

## کاربرد روش مونته‌کارلو 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<sup>۱</sup> (BTE) معادله‌ی پایه‌ی است که برای شبیه‌سازی ادوات نیمه‌هادی به‌کار می‌رود. BTE معادله‌ی نیمه کلاسیک است که برخی اثرات کوانتومی از جمله تونل زدن را در نظر نمی‌گیرد. می‌توان با استفاده از معادله‌ی انتقال ویگنر، ضمن تصحیح معادله‌ی BTE، اثرات کوانتومی را لحاظ کرد. از روش مونته‌کارلو به‌منظور حل BTE تصحیح شده‌ی کوانتومی برای RTD<sup>۲</sup> استفاده شده است. مطابق انتظار، یک منحنی جریان - 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 - ولتاژ به سه ناحیه تقسیم شده و در هر ناحیه تغییرات پتانسیل الکترواستاتیک، پتانسیل مؤثر و چگالی حامل مورد بررسی قرار گرفته است.

### مقدمه

فناوری ساخت ادوات نیمه‌هادی پیشرفت زیادی کرده است و می‌توان ادواتی با ابعاد نانومتر قابل مقایسه با طول موج دبی<sup>۳</sup> ساخت. در این ادوات اثرات کوانتومی غالب است و معادله‌ی انتقال بولتزمن (BTE) دیگر معتبر نیست. روش‌های مختلفی از جمله تابع توزیع ویگنر<sup>۴</sup> (WDF)، تابع گرین و انتگرال مسیر<sup>۵</sup> برای منظور کردن این اثرات پیشنهاد شده است.<sup>[۵-۱]</sup> برای مثال با استفاده از تابع توزیع ویگنر، شیب منفی در منحنی جریان - ولتاژ RTD به خوبی نشان داده شده است.<sup>[۶]</sup> اگرچه استفاده از این روش برای شبیه‌سازی دوبعدی نیازمند حافظه و زمان محاسبات رایانه‌ی زیاد است. روش دیگر مدلی است که در آن اثرات کوانتومی بصورت تصحیح پتانسیل معادله‌ی کلاسیک انتقال بولتزمن وارد می‌شود.<sup>[۷-۹]</sup> در حقیقت بوهم<sup>۶</sup> اولین کسی بود که نشان داد با تغییر پتانسیل می‌توان اثرات کوانتومی را در معادلات منظور کرد.<sup>[۱۰-۱۱]</sup> در بخش بعدی معادله‌ی انتقال ویگنر بسط داده شده و با در نظر گرفتن جمله اول پتانسیل کوانتومی به دست آمده است. اثرات کوانتومی را می‌توان به‌وسیله‌ی معادله BTE همراه با پتانسیل تصحیح شده کوانتومی نشان داد. در اینجا از روش مونته‌کارلو به‌منظور حل معادله برای RTD استفاده شده است.

مکان و زمان چنین تعریف می‌شود.<sup>[۵]</sup>

$$f(x, p) = \frac{1}{(\pi \hbar)^3} \int \exp\left(\frac{y i p \cdot y}{\hbar}\right) \rho(x+y, x-y) d^3 y \quad (1)$$

که در آن  $\rho$  ماتریس چگالی است. معادله‌ی انتقال برای تابع توزیع ویگنر عبارت است از:<sup>[۵]</sup>

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m^*} \nabla_x f = \frac{-1}{i \hbar} \frac{1}{(\pi \hbar)^3} \int d^3 p' f(\mathbf{x}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') \int d^3 y \exp\left(\frac{y i \mathbf{p}' \cdot \mathbf{y}}{\hbar}\right) [U(\mathbf{x} + \mathbf{y}) - U(\mathbf{x} - \mathbf{y})] \quad (2)$$

با در نظر گرفتن برخورد در معادله‌ی انتقال برای تابع توزیع ویگنر معادله‌ی شبیه BTE به دست می‌آید:<sup>[۱۲]</sup>

