شبیه سازی ادوات نانوالکترونیک با روش انتگرال مسیر مونت کارلو

باطنی پور، نسرین دخت[۱]؛ ثقفی، کامیار[۲]؛ مروج فرشی، محمدکاظم[۳]

[۱] گروه الکترونیک، واحد علوم و تحقیقات تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، batenipour_nd@srbiau.ac.ir

[۲] گروه الکترونیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شاهد، saghafi@shahed.ac.ir

[۳] گروه الکترونیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه تربیت مدرس، farshi_k@modares.ac.ir

چکیده

در این مقاله با استفاده از روش انتگرال مسیر مونت کارلو، ساختارهای نقطه کوانتومی سهموی دو بعدی و نقطه کوانتومی محصور شده در چاه کوانتومی را شبیه سازی نموده ایم. انرژی کل و چگالی الکترونی را در نقطه کوانتومی سهموی محاسبه کرده ایم. علاوه بر آن، انرژی کل، انرژی پتانسیل، انرژی جنبشی و همچنین توزیع الکترون در ساختارهای مختلف نقطه کوانتومی محصور شده در چاه کوانتومی را بررسی نموده ایم. بر اساس نتایج حاصل از شبیه سازی، ملاحظه گردید روش انتگرال مسیر مونت کارلو برای شبیه سازی نقاط کوانتومی با اشکال هندسی مختلف و پتانسیل های متفاوت مناسب است و به سادگی می توان تغییرات پروفایل پتانسیل را در الگوریتم محاسباتی آن اعمال نمود. مزیت دیگر این روش در توانایی لحاظ کردن بر هم کنش بین الکترونها و اجتناب از تقریبهای ساده سازی است. با این روش می توان ویژگیهای متنوعی از سیستم، از انرژی کل، انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی تا توزیع الکترونها را محاسبه نمود.

Simulation of Nanoelectronic Devices Using Path Integral Monte Carlo Method

Batenipour, Nasrindokht[1]; Saghafi, Kamyar[2]; Moravvej-Farshi, Mohammad Kazem[2]

[1] Department of Electrical Engineering, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran, batenipour_nd@srbiau.ac.ir

[2] Department of Electrical Engineering, Shahed University, Tehran, Iran, saghafi@shahed.ac.ir

[3] Department of Electrical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, Farshi_k@modares.ac.ir

Abstract

In this paper we have simulated the two-dimensional parabolic quantum dot (2D-PQD) and dot-in-a-well (DWELL) structures using path integral Monte Carlo (PIMC) method. We have calculated the total energy and electron density in PQD. Furthermore, the total energy, potential energy, kinetic energy and also electron density in several DWELL structures have been studied. Based on our simulation results, it reveals that PIMC method is suitable for the simulation of quantum dots with different geometrical shapes and potentials. We may simply apply variation of potential profile in its algorithm. Electron interaction consideration is another advantage of this method that leads to avoiding simplicity approximations. With this method, we may calculate several properties, such as the total energy, potential energy, kinetic energy and electron distribution.

مقدمه

در ادوات نانو نظیر ساختارهای چاه کوانتومی (QW[أ])، میله کوانتومی (QWR[ب]) و یا نقطه کوانتومی (QD[ج]) ،تعداد محدودی الکترون توسط یک پتانسیل محدود کننده در فضایی با ابعاد نانومتری محصور شده‌اند [۱]. لذا یک سیستم چند ذره‌ای ایجاد می گردد که حل معادله شرودینگر چندبعدی آن اساساً دشوار و نیازمند تقریب ها و فرضیات ساده کننده‌ای است که دقت محاسبات و حتی در برخی موارد اعتبار نتایج را کاهش می‌دهند. لذا برای شبیه سازی ساختارهای نانو از روش‌های ویژه‌ای نظیر هارتری-فوک (HF[د]) [۲،۳]، تئوری تابع چگالی (DFT[ه]) [۴] و همچنین مونت کارلوی کوانتومی (QMC[و]) [۵] استفاده می گردد.

