

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МИКРОЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ

УДК 537.222.2

Г. В. ГАДИЯК, И. В. ТРАВКОВ
(Новосибирск)

РАСЧЕТ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В SiO_2 В СЛАБЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

В последние годы был выполнен ряд теоретических [1—4] и экспериментальных [5—9] исследований транспортных явлений в сильных электрических полях $10^6 < E < 10^7$ В/см. В достаточно сильном электрическом поле функция распределения электронов (ФРЭ) может существенно отличаться от равновесной, что приводит к необходимости использования кинетического подхода. Отличительной особенностью SiO_2 является низкая концентрация разного рода дефектов, поэтому при моделировании можно с хорошей точностью считать, что свободные носители рассеиваются только на колебаниях решетки — фононах. В первой расчетной работе по переносу заряда в оксиде кремния [2] был учтен только один механизм рассеяния электронов: неупругое взаимодействие с продольными оптическими (LO) фононами, что справедливо для полярных материалов. С ростом электрического поля электрон между актами рассеяния может набрать энергию, превышающую энергию LO -фонона, что приводит к появлению «хвоста» убегающих электронов. Чтобы обеспечить стабилизацию ФРЭ в очень сильных полях, полученную экспериментально в [7], авторы [3] учли еще один механизм рассеяния — на неполярных акустических фононах. Наличие двух конкурирующих механизмов электрон-фононного взаимодействия привело к возникновению двугорбой ФРЭ в узком диапазоне электрических полей $2,5 \cdot 10^6 < E < 4 \cdot 10^6$ В/см [4], впервые предсказанной в [9].

В настоящей работе определен вид функции распределения электронов по энергиям в диапазоне полей $10^4 < E < 2 \cdot 10^6$ В/см.

Решение трехмерного линейного кинетического уравнения Больцмана, которое описывает интересующую нас задачу, находилось с помощью прямого статистического моделирования (метод Монте-Карло) [10, 11]. Поскольку в исследуемой области напряженности электрического поля энергии носителей невелики, то рассеянием на неполярных акустических фононах можно пренебречь, как следует из [3, 4]. Для контроля нами проводилось сравнение средней энергии электронов, рассчитанных с учетом и без учета рассеяния на неполярных акустических фононах. Отличие не превышало статистическую ошибку по числу траекторий. Поскольку концентрация свободных носителей в зоне проводимости диэлектрика мала, их взаимодействие не учитывалось.

Функция распределения рассчитывалась путем усреднения по $2 \cdot 10^4$ траекториям частиц в объеме диэлектрика. Начальные координаты и скорости соответствовали равновесному максвелл-больцмановскому распределению с комнатной температурой $T = 300$ К. Время релаксации

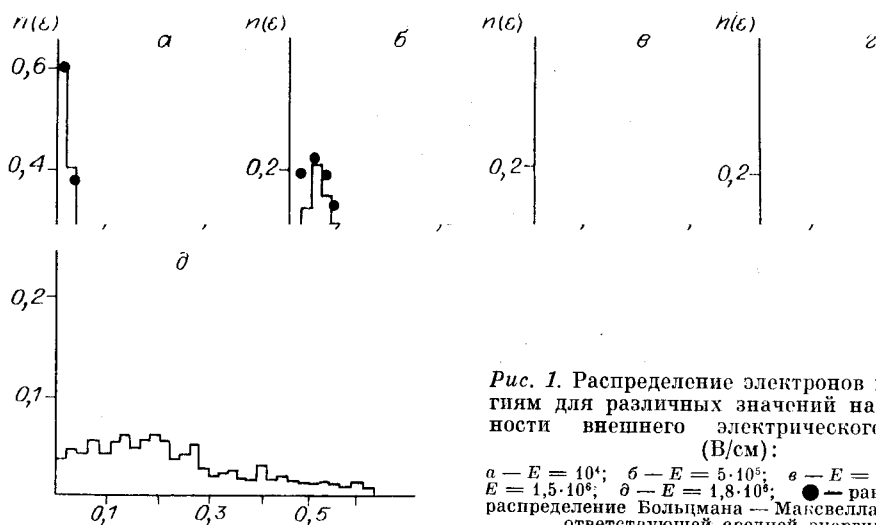


Рис. 1. Распределение электронов по энергиям для различных значений напряженности внешнего электрического поля (В/см):