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

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

### روش مونته‌کارلو تصحیح شده‌ی کوانتومی

تابع توزیع ویگنر که مبتنی بر تابع توزیع کوانتومی است بر حسب مختصات

می‌شود. تقریب اول این است که در معادله‌ی ۳ فقط جمله  $n=1$  در نظر گرفته شود. اثر این جمله در تصحیح کوانتومی مهم است. اگر از تابع توزیع جابه‌جا شده‌ی<sup>۷</sup> ماکسول-بولتزمن در جمله‌ی تصحیح کوانتومی استفاده شود معادله‌ی تصحیح شده کوانتومی BTE با تقریب اول عبارت خواهد بود از: [۱۳ و ۱۴]

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

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f + \frac{\hbar}{m} (-\nabla_r(U + U^Q)) \cdot \nabla_k f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{Coll} \quad (4)$$

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

$$U^Q = -\frac{\hbar^2}{12m^*} \nabla_r^2 \ln(n) \quad (5)$$

بر مبنای معادله‌ی ۴، سرعت و نیروی وارد بر ذرات هنگام حرکت آزاد<sup>۸</sup> به ترتیب عبارت است از: [۱۵]

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \quad (6)$$

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{\hbar}{m} (-\nabla_r)(U + U^Q) \quad (7)$$

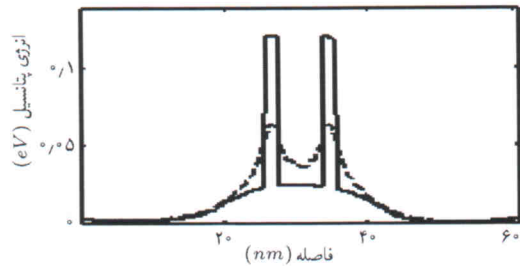
معادله‌ی سرعت همان معادله‌ی استفاده شده در روش مونتیکارلوی استاندارد است ولی معادله‌ی نیرو تغییر یافته است. در معادله‌ی نیرو، حرکت ذره بر اثر انرژی پتانسیل کلاسیک  $U$  و انرژی پتانسیل کوانتومی  $U^Q$  صورت می‌گیرد. «انرژی پتانسیل مؤثر» جمع این دو انرژی پتانسیل است. مزیت این روش این است که اثرات کوانتومی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

به منظور حل معادله‌ی ۴، یک مقدار اولیه برای چگالی حامل‌ها فرض شده و با استفاده از اعداد تصادفی، برای گشتاور آنها مقدار اولیه‌ی فرض می‌شود. با حل معادله‌ی پواسن انرژی پتانسیل کلاسیک، و با استفاده از معادله‌ی ۵ انرژی پتانسیل کوانتومی محاسبه می‌شود. سپس با استفاده از روش مونتیکارلو مکان و انرژی تک‌تک الکترون‌ها بعد از فاصله‌ی زمانی  $\delta t$  محاسبه می‌شود. برای به دست آوردن مکان و گشتاور 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 به دست می‌آید.

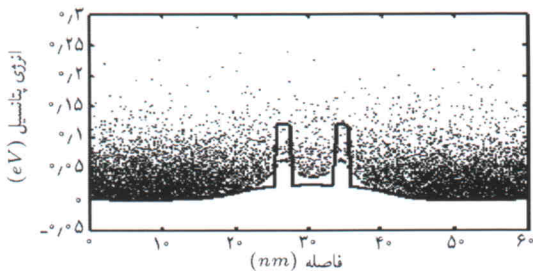
### نتایج شبیه‌سازی برای دیود تونلی تشدید (RTD)

از روش مونتیکارلوی تصحیح شده کوانتومی برای شبیه‌سازی RTD استفاده شده است. ساختار دیود شامل دو سد ساخته شده از