روش‌های QMC بر اساس نمونه‌گیری تصادفی کار می‌کنند و معادله چندبعدی را به‌طور مستقیم حل می کنند. در این روش‌ها برهم‌کنش بین ذرات نیز در نظر گرفته می‌شود، لذا موثرترین روشهای محاسباتی موجود برای سیستمهای کوانتومی می باشند. انتگرال مسیر مونت کارلو (PIMC[ز]) [۶،۷] یکی از روشهای QMC است که دقت بالا و الگوریتم محاسباتی پیچیده ای دارد.

هدف این مقاله معرفی روش PIMC و قابلیت های منحصر به فرد آن در شبیه سازی ادوات نانو است. لذا در ادامه پس از توصیف مختصر این روش، به عنوان نمونه نتایج کاربرد آن در شبیه سازی نقطه کوانتومی سهموی دو بعدی (2D-PQD[ح]) و نقطه کوانتومی محصور شده در چاه کوانتومی (DWELL[ط]) را تشریح می نماییم.

الگوی همیلتونی و روش انتگرال مسیر مونت کارلو

همیلتونی ساختار کوانتومی متشکل از N الکترون برابر است با[۷]:

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_i^2+V(r_i)\right]+\sum_{j<i}^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_s\varepsilon_0\left|r_i-r_j\right|} \qquad (۱)$$

که m* جرم موثر الکترون، ε_0 و ε_s به‌ترتیب ثابت گذردهی خلاء و گذردهی نسبی ماده، e بار الکتریکی الکترون، r_i موقعیت مکانی الکترون i ام و $|r_i-r_j|$ فاصله مکانی بین الکترون i ام و j ام اند. $V(r_i)$ انرژی پتانسیل است که با توجه به نوع ساختار تعیین می شود. رابطه (۲) انرژی پتانسیل نقطه کوانتومی سهموی دو بعدی با فرکانس نوسان ω_0 را نشان می دهد[۸]:

$$V(r_i)=\frac{1}{2}m^*\omega_0^2 r_i^2 \quad ;r_i=(x_i,y_i) \qquad (۲)$$

در پیاده سازی الگوریتم PIMC، به منظور سهولت محاسبات رابطه (۱) را به صورت زیر نرمالیزه می کنیم[۸]:

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\left[-\nabla_i^2+\frac{1}{2}r_i^2\right]+\sum_{j<i}^{N}\frac{\lambda}{\left|r_i-r_j\right|} \qquad (۳)$$

که ضریب تزویج $\lambda=\sqrt{\hbar/m^*\omega_0}/a_B^*$، قدرت برهم‌کنش الکترون‌ها را تعیین می‌کند و در آن a_B^* شعاع موثر بوهر ماده است.

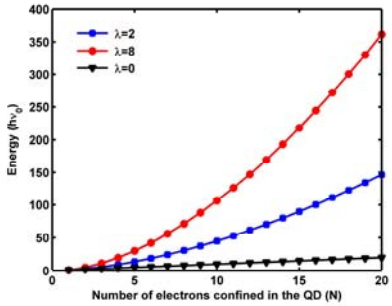
انرژی پتانسیل برای نانو ساختار ترکیبی DWELL که از قرار گرفتن یک نقطه کوانتومی در درون چاه پتانسیل ایجاد شده است، از دو جزء پتانسیل چاه و پتانسیل نقطه کوانتومی تشکیل می شود[۹]. با توجه به شکل هندسی نقطه کوانتومی محصور شده در چاه می توان ساختارهای DWELL را نام گذاری نمود: ساختار متشکل از نقطه کوانتومی کروی (SDWELL[ک])، ساختار متشکل از نقطه کوانتومی بیضوی (EDWELL[ک]) و ساختار حاصل از نقطه کوانتومی مخروطی (CDWELL[ل]). این ساختارها و پتانسیل های مربوطه به تفصیل در مرجع [۹] تشریح شده‌اند.

