فصلنامه‌ی علمی و پژوهشی شریف
تابستان ۱۳۸۶، شماره‌ی سی و هشتم، ص. ۱۰۹-۱۱۳، (یادداشت فنّی)

کاربرد روش مونته‌کارلوی تصحیح شده کوانتومی برای یک دیود تونلی تشدیدی (RTD)

مهدی پورفتح (کارشناس ارشد)
رحیم فائز (دانشیار)
دانشکده‌ی مهندسی برق، دانشگاه صنعتی شریف

معادله‌ی انتقال بولتزمن[۱] (BTE)معادله‌ی پایه‌یی است که برای شبیه‌سازی ادوات نیمه‌هادی به‌کار می‌رود. BTEمعادله‌یی نیمه کلاسیک است که برخی اثرات کوانتمی از جمله تونل زدن را در نظر نمی‌گیرد. می‌توان با استفاده از معادله‌ی انتقال ویگنر، ضمن تصحیح معادله‌ی BTE، اثرات کوانتمی را لحاظ کرد. از روش مونته‌کارلو به‌منظور حل BTE تصحیح شده‌ی کوانتمی برای RTD[۲] استفاده شده است. مطابق انتظار، یک منحنی جریان ـ ولتاژ با شیب منفی به دست می‌آید. در این نوشتار نحوه‌ی عملکرد پتانسیل مؤثر در نتیجه دادن شیب منفی مورد بحث واقع شده است. به این منظور، منحنی جریان ـ ولتاژ به سه ناحیه تقسیم شده و در هر ناحیه تغییرات پتانسیل الکترواستاتیک، پتانسیل مؤثر و چگالی حامل مورد بررسی قرار گرفته است.

مقدمه

فنّاوری ساخت ادوات نیمه‌هادی پیشرفت زیادی کرده است و می‌توان ادواتی با ابعاد نانومتر قابل مقایسه با طول موج دبی[۳] ساخت. در این ادوات اثرات کوانتمی غالب است و معادله‌ی انتقال بولتزمن (BTE) دیگر معتبر نیست. روش‌های مختلفی از جمله تابع توزیع ویگنر[۴](WDF)، تابع گرین و انتگرال مسیر[۵] برای منظور کردن این اثرات پیشنهاد شده است.[۱-۵] برای مثال با استفاده از تابع توزیع ویگنر، شیب منفی در منحنی جریان ـ ولتاژ RTD به خوبی نشان داده شده است.[۶] اگرچه استفاده از این روش برای شبیه‌سازی دوبعدی نیازمند حافظه و زمان محاسبات رایانه‌یی زیاد است. روش دیگر مدلی است که در آن اثرات کوانتمی بصورت تصحیح پتانسیل معادله‌ی کلاسیک انتقال بولتزمن وارد می‌شود.[۷-۹] در حقیقت بوهم[۶] اولین کسی بود که نشان داد با تغییر پتانسیل می‌توان اثرات کوانتمی را در معادلات منظور کرد.[۱۰-۱۱]

در بخش بعدی معادله‌ی انتقال ویگنر بسط داده شده و با در نظر گرفتن جمله اول پتانسیل کوانتمی به‌دست آمده است. اثرات کوانتمی را می‌توان به‌وسیله‌ی معادله BTE همراه با پتانسیل تصحیح شده کوانتمی نشان داد. در اینجا از روش مونته‌کارلو به‌منظور حل معادله برای RTD استفاده شده است.

روش مونته‌کارلوی تصحیح شده‌ی کوانتمی

تابع توزیع ویگنر که مبتنی بر تابع توزیع کوانتمی است بر حسب مختصات مکان و زمان چنین تعریف می‌شود.[۵]

$$f(x,p)=\frac{1}{(\pi\hbar)^3}\int \exp\left(\frac{2ip.y}{\hbar}\right)\rho(x+y,x-y)d^3y \qquad (1)$$

که در آن ρ ماتریس چگالی است. معادله‌ی انتقال برای تابع توزیع ویگنر عبارت است از:[۵]