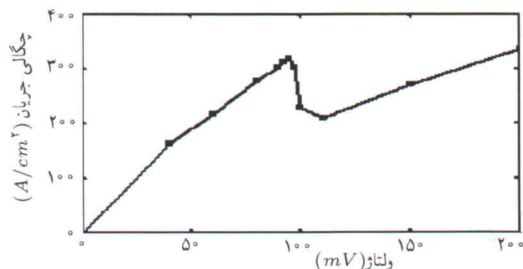
Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As و GaAs (x=0.18) است. ارتفاع و عرض سد به ترتیب ۱۰۰ meV و ۲/۵ nm است. عرض منبع (source)، درین (زیرآب) و چاه کوانتومی به ترتیب ۲۰ nm، ۲۰ nm و ۵/۵ nm است. قطعه‌ی دارای فاصله‌انداز<sup>۹</sup> با عرض ۵ nm بین سد و اتصال‌های منبع و زیرآب است. معادلات حرکت الکترون در دره  $\Gamma$  و دمای اتاق (۳۰۰ K) شبیه‌سازی شده است. چگالی ناخالصی در الکترودهای GaAs معادل  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  فرض شده است. فرایندهای برخورد نوری طولی<sup>۱۰</sup>، فوتون آکوستیک و ناخالصی یونیزه شده در محاسبات منظور شده است.



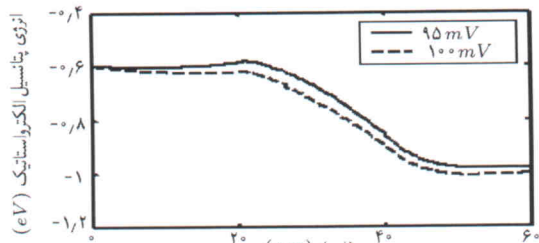
شکل ۱. پتانسیل‌های کلاسیک و مؤثر برای RTD در ولتاژ اعمالی صفر.



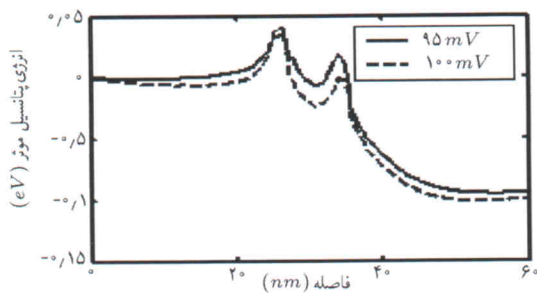
شکل ۲. توزیع انرژی الکترون‌ها برای RTD در ولتاژ اعمالی صفر.



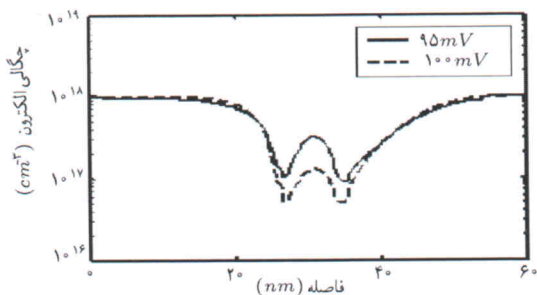
شکل ۳. منحنی جریان-ولتاژ به دست آمده از روش مونتیکارلوی تصحیح شده کوانتومی.



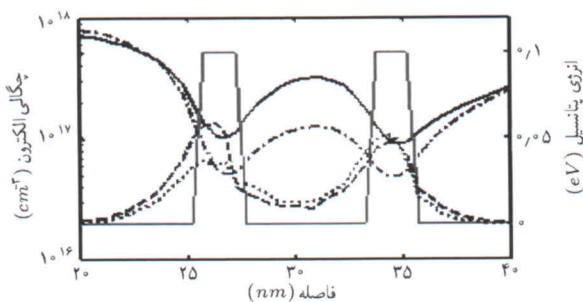
شکل ۶. پتانسیل الکترواستاتیک در دو ولتاژ اعمالی در ناحیه دوم.



