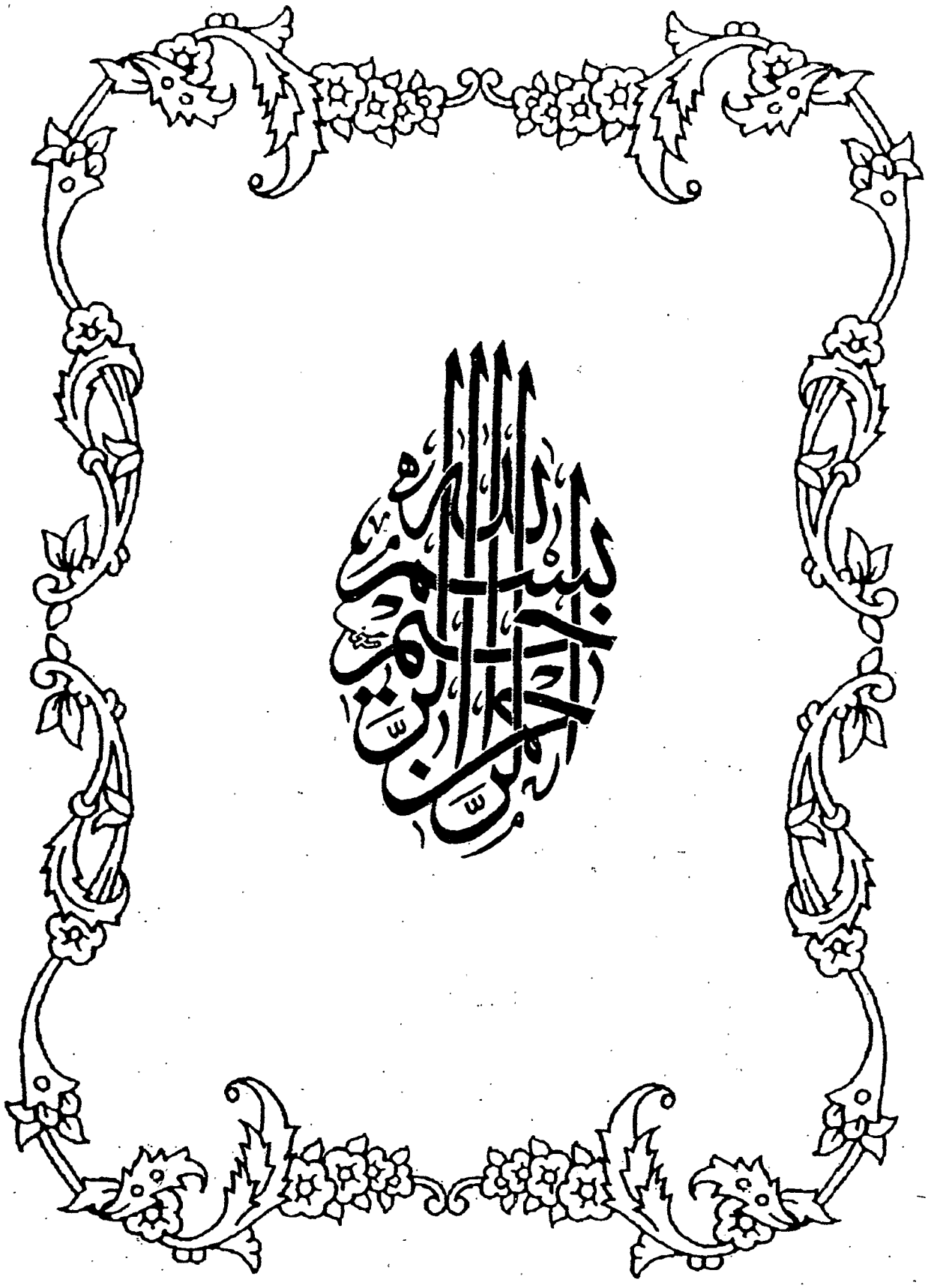


١١٣٦٢٨

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

(گرایش حالت جامد)