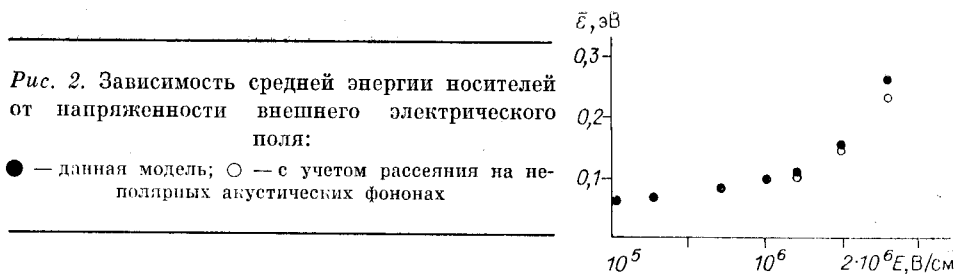
а — $E = 10^4$; б — $E = 5 \cdot 10^3$; в — $E = 10^3$; г — $E = 1,5 \cdot 10^3$; д — $E = 1,8 \cdot 10^3$; ● — равновесное распределение Больцмана — Максвелла при соответствующей средней энергии

при рассеянии на LO -фононах записывалось в виде [12]

$$\frac{1}{\tau_{\pm}} = \sqrt{\frac{m^*}{2}} \frac{e^2 \omega_{LO}}{4\pi \hbar} \left(\frac{1}{\kappa_{\infty}} - \frac{1}{\kappa} \right) \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \left(n_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \ln \left(\frac{1 + (1 \mp \hbar \omega_{LO}/\epsilon)^{1/2}}{\pm 1 \mp (1 \mp \hbar \omega_{LO}/\epsilon)^{1/2}} \right), \quad (1)$$

где n_q — числа заполнения фононов, подчиняющихся статистике Бозе — Эйнштейна; m^* , e — эффективная масса и заряд электрона; \hbar — постоянная Планка; ϵ — энергия электрона; κ_{∞} , κ — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости; ω_{LO} — частота продольного оптического фонона; знак «+» соответствует испусканию, а «-» — поглощению фонона с квазиимпульсом q и энергией $\hbar \omega_{LO}$. Согласно экспериментальным данным [13], предполагалось, что в SiO_2 электроны взаимодействуют с двумя модами оптических колебаний решетки с энергиями $\hbar \omega_{LO}^{(1)} = 0,06$ и $\hbar \omega_{LO}^{(2)} = 0,153$ эВ. Индикатриса рассеяния и параметры выражения (1) аналогичны [2].

На рис. 1 представлены стационарные функции распределения электронов по энергиям для различных значений внешнего электрического поля. В слабых полях $E \leq 10^4$ В/см ФРЭ близка к равновесной со средней температурой носителей порядка температуры решетки. С ростом внешнего электрического поля ФРЭ перестает быть максвелловской (рис. 1, б), наибольшее отличие возникает в «хвосте» ФРЭ (при $\epsilon > \hbar \omega_{LO}^{(1)} = 0,06$ эВ). Изменение ФРЭ в данной системе происходит за счет действия внешнего электрического поля, поглощения и испускания фононов. Вероятность потерь энергии за счет испускания фононов резко возрастает при $\epsilon > \hbar \omega_{LO}$, при определенных условиях они преобладают над разогревом, что и проявляется в уменьшении числа носителей с энергией $\epsilon > \epsilon^*$. Очевидно, что особенности в ФРЭ должны возникать в окрестности выделенных значений энергий двух оптических мод $\hbar \omega_{LO}^{(1)}$ и $\hbar \omega_{LO}^{(2)}$ (энергии включения механизмов испускания фононов). Отсутствие точного совпадения ϵ^* и $\hbar \omega_{LO}$ объясняется, на наш взгляд, одновременностью действия всех трех перечисленных выше факторов. Дальнейший