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m^*}\nabla_x f=\frac{-1}{i\hbar}\frac{1}{(\pi\hbar)^3}\int d^3\mathbf{p}_1 f(\mathbf{x},\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)$$
$$\int d^3y\exp\left(\frac{2i}{\hbar}\mathbf{p}_1.\mathbf{y}\right)[U(\mathbf{x}+\mathbf{y})-U(\mathbf{x}-\mathbf{y})] \qquad (2)$$

با در نظر گرفتن برخورد در معادله‌ی انتقال برای تابع توزیع ویگنر معادله‌یی شبیه BTE به‌دست می‌آید.[۱۲]

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\mathbf{V}.\nabla_r f-\frac{1}{\hbar}\nabla_r U.\nabla_k f+$$
$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{2n+1}}{\hbar^{2n}(2n+1)!}(\nabla_r.\nabla_k)^{2n+1}Uf=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c \qquad (3)$$

که در آن U انرژی پتانسیل است. خاصیت اصلی معادله‌ی ویگنر در وجود اثرات کوانتمی در پتانسیل غیرمحلی است (پتانسیل یک نقطه وابسته به پتانسیل نقاط دیگر است) که در جمله‌ی چهارم معادله‌ی ۳ نهفته است. اگر تغییرات پتانسیل برحسب مکان به‌آرامی صورت گیرد، جمله‌ی غیرمحلی حذف شده‌ی معادله‌ی ۳ به معادله‌ی BTE تبدیل

Archive of SID

www.SID.ir

می‌شود. تقریب اول این است که در معادله‌ی ۳ فقط جمله n=۱ در نظر گرفته شود. اثر این جمله در تصحیح کوانتمی مهم است. اگر از تابع توزیع جابه‌جا شده‌ی[۷] ماکسول-بولتزمن در جمله‌ی تصحیح کوانتمی استفاده شود معادله‌ی تصحیح شده کوانتمی BTE با تقریب اول عبارت خواهد بود از:[۱۳و۱۴]

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\mathbf{v}.\nabla_r f+\frac{1}{\hbar}(-\nabla_r(U+U^Q)).\nabla_k f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Coll} \quad (۴)$$

که در آن U^Q انرژی پتانسیل کوانتمی است که تصحیح کوانتمی را در معادله اعمال می‌کند و عبارت است از:

$$U^Q=-\frac{\hbar^2}{12m^*}\nabla_r^2 ln(n) \quad (۵)$$

برمبنای معادله‌ی ۴، سرعت و نیروی وارد بر ذرات هنگام حرکت آزاد[۸] به‌ترتیب عبارت است از:[۱۵]

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt}=\mathbf{v} \quad (۶)$$

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt}=\frac{1}{\hbar}(-\nabla)_r(U+U^Q)) \quad (۷)$$

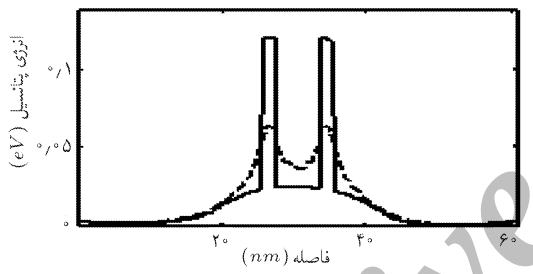
معادله‌ی سرعت همان معادله‌ی استفاده شده در روش مونته‌کارلوی استاندارد است ولی معادله‌ی نیرو تغییر یافته است. در معادله‌ی نیرو، حرکت ذره بر اثر انرژی پتانسیل کلاسیک U و انرژی پتانسیل کوانتمی U^Q صورت می‌گیرد. «انرژی پتانسیل مؤثر» جمع این دو انرژی پتانسیل است. مزیت این روش این است که اثرات کوانتمی مثل اثر تونل‌زدن به‌طور اتوماتیک در محاسبات منظور می‌شود.