پایان نامه کارشناسی ارشد

شبیه سازی مونت کارلو برای انتقال حاملها در نیمه رساناهای کپه ای و نانوساختارها

از:

عادله مخلص گرامی

استاد راهنما:

دکتر حمید رحیم پور سلیمانی

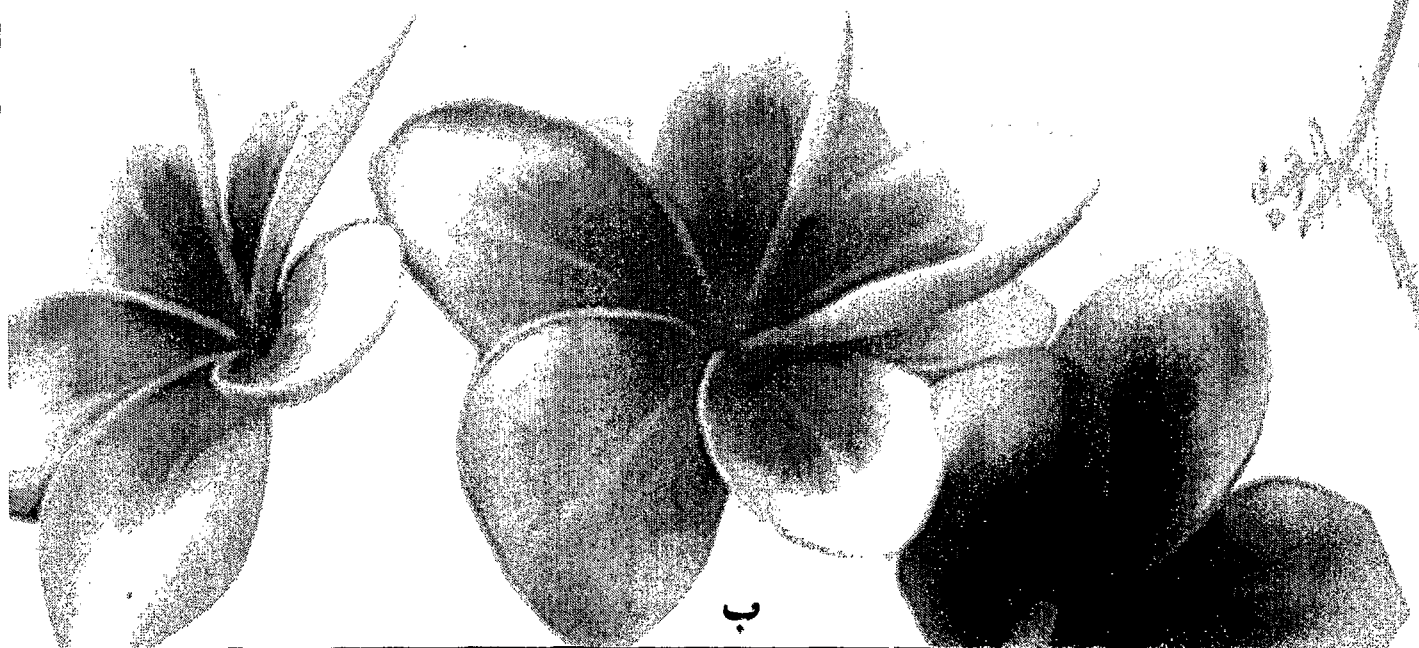
۱۳۸۸/۳/۳

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تهیه مدارک
دفتر تحصیلات تکمیلی
دانشگاه شاهرود

دی ۱۳۸۷

۱۱۳۶۲۸

تقدیم به
پدر و مادر عزیزم



تقدیر و تشکر

توفیق دادار بزرگ اگر نمی‌بود، این کار رنگ بودن نمی‌گرفت. او را به سبب این توفیق و همهٔ توفیق‌ها شکر می‌نهم. بدون ابراز سپاس از تمام کسانی که مرا یاری نمودند نیز نمی‌توان بر این سطور نقطهٔ پایان گذاشت. از پدر و مادر عزیزم به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان که در سردترین روزگاران بهترین پشتیبان است، سپاس بی‌کران دارم.