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



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



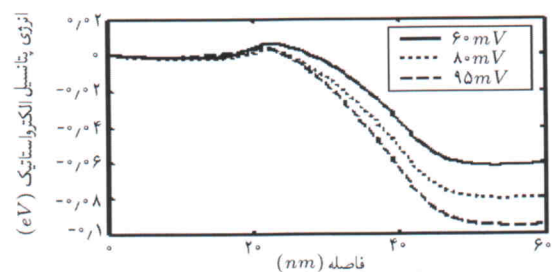
شکل ۹. چگالی حامل در ولتاژهای اعمالی ۹۵mV (خطایر) و ۱۰۰mV (خط نقطه)، همچنین پتانسیل کوانتومی (مؤثر بدون الکترواستاتیک) در ولتاژهای اعمالی ۹۵mV (نقطه)، ۱۰۰mV (خط چین)؛ و سد پتانسیل (خط پرخاکستری).

بدون انرژی پتانسیل الکترواستاتیک) با هم نشان داده شده‌اند. همان طور که دیده می‌شود کم شدن چگالی حامل داخل چاه باعث افزایش انرژی پتانسیل کوانتومی نزدیک سد اول می‌شود. در نتیجه، زیاد شدن انرژی پتانسیل مؤثر باعث کاهش جریان می‌شود (شکل ۷). به طور خلاصه

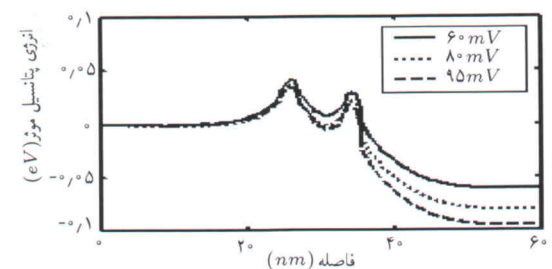
۳ نشان می‌دهد که منحنی جریان - ولتاژ شبیه‌سازی شده در  $mV$  در  $95$  بیشینه شده و نسبت جریان‌های بیشینه به دره مساوی  $1/3$  است. به منظور بررسی بهتر رفتار منحنی جریان - ولتاژ، این منحنی به سه ناحیه تقسیم شده است. ناحیه اول بین  $95mV - 0$  قرار دارد که در آن با زیاد شدن ولتاژ جریان زیاد می‌شود. ناحیه دوم بین  $95 - 110mV$  قرار دارد که در آن با زیاد شدن ولتاژ جریان کم می‌شود. و بالاخره ناحیه سوم بالای  $110mV$  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  $60mV$ ،  $80mV$  و  $95mV$  نشان می‌دهد. وقتی ولتاژ اعمالی زیاد می‌شود انرژی پتانسیل الکترواستاتیک نزدیک سد (در محل‌های  $25nm$  و  $33nm$ ) کم می‌شود. بنابراین، انرژی پتانسیل مؤثر سدها کم شده و در نتیجه جریان زیاد می‌شود (شکل ۵). به طور خلاصه، در ناحیه اول هرچه ولتاژ اعمالی زیاد می‌شود جریان هم زیاد می‌شود.

شکل ۶ انرژی پتانسیل الکترواستاتیک را در ولتاژهای اعمالی  $95mV$  و  $100mV$  نشان می‌دهد. وقتی ولتاژ اعمالی زیاد می‌شود انرژی پتانسیل الکترواستاتیک نزدیک سد دوم به طور قابل ملاحظه‌ای 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 کوانتومی و در نتیجه انرژی پتانسیل مؤثر می‌شود. در شکل ۹ چگالی حامل و همچنین انرژی پتانسیل کوانتومی (انرژی پتانسیل مؤثر



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



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



در شکل ۱۲ منحنی‌های جریان - ولتاژ به دست آمده از روش مونتیکارلوی تصحیح شده کوانتمی و فرمول اساکي<sup>۱۱</sup> با هم مقایسه شده‌اند. لازم است یادآور شویم که در فرمول اساکي 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 مونتیکارلوی تصحیح شده 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 ملاحظه‌ی دارد، نتیجه‌ی این دو روش نزدیک به هم باشد.