рост поля приводит к некоторому уширению первого максимума ФРЭ и увеличению средней энергии электронов (рис. 2), которое обуславливает усиление влияния второй оптической моды. В диапазоне значений внешнего поля $10^6 < E < 1,8 \cdot 10^6$ В/см возникает ФРЭ с двумя максимумами (рис. 1, 2) из-за взаимодействия с фононами обеих мод. Как и ранее, испускание фононов подавляет высокоэнергетичные электронные «хвосты». При $E > 2 \cdot 10^6$ В/см электроны за время между столкновениями успевают набрать в поле энергию больше теряемой при взаимодействии с колебаниями решетки, что влечет за собой появление убегающих электронов [8]. Момент нарушения энергетического баланса хорошо виден на зависимости средней энергии электронов от напряженности электрического поля (см. рис. 2). Здесь также представлены результаты расчетов с учетом механизма рассеяния на неполярных акустических фононах. Как следует из рисунка, влияние рассеяния на неполярных акустических фононах в диапазоне полей $10^4 < E < 2 \cdot 10^6$ В/см незначительно. Этого следовало ожидать, так как частота рассеяния на неполярных акустических фононах сравнивается по величине с частотой рассеяния на продольных оптических фононах при $\epsilon \approx 3,5$ эВ [3], а средняя энергия электронов в поле $E = 2 \cdot 10^6$ В/см $\epsilon \approx 1$ эВ, что много меньше 3,5 эВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Thornber K. K., Feynman R. P. Velocity acquired by an electron in a finite electric field in a polar crystal // *Phys. Rev. B.*—1970.— V. 1, N 10.— P. 4099.
2. Fitting H.-J., Friemann J.-U. Monte-Carlo studies of the electron mobility in SiO₂ // *Phys. Stat. Sol. (a).*—1982.— V. 69, N 1.— P. 349.
3. Fischetti M. V., DiMaria D. J., Brorson S. D. e. a. Theory of high-field electron transport in silicon dioxide // *Phys. Rev. B.*—1985.— V. 31, N 12.— P. 8124.
4. Травков И. В., Гадияк Г. В., Сеница С. П. Математическое моделирование переноса заряда в диэлектриках в сильных электрических полях методом Монте-Карло.— Новосибирск, 1987.— (Препринт/АН СССР, Сиб. отд-ние, ИТПМ; 1).
5. Theis T. N., Kirtley J. R., DiMaria D. J. e. a. Light emission from electroninjector structures // *Phys. Rev. Lett.*—1983.— V. 50, N 10.— P. 750.
6. Theis T. N., DiMaria D. J., Kirtley J. R. e. a. Strong electric field heating of conduction band electrons in SiO₂ // *Phys. Rev. Lett.*—1984.— V. 52, N 16.— P. 1445.
7. DiMaria D. J., Theis T. N., Kirtley J. R. e. a. Electron heating in silicon dioxide and off-stoichiometric silicon dioxide films // *J. Appl. Phys.*—1985.— V. 57, N 4.— P. 1214.
8. Есаев Д. Г., Сеница С. П. Эмиссия горячих электронов через заряженную поверхность диэлектрика в вакуум // *Письма в ЖТФ.*—1986.— Т. 12, № 17.
9. Левинсон И. Б. Времена релаксации, функции разогрева и эффект убегающих горячих электронов в полупроводниках // *ФТТ.*—1964.— Т. 6, вып. 7.
10. Марчук Г. И. Методы расчета ядерных реакторов.— М.: Госатомиздат, 1960.
11. Кольчужкин А. М., Учайкин В. В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество.— М.: Атомиздат, 1978.
12. Зеерер К. Физика полупроводников.— М.: Мир, 1977.
13. Lynch W. T. Calculation of electric field breakdown in quartz as determined by dielectric dispersion analysis // *J. Appl. Phys.*—1972.— V. 43, N 8.— P. 3274.

Поступила в редакцию 12 июня 1987 г.