از استاد راهنمای گرامی، جناب آقای دکتر حمید رحیم پور سلیمانی، که همواره با راهنمایی‌های ارزشمندشان مشوقم بودند و همچنین با زحمات بی‌دریغشان در تمام مراحل تدوین این پایان نامه راهگشای اینجانب بوده‌اند، کمال تشکر و سپاسگزاری را دارم.مراتب قدردانی خود را از داوران محترم این پایان نامه، جناب آقای دکتر روضاتی و جناب آقای دکتر مشایخی و نمایندهٔ محترم تحصیلات تکمیلی، جناب آقای دکتر باطبی،اعلام می‌کنم.

و در پایان از خواهرهای عزیزم و تمام دوستانم که یاورم بودند، سپاسگزارم.

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فهرست جدول‌ها ..... ح

فهرست شکل‌ها ..... خ

چکیده فارسی ..... ژ

چکیده انگلیسی ..... س

مقدمه ۱

فصل اول: مفاهیم مقدماتی

۱—۱ مقدمه ۵

۱—۲ الکترون در یک کریستال و ساختار باند ۵

۱—۳ تقریب نیمه کلاسیک ۶

۱—۴ ساختار بلوری ۷

۱–۵ ساختار نوار انرژی ۹

۱–۶ محدوده الکترون در چاههای کوانتومی ۱۴

فصل دوم: مکانیزم های پراکندگی و نرخ زمان واهلش در سه بعد

۲–۱ مقدمه ۱۸

۲–۲ تئوری پراکندگی ۱۸

۲–۳ نرخ واهلش ۱۹

۲–۴ پراکندگی ناخالصی ۲۰

۲–۵ پراکندگی فونون ۲۴

۲–۶ پراکندگی فونون آکوستیکی ۲۵

۲–۷ پراکندگی فونون اپتیکی غیرقطبی ۲۹

۲–۸ پراکندگی فونون اپتیکی قطبی ۳۲

فصل سوم: شبیه سازی مونت کارلو در حالتهای سه بعدی

۳–۱ مقدمه ۳۹

۳–۲ موقعیت اولیه حاملها ۴۰

۳–۳ روش مونت کارلو تک ذره ۴۱

۳–۴ مدت فرار آزاد حاملها ۴۲

۳–۵ حرکت آزاد حاملها در میدان الکتریکی ۴۴

۳–۶ فرایندهای پراکندگی و انتخاب مکانیزم پراکندگی ۴۵

۳–۷ حالت نهایی الکترون بعد از پراکندگی ۴۶

۳–۸ محاسبه تابع توزیع حاملها در گالیوم آرسناید ۵۰

۳–۹ محاسبه سرعت و انرژی میانگین ۵۴

۳–۱۰ روش آنسامبلی مونت کارلو ۵۹

۳–۱۱ نتایج شبیه سازی مونت کارلو ۶۱

فصل چهارم: شبیه سازی مونت کارلو در شبه گاز الکترون دو بعدی

۴–۱ مقدمه ۶۷

۴–۲ دیود ایده آل ۶۷

۴–۳ پراکندگی در یک شبه گاز الکترون دو بعدی ۷۰

۴–۴ بررسی ترابرد حاملها در دیود ماس $Si - Sio_2$ ۷۲

فصل پنجم : بررسی ترابرد اسپین با استفاده از روش مونت کارلو

۵–۱ مقدمه ۸۱

۵–۲ ماتریس چگالی اسپین و شبیه سازی مونت کارلو ۸۱

۵–۳ نتایج شبیه سازی ۸۶

۵–۳ نتیجه گیری ۹۱

۴–۶ پیشنهاد برای ادامهٔ کار ۹۲

فهرست منابع ۹۳

پیوست ۹۸

فهرست جدول‌ها

عنوان صفحه

جدول ۱—۱: پارامترهای توصیف کننده باندهای رسانش و ظرفیت ۱۲

جدول ۳—۱: پارامترهای ماده GaAs ۵۰

جدول ۳—۲:پارامترهای ماده CdTe ۶۱

فهرست شکل‌ها

عنوان صفحه

شکل ۱—۱: (a) ساختار بلوری زینک—بلند. متشکل از دو ساختار fcc که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در یکدیگر فرو رفته اند (b) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری زینک —بلند. ۸