به‌منظور حل معادله‌ی ۴، یک مقدار اولیه برای چگالی حامل‌ها فرض شده و با استفاده از اعداد تصادفی، برای گشتاور آنها مقدار اولیه‌یی فرض می‌شود. با حل معادله‌ی پواسن انرژی پتانسیل کلاسیک، و با استفاده از معادله‌ی ۵ انرژی پتانسیل کوانتمی محاسبه می‌شود. سپس با استفاده از روش مونته‌کارلو مکان و انرژی تک‌تک الکترون‌ها بعد از فاصله‌ی زمانی δt محاسبه می‌شود. برای به دست آوردن مکان وگشتاور الکترون، در فاصله‌ی بین دو برخورد، از معادلات ۶ و ۷ استفاده می‌شود. به این ترتیب می‌توان ضمن به دست آوردن توزیع جدید الکترون‌ها، انرژی‌های پتانسیل کلاسیک و مؤثر جدید را محاسبه کرد. این روش در فاصله‌های زمانی تکرار شده تا حالت خودسازگار به‌دست می‌آید.

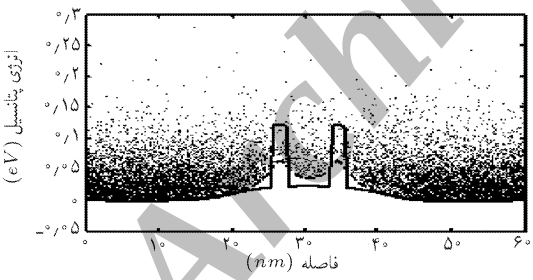
نتایج شبیه‌سازی برای دیود تونلی تشدیدی (RTD)

از روش مونته‌کارلوی تصحیح شده‌ی کوانتمی برای شبیه‌سازی RTD استفاده شده است. ساختار دیود شامل دو سد ساخته شده از GaAs و $Al_xGa_{1-x}As$ ($x=0.08$) است. ارتفاع و عرض سد به‌ترتیب $100meV$ و $2/5nm$ است. عرض منبع(source)، درین (زیرآب) و چاه کوانتمی بترتیب $20nm$، $20nm$ و$5/5nm$ است. قطعه‌ی دارای فاصله‌انداز[۹] با عرض $5nm$ بین سد و اتصال‌های منبع و زیرآب است. معادلات حرکت الکترون در دره Γ و دمای اتاق ($300^\circ K$)شبیه‌سازی شده است. چگالی ناخالصی در الکترودهای GaAs معادل $10^{18}cm^{-3}$ فرض شده است. فرایندهای برخورد نوری طولی[۱۰]، فوتون آکوستیک و ناخالصی یونیزه شده در محاسبات منظور شده است.

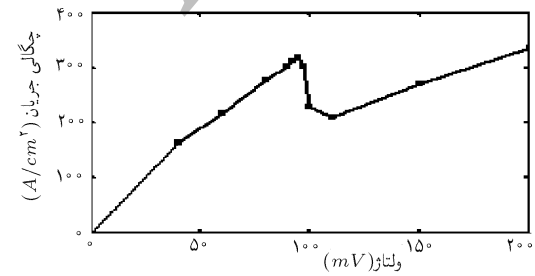
شکل ۱ انرژی پتانسیل‌های کلاسیک و مؤثر (جمع انرژی‌های پتانسیل کلاسیک و کوانتمی) برای دیود تونلی تشدید در پتانسیل اعمالی صفر ولت را نشان می‌دهد. همان‌طورکه دیده می‌شود انرژی پتانسیل مؤثر در محل سد کم‌تر از انرژی پتانسیل کلاسیک است و همین نکته باعث می‌شود الکترون‌ها از سد عبورکنند. در شکل ۲ که توزیع انرژی الکترون‌ها را به نمایش می‌گذارد، می‌توان این پدیده را واضح‌تر مشاهده کرد. شکل



شکل ۱. پتانسیل‌های کلاسیک و مؤثر برای RTD در ولتاژ اعمال صفر.



شکل ۲. توزیع انرژی الکترون‌ها برای RTD در ولتاژ اعمالی صفر.



شکل ۳. منحنی جریان-ولتاژ به‌دست آمده از روش مونته‌کارلوی تصحیح‌شده‌ی کوانتومی.

