесь приближениях. Это является косвенным подтверждением правильности выбора основных параметров модели.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты № 14-01-00350 А.

REFERENCES

- [1] *Model kosmosa: v 2t. T.2 : Vozdeistvie kosmicheskoi sredy na materialy i oborudovanie kosmicheskikh apparatov*, Red. M.I. Panasiuka, L.S. Novikova, M.: KDU (2007).
- [2] www.niipriborov.ru.
- [3] *Ionizing radiation effects in MOS devices & circuit*, Ed. by T.P. Ma and P.V. Dressendorfer, John Wiley and Sons (1989).
- [4] A.I. Chumakov, *Deistvie kosmicheskoi radiatsii na integral'nye skhemy*, M.: Radio i sviaz', (2004).
- [5] A.V. Berezin, A.V. Vorontsov, M.B. Markov, B.D. Plyuschenkov, "O vyivode i reshenii uravneniy Maksvella v zadachah s zadannym volnovym frontom poley", *Matematicheskoe modelirovanie*, **18** (4), 43-60 (2006).
- [6] A.N. Andrianov, A.V. Berezin, A.S. Vorontsov, K.N. Efimkin, V.F. Zinchenko, M.B. Markov, A.M. Chlenov, "Modelirovanie puchka uskoritelya LIU-10 na parallelnom kompyutere", *Matematicheskoe modelirovanie*, **22** (2), 29-44 (2010).
- [7] A.I. Anselm, *Introduction to Semiconductor Theory*, Prentice Hall (1982).
- [8] Peter Y. Yu, Manuel Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Springer Science & Business Media (2010).
- [9] E.M. Lifshits, L.P. Pitaevskii, *Statistical Physics: Theory of the Condensed State (Course of Theoretical Physics Vol. 9)*, Butterworth-Heinemann (1980).
- [10] M.V. Fischetti, "Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures", *IEEE Trans. Electron Devices*, **38**, 634 (1991).
- [11] X. Wang, V. Chandarmouli, C.M. Mazar, A.F. Tasch, "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.*, **73**, 3339 (1993).
- [12] E. Gnani, S. Reggiani, M. Rudan, "Density of states and group velocity of electrons in SiO₂ calculated from a full band structure", *Phys. Rev. B.*, **66**, 195205 (2002).
- [13] P. A. Childs and D. W. Dyke, "Analytic expressions for impact ionization rates and secondary particle energy distributions in semiconductors", *Appl. Phys. Lett.*, **74** (18), 2646 – 2648 (1999).
- [14] C. Jacoboni, L. Reggiani, "The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials", *Rev. Mod. Phys.*, **55** (3), 645 (1983).
- [15] J. Tang, K. Hess, "Impact ionization of electrons in silicon (steady state)", *J. Appl. Phys.*, **54**, 5139 (1983).
- [16] M.V. Fischetti, "Monte Carlo solution to the problem of high-field electron heating in SiO₂", *Phys. Rev. Letters*, **53**, 1755-1758 (1984).
- [17] M.V. Fischetti, S.E. Laux, "Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band structure and space-charge effects", *Phys. Rev. B*, **38**, 9721-9745 (1988).
- [18] N.G. Mordasov, A.M. Chlenov, D.M. Ivaschenko, V.A. Kamenskiy, "Ispolzovanie koaksialnoy vakuumnoy linii uskoritelya dlya formirovaniya diploidnyih puchkov tormoznogo izlucheniya", *VANT*, **1**, 61-64 (2011).
- [19] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, "A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact ionization model", *J. Appl. Phys.*, **75**, 297-312 (1995).
- [20] M.V. Fischetti, S.E. Laux, "Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys", *J. Appl. Phys.*, **80**, 2234-2252 (1996).
- [21] B. M. Smirnov, "Kinetics of electrons in gases and condensed systems", *UFN*, **172** (12), 1411–1447 (2002).
- [22] E. Conwell, V. F. Weisskopf, "Theory of impurity scattering in semiconductors", *Phys. Rev.*, **77**, 388 (1950).
- [23] H. Brooks, "Scattering by Ionized Impurities in Semiconductors", *Phys. Rev.*, **83**, 879 (1951).
- [24] E. Conwell, *High Field Transport in Semiconductors*, Academic Press Inc (1967).

- [25] V. L. Ginzburg, A. V. Gurevich, “Nonlinear phenomena in a Plasma located in an alternating electromagnetic field”, *Sov. Phys. Usp.*, **3**, 175–194 (1960).
- [26] N.G. Mordasov, “Diagnostika trubchatogo puchka relyativistskih elektronov po peredatochnoy funktsii misheni-konvertera”, *ZhTF*, **73** (2), 107-112 (2003).
- [27] A. N. Andrianov, A. V. Berezin, A. S. Vorontsov, K. N. Efimkin, M. B. Markov, “Modelirovanie elektromagnitnyh poley radiatsionnogo proishozhdeniya na mnogoprotsessornykh vyichislitelnykh sistemah”, *Matem. modelirovanie*, **20** (3), 98–114 (2008).
- [28] Y. M. Niquet, D. Rideau, C. Tavenier, H. Jaouen, X. Blasé, “Onsite matrix elements of the tight-binding Hamiltonian of a strained crystal: Application to silicon, germanium, and their alloys”, *Phys. Rev.*, **79**, 245201 (2009).
- [29] O.D. Restrepo, K. Varga, S.T. Pantelides, “First-principles calculations of electron mobilities in silicon: Phonon and Coulomb scattering”, *Appl. Phys. Lett.*, **94**, 212103 (2009).
- [30] M. Michailat, D. Rideau, F. Aniel, C. Tavernier, H. Jaouen, “Full-Band Monte Carlo investigation of hole mobilities in SiGe, SiC and SiGeC alloys”, *Thin Solid Films*, **518**, 2437 (2010).
- [31] M.V. Fischetti, S.E. Laux, E. Crabbe, “Understanding hot-electron transport in silicon devices: is there a shortcut?”, *J. Appl. Phys.*, **78** (2), 1058-1087 (1995).
- [32] C. Canali, C. Jacobini, F. Nava, G. Ottavini, and A. A. Quaranta, “Electron drift velocity in silicon”, *Phys. Rev.*, **12**, 2265 (1975).
- [33] E. Pop, S. Sinha, K.E. Goodson, “Monte Carlo modeling of heat generation in electronic nanostructures”, *Proc. of IMECE02/HT-32124*, 1-6 (2002).

The results were presented at the thirteenth international seminar "Mathematical models & modeling in laser-plasma processes & advanced science technologies" (May 30 - June 6, 2015, Petrovac, Montenegro).