شکل ۱—۲: (a) ساختار بلوری ورتسایت. متشکل از دو ساختار hcp که به اندازه سه هشتم محور c در یکدیگر فرو رفته‌اند. (b) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری ورتسایت. ۹

شکل ۱—۳: ساختار باند انرژی GaAs ۱۰

شکل ۱—۴: ساختار باند انرژی CdTe ۱۱

شکل ۲—۱: (a)میزان پراکندگی ناخالصی یونیزه شده،(b)نرخ واهلش اندازه حرکت ناخاصی یونیزه شده نسبت به انرژی الکترون در دمای ۳۰۰ و ۷۷ کلوین ۲۳

شکل ۲—۲: (a) نرخ پراکندگی فونون آکوستیکی و (b) نرخ واهلش اندازه حرکت آن برای الکترونهایی در دره Γ در دمای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین ۲۸

شکل ۲—۳: (a) نرخ پراکندگی فونون اپتیکی غیر قطبی و(b) نرخ واهلش اندازه حرکت آن نسبت به انرژی الکترون برای الکترونهایی که در کادمیوم تلوراید بالکی در دمای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین ۳۲

شکل ۲—۴: نرخ پراکندگی فونون اپتیکی قطبی نسبت به انرژی الکترون برای الکترونهایی که در دره Γ در دمای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین ۳۵

شکل ۲—۵: نرخ واهلش اندازه حرکت فونون اپتیکی قطبی نسبت به انرژی الکترون برای الکترونهایی که در دره Γ در دمای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین ۳۶

شکل ۳—۱: فلوچارت محاسبات شبیه سازی مونت کارلوی تک ذره ۴۲

شکل ۳—۲: فلوچارت انتخاب یک مکانیزم پراکندگی ۴۶

شکل ۳—۳: نمایش دهنده مکان هایست که الکترون در فضای k از آنها عبور کرده است ۵۱

شکل ۳—۴: نمودار تابع توزیع حاملها برای فرایند همسانگرد در میدان الکتریکی $۵ \times ۱۰^۵(V/m)$ ۵۲

شکل ۳—۵: نمودار تابع توزیع حاملها برای فرایند ناهمسانگرد در میدان الکتریکی $۵ \times ۱۰^۵(V/m)$ ۵۲

شکل ۳—۶: نمودار تابع توزیع حاملها برای فرایند همسانگرد در میدان الکتریکی $۱۰ \times ۱۰^۵ V/m$ ۵۳

شکل ۳—۷: نمودار تابع توزیع حاملها برای فرایند ناهمسانگرد در میدان الکتریکی $۱۰ \times ۱۰^۵ V/m$ ۵۳

شکل ۳—۸: نمودار تغییرات سرعت میانگین الکترون با میدان الکتریکی برای CdTe کپه ای ۵۶

شکل ۳—۹: درصد اشغال دره ها انرژی برحسب میدان الکتریکی اعمالی برای دو نیمه رسانای $CdTe$ و $GaAs$. ۵۷

شکل ۳—۱۰: تغییرات انرژی میانگین الکترون نسبت به میدان الکتریکی برای CdTe کپه ای ۵۷

شکل ۳—۱۱: تغییرات سرعت میانگین الکترونی نسبت به میدان الکتریکی اعمالی در نیمه رسانای CdTe در حضور سه چگالی ناخالصی از مرتبه $۱۰^{۱۴}$ و $۱۰^{۱۷}$ و $۱۰^{۲۳}$ $(cm^{-۳})$ ۵۸