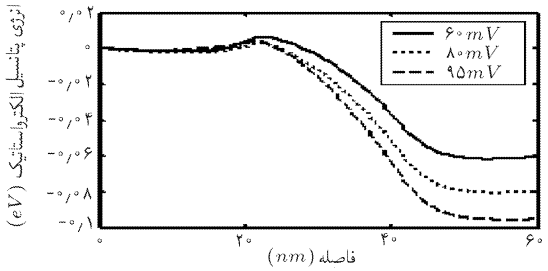
Archive of SID
www.SID.ir

۳ نشان می‌دهد که منحنی جریان ـ ولتاژ شبیه‌سازی شده در mV ۹۵ بیشینه شده و نسبت جریان‌های بیشینه به دره مساوی ۱/۳ است.

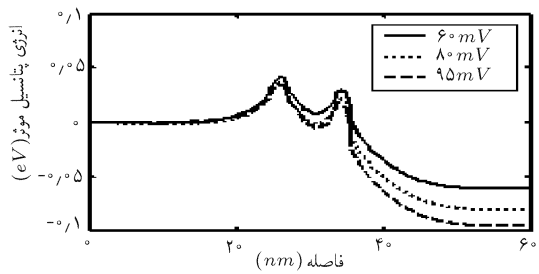
به‌منظور بررسی بهتر رفتار منحنی جریان ـ ولتاژ، این منحنی به سه ناحیه تقسیم شده است. ناحیه‌ی اول بین $۹۵mV$ — ۰ قرار دارد که در آن با زیاد شدن ولتاژ جریان زیاد می‌شود. ناحیه‌ی دوم بین $۱۱۰mV$ — ۹۵ قرار دارد که در آن با زیاد شدن ولتاژ جریان کم می‌شود. و بالاخره ناحیه‌ی سوم بالای $۱۱۰mV$ قرار دارد که با زیاد شدن ولتاژ جریان زیاد می‌شود. در هر ناحیه اثر انرژی پتانسیل الکترواستاتیک و چگالی حامل بر انرژی پتانسیل مؤثر و جریان بررسی می‌شود.

شکل ۴ انرژی پتانسیل الکترواستاتیک را در ولتاژهای اعمالی $۶۰mV$، $۸۰mV$ و $۹۵mV$ نشان می‌دهد. وقتی ولتاژ اعمالی زیاد می‌شود انرژی پتانسیل الکترواستاتیک نزدیک سد (در محل‌های $۲۵nm$ و $۳۳nm$) کم می‌شود. بنابراین، انرژی پتانسیل مؤثر سدها کم شده و در نتیجه جریان زیاد می‌شود (شکل ۵). به‌طور خلاصه، در ناحیه‌ی اول هرچه ولتاژ اعمالی زیاد می‌شود جریان هم زیاد می‌شود.

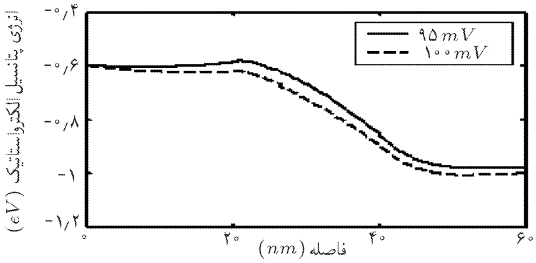
شکل ۶ انرژی پتانسیل الکترواستاتیک را در ولتاژهای اعمالی $۹۵mv$ و $۱۰۰mv$ نشان می‌دهد. وقتی ولتاژ اعمالی زیاد می‌شود انرژی پتانسیل الکترواستاتیک نزدیک سد دوم به‌طور قابل ملاحظه‌یی کم می‌شود. این امر باعث کاهش انرژی پتانسیل مؤثر نزدیک این سد (شکل ۷) و در نتیجه کم شدن چگالی حامل داخل چاه می‌شود (شکل ۸). با توجه به معادله ۵، تغییر چگالی حامل باعث تغییر در انرژی پتانسیل کوانتمی و در نتیجه انرژی پتانسیل مؤثر می‌شود. در شکل ۹ چگالی حامل و همچنین انرژی پتانسیل کوانتمی (انرژی پتانسیل مؤثر



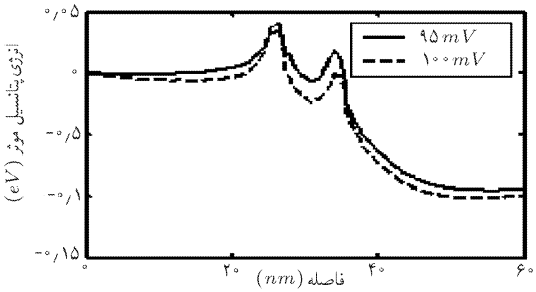
شکل ۴. پتانسیل الکترواستاتیک در سه ولتاژ اعمالی در ناحیه‌ی اول.