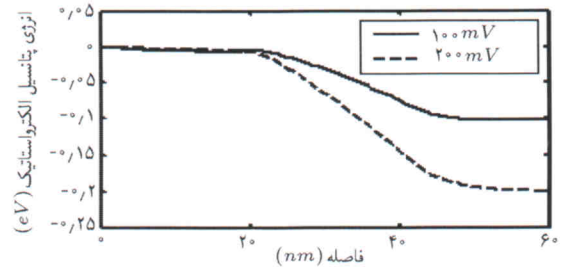
### نتیجه‌گیری

با لحاظ کردن پتانسیل مؤثر در فرمول انتقال بولتزمن اثرات کوانتمی، به خصوص تونل زدن، تأثیر داده شده است. در این مدل فرمول حرکت ذرات شبیه روش نیمه‌کلاسیک مونتیکارلوی 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 - ولتاژ در  $300^{\circ}K$  ناحیه با شیب منفی دیده شد و نحوه‌ی عملکرد پتانسیل مؤثر در به وجود آمدن شیب منفی تشریح شد. نشان داده شد که در ناحیه‌ی با شیب منفی ارتفاع سد دوم بر اثر 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.

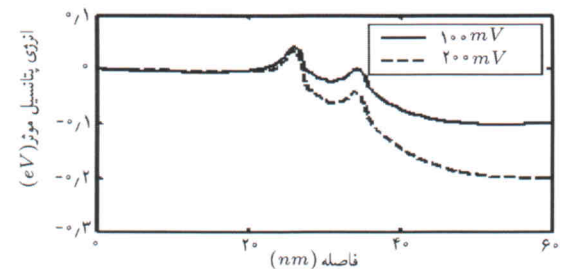
با مقایسه نتایج حاصل از روش مونتیکارلوی تصحیح شده کوانتمی با نتیجه‌ی فرمول اساکي دیده شد که ولتاژ تشدید تقریباً برای هر دو شبیه به هم است ولی جریان در ولتاژهای اعمالی یکسان در روش اساکي بیشتر از حالت تصحیح شده کوانتمی است. اختلاف حاصله بر اثر در نظر نگرفتن برخورد در روش اساکي است و انتظار می‌رود که در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

### پانویس

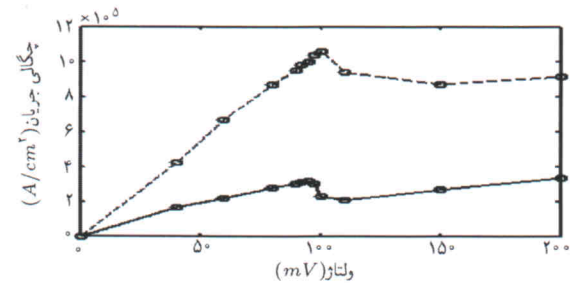
1. boltzman transport equation
2. resonant tunneling diode
3. debye
4. wigner distribution function
5. path integral
6. bohm
7. displaced



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 مونتیکارلوی تصحیح شده کوانتمی (خط پر) و فرمول اساکي (خط چین).

در ناحیه دوم با زیاد شدن ولتاژ اعمالی جریان کاهش می‌یابد. شکل ۱۰ نشانگر انرژی پتانسیل الکترواستاتیک در ولتاژهای اعمالی  $110 mV$  و  $200 mV$  است. به علت 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 - ولتاژ در این ناحیه شبیه یک سد تکی عمل کند که در اثر افزایش ولتاژ اعمالی جریان هم زیاد شود.

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,

- J., "Simulation of hot electron and quantum effects in AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> 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 MOS-FETs", *Physica E*, **19**, pp. 28-32 (2003).
4. Garcia, J.; Martin, 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<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As-In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As 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).