شکل ۳—۱۲: تغییرات انرژی میانگین الکترونی نسبت به میدان الکتریکی اعمالی در نیمه رسانای CdTe در حضور سه چگالی ناخالصی از مرتبه $۱۰^{۱۴}$ و $۱۰^{۱۷}$ و $۱۰^{۲۳}$ $cm^{-۳}$ ۵۹

شکل ۳—۱۳: فلوچارت شبیه سازی یک تک ذره در بازه زمانی t تا $t + \Delta t$ ۶۰

شکل ۳—۱۴: نمودار سرعت رانش انتقالی الکترونها نسبت به میدان الکتریکی اعمالی در بلور CdTe در دمای ۳۰۰ کلوین ۶۲

شکل ۳—۱۵: نمودار تحول زمانی سرعت رانش انتقالی الکترونها در بلور CdTe در دمای ۳۰۰ کلوین ۶۳

شکل ۳—۱۶: نمودار تحول زمانی سرعت رانشی انتقالی الکترونها را در سه دمای متفاوت ۷۷ و ۱۵۰ و ۳۰۰ کلوین برای دو میدان اعمالی $۲۰ KV/cm$ و $۷۰ KV/cm$ ۶۴

شکل ۳—۱۷: نمودار سرعت رانش الکترونها به صورت تابعی از مکان در نیمه رسانای GaAs وCdTe ۶۵

شکل ۴—۱: نمودار نوار انرژی دیود ماس ایده آل در $V = ۰$ ۶۷

شکل ۴—۲: نمودار نوار انرژی دیود ماس نیمه رسانای نوع—p و نیمه رسانای نوع—n ۶۹

شکل ۴—۳: ساختار باند سیلیکان ۷۲

شکل ۴—۴: فلوچارت محاسبه مونت کارلویی شبه گاز الکترون دوبعدی ۷۴

شکل ۴—۵: نمودار تحول زمانی سرعت رانش انتقالی شبه گاز الکترون دو بعدی در سطح لایه معکوس Si/Sio_2 در دمای ۳۰۰ کلوین ۷۷

شکل ۴—۶: نمودار تحول زمانی سرعت رانش انتقالی شبه گاز الکترون دو بعدی در سطح لایه معکوس Si/Sio_2 در دمای ۷۷ کلوین ۷۷

شکل ۴—۷: نمودار تحول زمانی سرعت رانش انتقالی الکترونها در سطح لایه معکوس Si/Sio_2 در دمای ۳۰۰ کلوین برای حالت 2DEG و 3DEG ۷۸

شکل ۴—۸: نمودار تحول زمانی سرعت رانش انتقالی شبه گاز الکترون دو بعدی در سطح لایه معکوس Si/Sio_2 در دمای ۳۰۰(a) و ۷۷(b) کلوین ۷۹

شکل ۵—۱: نمودار ۳ مؤلفه از شار اسپین برای اسپین تزریق شده در جهت x و در سطح لایه معکوس Si/Sio_2 . ۸۵

شکل ۵—۲: نمودار تحول قطبش اسپین الکترون در میدان 10 kV/cm در دماهای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین برای اسپین ذرات تزریق شده در جهت محور x است ۸۷

شکل ۵—۳: نمودار تحول قطبش اسپین الکترون در میدان 10 kV/cm در دماهای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین برای اسپین ذرات تزریق شده در جهت محور y است ۸۸

شکل ۵—۴: نمودار تحول قطبش اسپین الکترون در میدان 10 kV/cm در دماهای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین برای اسپین ذرات تزریق شده در جهت محور z است ۸۹

شکل ۵—۵: اندازه بردار قطبش اسپین در میدان 10 kV/cm در دماهای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین است ۹۰

چکیدهٔ فارسی:

شبیه سازی مونت کارلو برای انتقال حاملها در نیمه رساناهای کپه ای و نانو ساختارها
عادله مخلص گرامی