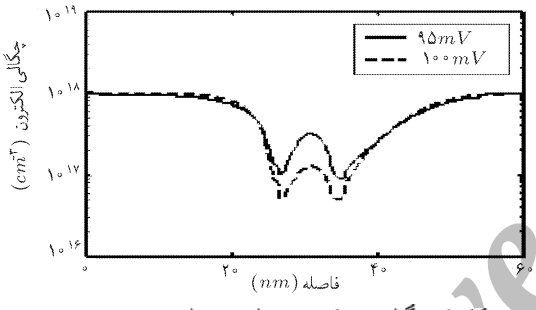
شکل ۵. پتانسیل مؤثر در سه ولتاژ اعمالی در ناحیه‌ی اول.



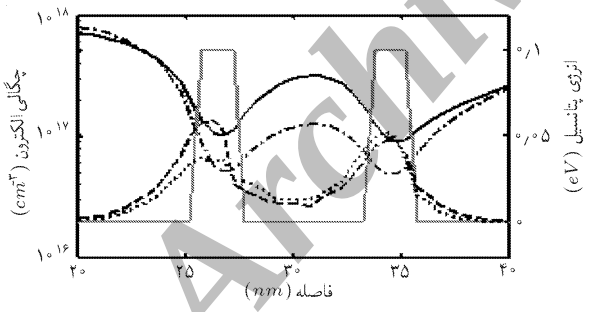
شکل ۶. پتانسیل الکترواستاتیک در دو ولتاژ اعمالی در ناحیه‌ی دوم.



شکل ۷. پتانسیل مؤثر در دو ولتاژ اعمالی در ناحیه‌ی دوم.



شکل ۸. چگالی حامل در دو ولتاژ اعمالی در ناحیه‌ی دوم.

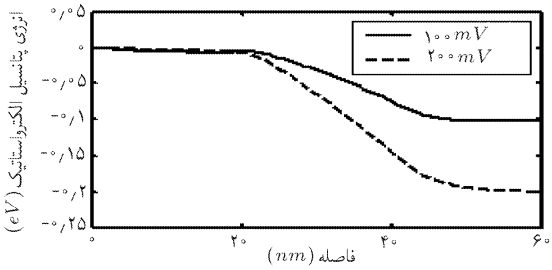


شکل ۹. چگالی حامل در ولتاژهای اعمال ۹۵mV (خطایر) و ۱۰۰mV (خط نقطه)، همچنین پتانسیل کوانتمی (مؤثر بدون الکترواستاتیک) در ولتاژهای اعمالی ۹۵mV (نقطه)، ۱۰۰mV (خط چین)؛ و سد پتانسیل (خط پرخاکستری).

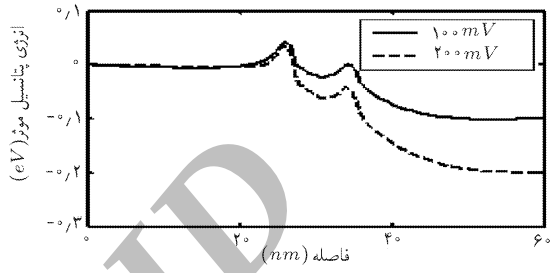
بدون انرژی پتانسیل الکترواستاتیک) با هم نشان داده شده‌اند. همان‌طور که دیده می‌شود کم شدن چگالی حامل داخل چاه باعث افزایش انرژی پتانسیل کوانتمی نزدیک سد اول می‌شود. درنتیجه، زیاد شدن انرژی پتانسیل مؤثر باعث کاهش جریان می‌شود (شکل ۷). به‌طور خلاصه

Archive of SID

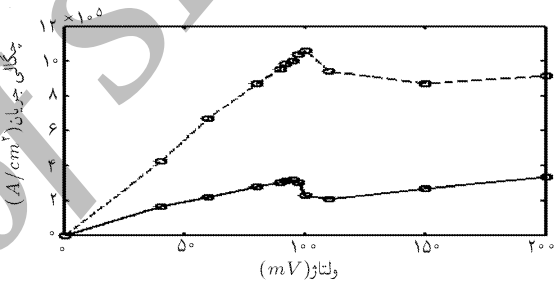
www.SID.ir



شکل ۱۰. پتانسیل الکترواستاتیک در دو ولتاژ اعمالی در ناحیه‌ی سوم.