بررسی انتقال حاملها نظیر الکترون و حفره در مواد، در حضور میدان الکتریکی و گرادیان دما به دلیل اهمیت کاربردی در طراحی قطعات مختلف، همواره مورد توجه بوده است. در این پایان نامه ترابرد حاملها در نیمه رساناهای حجمی و نانو ساختارها (ساختارهایی که محدودیتهای کوانتومی در آن بدلیل کاهش ابعاد مهم اند) مورد مطالعه قرار گرفته است. در ابتدا کلیه مکانیزم های مختلف پراکندگی در پدیده انتقال حاملها در نیمه هادی ها مورد بررسی قرار می گیرد، سپس ترابرد حاملها در نیمه هادیهای حجمی و چاه کوانتومی با استفاده از روش مونت کارلو شبیه سازی می شود. به دلیل گسترش سریع در فناوری نانو و استفاده از خواص انتقال اسپینی در طراحی قطعات اسپینترونیکی، در انتها انتقال اسپین نیز با استفاده از روش مونت کارلو شبیه سازی می شود.

واژه‌های کلیدی: روش مونت کارلو، انتقال الکترون، نیمه رسانا، شبه گاز الکترون دوبعدی، اسپین قطبیده

Abstract:

Monte Carlo Simulation of carriers transport in bulk and Nanostructure Semiconductors
Adeleh Mokhles Gerami

The investigation of carriers transport always like electrons and holes in substances, in presence of electric field and temperature gradient has been concerned, due to its applicability importance in designing of the various devices . Carriers transport in bulk semiconductor and nanostructures (The structures that the quantum confinments are important due to decrease in dimensions) has been studied in this thesis. At first, all the different scattering mechanisms in carrier transport phenomena in semiconductors is investigated. Then carriers transport is simulated in bulk and quantum well semiconductors by using the Monte Carlo method. because of rapid development in nanotechnology and using the spin transpor has also been simulated at the end of this thesis via Monte Carlo simulation method.

Key words: Monte Carlo method, Electron transport, Semiconductors, Quasi two dimentional electron gas, Spin polarized.

مقدمه

مقدمه

مطالعه ترابرد حاملهای الکتریکی در بلور نیمه رسانا از دو جنبه تئوری و کاربردی در بررسی قطعات نیمه هادی اهمیت دارد. این مطالعه از یک طرف به شناخت برهم کنش الکترون با شبکه بلور، اثر ساختار نوار انرژی بر تحرک پذیری حاملها کمک می کند و از طرف دیگر نتایج این مطالعات جهت بهینه سازی قطعات میکرو الکترونیک لازم است .

هدف نظریه ترابرد الکترون در بلورهای نیمه رسانا تعیین پارامترهای ترابرد میکروسکوپیک، از طریق کمیت های فیزیکی قابل اندازه گیری بلور نیمه رسانا می باشد. به عنوان مثال تعدادی از این کمیتها عبارتند از ثابت شبکه بلور، چگالی بلور، ضریب دی الکتریک و جرم مؤثر الکترون است. به کمک این نظریه می توان نحوه تغییرات خواص ترابرد را از طریق تغییرات میدان الکتریکی، دما و میزان ناخالصی موجود در کریستال بررسی کرد.

در سالهای اخیر شاهد رشد سریع و گسترده در زمینه فیزیک حالت جامد و ساخت ابزارهای کوانتومی بوده ایم. دلیل اصلی این مطلب امکان رشد نانو ساختارهای نیمه هادی نظیر چاه کوانتومی، سیم های کوانتومی و نقطه های کوانتومی می باشد. به همین منظور بررسی مان را از حالت حجیم به ابعاد کاهش یافته وسعت می دهیم.

همچنین در سالهای اخیر با در نظر گرفتن اسپین، افقهای جدید و بسیار گسترده ای در زمینه فیزیک حالت جامد و ساخت ابزارهای کوانتومی گشوده شده است. استفاده از درجه آزادی اسپین با توجه به این نکته که بر طبق نظریه پذیرفته شده توسط اکثریت پژوهشگران فیزیک نیمه هادی مبنی بر استفاده از بار الکتریکی تا ده یا پانزده سال دیگر به حد نهایی استفاده و گسترش در زمینه کوچک کردن، کاهش توان مصرفی، افزایش سرعت و ... خواهید رسید، اهمیت بیشتری پیدا کرده است.

استفاده از درجه آزادی اسپینی باعث می شود که بتوان سرعت پردازش اطلاعات را افزایش داد، توان مصرفی را کاهش و مدارهای هر چه کوچکتر ساخت. نوع دیگر استفاده از درجه آزادی اسپینی در این نکته نهفته است که با استفاده از اسپین می توان به یک همدوسی فازی فراتر از مقیاس ابزارهای مبتنی بر بار رسید. شاید مهمترین نتیجه این مطلب، پتانسیل بزرگی است که در ساخت بیتهای کوانتومی ایجاد می شود. به طور خلاصه شاخه ای از فیزیک که با مفاهیم گفته شده سر و کار دارد، اسپینترونیک نامیده می شود. بنابراین بررسی انتقال الکترون با اسپین پولاریزه شده در نیمه رسانا به عنوان یک پژوهش مؤثر در صنایع الکترونیک از اهمیت خاصی برخوردار است. به همین منظور بخشی از این کار به مطالعه دینامیک اسپین قطبیده اختصاص دارد.

هدف از این پایان نامه مطالعه خواص ترابرد الکترونی در بلورهای نیمه رسانایی که تحت تأثیر نیروی خارجی ناشی از میدان الکتریکی است، به همین منظور روشهای گوناگونی وجود دارد که یکی از این روشها روش مونت کارلو است. با این روش می توان یک ساختار نواری ایده آل و تمام فرایندهای پراکندگی مرتبط را وارد محاسبات کرد و خواص الکتریکی ماده را محاسبه نمود.

این پایان نامه در ۵ فصل تنظیم شده است. در فصل اول به بررسی اجمالی خواص عمومی ترکیبات نیمه رسانا و به طور خاص برای نیمه رسانای GaAs و CdTe، از دیدگاه ساختار بلوری و ساختار نواری می پردازیم. در فصل دوم، به مطالعه مکانیزم های مختلف پراکندگی الکترونها و زمان واهلش اندازه حرکت آنها می پردازیم. همانطور که می دانیم، در اثر اعمال میدان الکتریکی خارجی الکترونها در ساختار نواری به حرکت در می آیند. ولی حرکت آنها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی قرار می گیرد. در این فصل آهنگ پراکندگی الکترونها و همچنین نرخ واهلش اندازه حرکت آنها در حضور عوامل مختلفی همچون فونون های آکوستیکی، اپتیکی و اتم های ناخالصی یونیزه شده را بررسی کرده و به منظور بررسی بیشتر، در ماده CdTe تغییرات این آهنگهای پراکندگی و همچنین نرخ واهلش اندازه حرکت بر حسب انرژی الکترون رسم شده است.

در فصل سوم، سازوکار روش شبیه سازی مونت کارلو را به طور کلی توضیح داده و کاربرد این روش را در ترابرد حاملها در مواد نیمه رسانا شرح می دهیم. در این بررسی خواص ترابرد الکترونها را برای نیمه رساناهایی همچون GaAs و CdTe به دست آمده است. در فصل چهارم، خواص ترابرد یک شبه گاز الکترون دو بعدی در سطح لایه معکوس Si/Sio_2 در حضور میدان الکتریکی یکنواخت از طریق روش آنسامبلی مونت کارلو بررسی می گردد. به همین منظور لازم است که آهنگهای پراکندگی را در یک شبه گاز الکترون دو بعدی محاسبه گردد.

در نهایت در فصل پنجم، انتقال الکترونها با اسپین پولاریزه شده در سطح لایه معکوس Si/Sio_2 در حضور میدان الکتریکی یکنواخت با استفاده از روش مونت کارلو شبیه سازی می شود و تقریب ماتریس چگالی اسپین را برای محاسبه دینامیک اسپین پولاریزه شده استفاده می گردد و همچنین اثر برهم کنش اسپین—مدار بر روی دینامیک اسپین بررسی می شود.

فصل اول

مفاهیم مقدماتی