شکل ۱۱. پتانسیل مؤثر در دو ولتاژ اعمالی در ناحیه‌ی سوم.



شکل ۱۲. منحنی جریان ولتاژ مربوط به روش مونته‌کارلوی تصحیح شده کوانتمی (خط پر) و فرمول اِساکی (خط چین).

در ناحیه دوم با زیاد شدن ولتاژ اعمالی جریان کاهش می‌یابد.

شکل ۱۰ نشانگر انرژی پتانسیل الکترواستاتیک در ولتاژهای اعمالی $۱۱۰mV$ و $۲۰۰mV$ است. به‌علت کم شدن انرژی پتانسیل الکترواستاتیک نزدیک سد دوم، انرژی پتانسیل مؤثر آنقدر کم می‌شود که اثر کمی روی چگالی حامل داشته باشد. همان‌طور که در شکل ۱۱ مشاهده می‌شود سد اول اثر مهمی در تغییر جریان دارد. بنابراین انتظار می‌رود که منحنی جریان ـ ولتاژ در این ناحیه شبیه یک سد تکی عمل کند که در اثر افزایش ولتاژ اعمالی جریان هم زیاد شود.

در شکل ۱۲ منحنی‌های جریان ـ ولتاژ به‌دست آمده از روش مونته‌کارلوی تصحیح شده کوانتمی و فرمول اِساکی[11] با هم مقایسه شده‌اند. لازم است یادآور شویم که در فرمول اساکی برای محاسبه‌ی احتمال عبور از معادله‌ی موج شرودینگر استفاده شده و اثر برخوردها در این فرمول منظور نشده است. برای این محاسبه از انرژی پتانسیل الکترواستاتیک به دست آمده از روش مونته کارلوی تصحیح شده‌ی کوانتمی استفاده شده است. ملاحظه می‌شود که روش تصحیح شده کوانتمی جریان کم‌تری دارد، و علت آن این است که در معادله موج شرودینگر برخورد در نظر گرفته نشده است. معقول به نظر می‌رسد که انتظار داشته باشیم در دمای کم‌تر، که برخورد کاهش قابل ملاحظه‌یی دارد، نتیجه‌ی این دو روش نزدیک به هم باشد.

نتیجه‌گیری

با لحاظ‌کردن پتانسیل مؤثر در فرمول انتقال بولتزمن اثرات کوانتمی، به‌خصوص تونل زدن، تأثیر داده شده است. در این مدل فرمول حرکت ذرات شبیه روش نیمه‌کلاسیک مونته کارلو است با این تفاوت که در پتانسیل تصحیح کوانتمی اعمال شده است. این مدل برای شبیه‌سازی دیود تونلی تشدیدی استفاده شده که در آن تونل زدن تشدیدی وجود دارد. در منحنی جریان ـ ولتاژ در $۳۰۰^{\circ}K$ ناحیه با شیب منفی دیده شد و نحوه‌ی عملکرد پتانسیل مؤثر در به‌وجود آمدن شیب منفی تشریح شد. نشان داده شد که در ناحیه‌ی با شیب منفی ارتفاع سد دوم براثر افزایش ولتاژ اعمالی کم می‌شود. این نکته باعث می‌شود که چگالی الکترون در داخل چاه کم شود. همین تغییر چگالی الکترون باعث تغییر در انرژی پتانسیل کوانتمی سد اول می‌شود، و در نتیجه ارتفاع سد پتانسیل اول زیاد شده و جریان کم می‌شود.

با مقایسه نتایج حاصل از روش مونته‌کارلوی تصحیح شده کوانتمی با نتیجه‌ی فرمول اساکی دیده شد که ولتاژ تشدید تقریباً برای هر دو شبیه به‌هم است ولی جریان در ولتاژهای اعمالی یکسان در روش اساکی بیشتر از حالت تصحیح شده‌ی کوانتمی است. اختلاف حاصله براثر در نظر نگرفتن برخورد در روش اساکی است و انتظار می‌رود که در دمای کم‌تر نتیجه‌ی دو روش به هم نزدیک شود.

پانوشت

1. boltzman transport equation
2. resonant tunneling diode
3. debye
4. wigner distribution function
5. path integral
6. bohm
7. displaced
8. free flight
9. spacer
10. longitudinal optical
11. esaki

منابع

1. Braga, N.; Mickevicius, R.; Gaska, R.; Hu, X.; Shur, M. S.; Asif Khan, M.; Simin, G.; and Yang,

Archive of SID
www.SID.ir

J., "Simulation of hot electron and quantum effects in AlGaN/GaN heterostructure field effect transistors", *Journal of Applied Physics,* **95**(11), p. 6409 (2004).

2. Bordone, P.; Bertoni, A.; Brunetti, R. and Jacoboni, C., "Monte Carlo simulation of quantum electron transport based on Wigner paths", *Mathematics and Computers in Simulation,* **62** pp. 307-314 (2003).
3. Chen, W.; Register, L. F.; Banerjee, S. K., "Two-dimensional quantum mechanical simulation of electron transport in nano-scaled Si-based MOSFETs", Physica E, 19, pp. 28-32 (2003).
4. Garcia, J.; Martın, F.; Oriols, X. and Sune, J., "Quantum Monte Carlo simulation of resonant tunneling diodes based on the Wigner distribution function formalism", *Applied Physics Letters,* **73**(24), p. 3539 (1998).
5. Ferry, D. K. and Jacoboni, C.: Editors, Quantum Transport in Semiconductors., Plenum Press, New York, (1992).
6. Zhao, P. ; Cui, H. L. ; Woolard, D. L., "Dynamical instabilities and I-V characteristics in resonant tunneling through double-barrier quantum well systems", *Physical Review B,* **63**, pp.075302-14 (2001).
7. Hontschel, J.; Stenzel, R.; Klix, W., "Simulation of quantum transport in monolithic ICs based on $In_{0.53}Ga_{0.47}As$-$In_{0.52}Al0.48As$ RTDs and HEMTs with a quantum hydrodynamic transport model", Electron Devices, IEEE Transactions on, **51**, Issue 5, pp. 684-692 (2004).
8. Akis, R. ; Shifren, L. ; Ferry, D. K. and Vasileska, D., "The Effective Potential and Its Use in Simulation", *phys.stat.sol.(b),* **226**(1), pp. 1-8 (2001).
9. Ragazzi, St.; Di Carlo, A.; Lugli, P. and Rossi, F., "Analysis of Quantum-Transport Phenomena in Mesoscopic Systems: A Monte Carlo Approach", *phys. stat. sol.(b),* **204**, p.339 (1997)
10. Bohm D.; "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of Hidden Variables, Part I", *Physical Review,* **85**, pp. 166-179 (1952).
11. Bohm D., "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of Hidden Variables,Part II", *Physical Review,* **85**, pp. 180-193 (1952).
12. Wigner E. P., "On the quantum correction for thermodynamic equilibrium", *Physical Review,* **40**, pp. 749-759 (1932).
13. Hosseini, S. E. and Faez, R., "Novel Quantum Hydrodynamic Equations for Semiconductor Devices", *Jpn. J. Appl. Phys.* **41**, pp. 1300-1304 (2002).
14. Shifren, L.; Akis, R.; Ferry, D.K., "Correspondence between quantum and classical motion: comparing Bohmian mechanics with a smoothed effective potential approach", *Physics Letters A,* **274**, pp. 75-83 (2000).
15. Tsuchiya, H. and Miyoshi, T., "Quantum Mechanical Correction of Potential in Boltzman Transport Equation for Quantum Transport Modeling", *Microelectronics Engineering*, **47**, p. 345 (1999).

Archive of SID

www.SID.ir