در روش انتگرال مسیر مونت کارلو الگوی همیلتونی (۱) بطور مستقیم حل می شود. این روش که بر اساس فرمول انتگرال مسیر فایمن [۱۰] بنا شده است، از مفهومی به نام ایزومورفیسم[م] استفاده می‌کند که یک ذره کوانتومی را به زنجیره‌ای بهم پیوسته از ذرات کلاسیکی نگاشت می‌کند[۱۱]. با استفاده از ایزومورفیسم می‌توان یک سیستم حاوی N ذره کوانتومی را به سیستم کلاسیکی متشکل از N زنجیره که هر زنجیره از M دانه تشکیل شده است مدل نمود. بدین ترتیب ماتریس چگالی کوانتومی به صورت حاصل-ضرب زنجیره‌ای از ماتریس‌های چگالی کلاسیک نوشته می شود[۱۲]. در این روش از ماتریس چگالی سیستم نمونه گیری می‌شود. بدین منظور هر ذره به‌صورت تصادفی در موقعیت ابتدایی خود قرار می‌گیرد و در هر مرحله از مونت کارلو به سمت حالت تعادلی خود حرکت می کند. در هر مرحله مونت کارلو ذرات به-صورت تصادفی حرکت می‌کنند که بر اساس کنش زنجیرها در مورد رد یا قبول این حرکت تصمیم گیری می شود. بدین ترتیب در هر حرکت مونت کارلو سیستم به‌سمت حالت پایدار خود گام بر می‌دارد. حرکت مونت کارلو تا زمانی تکرار می‌شود که به همگرایی با دقت مورد نظر رسیده باشیم. ما در پیاده سازی الگوریتم PIMC از کنش لی-براتن (LB[ن]) که سرعت همگرایی مناسبی دارد، استفاده نموده‌ایم [۱۲].

نتایج شبیه سازی با روش PIMC

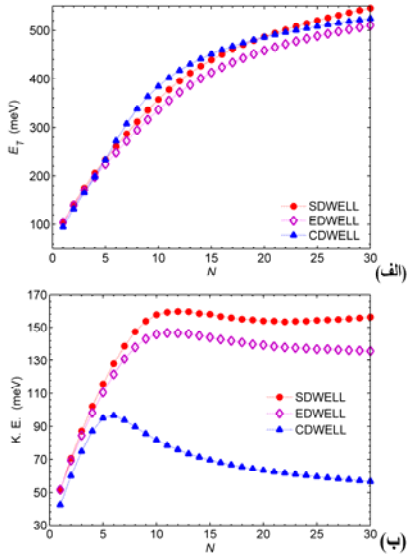
ابتدا نتایج حاصل از شبیه سازی 2D-PQD را بیان می کنیم. شکل ۱ انرژی کل نقطه کوانتومی را برحسب تعداد الکترون(N)های محصور شده در آن نشان می‌دهد. محاسبات برای

سه حالت درغیاب برهم‌کنش (λ=0)، درحضور برهم‌کنش ضعیف (λ=2) و درحضور برهم‌کنش نسبتاً قوی (λ=8) انجام شده است. درغیاب برهم‌کنش الکترونی، با افزایش N، انرژی سیستم به‌صورت خطی افزایش می‌یابد.اما درحضور برهم‌کنش، با افزودن هر الکترون به نقطه کوانتومی در اثر افزایش برهم‌کنش بین الکترونها انرژی کل سیستم به‌صورت غیر خطی افزایش می یابد. هرچه شدت برهم‌کنش قویتر (λ بزرگتر) باشد، پراکندگی الکترون‌ها موثرتر و میزان افزایش انرژی بیشتر است.



شکل۱ : نمودار انرژی کل نقطه کوانتومی برحسب تعداد الکترون‌های محصور در آن برای سه حالت با λ=0، λ=2 و λ=8

در شبیه سازی ساختارهای DWELL انرژی کل و انرژی جنبشی سه ساختار SDWELL، EDWELL و CDWELL در شکل ۲ با یکدیگر مقایسه گردیده است. همانگونه که در شکل ۲-الف ملاحظه می شود در هر سه ساختار، با افزایش تعداد الکترونها، برهم کنش الکترونی و در نتیجه انرژی کل E_T، افزایش می یابد. همچنین شکل۲-ب نشان می دهد که ابتدا با افزایش N انرژی جنبشی، K.E.، افزایش می یابد، هرچند در ادامه با افزایش N به بیش از مقدار مشخص N_{max} انرژی شروع به کاهش می کند. مقدار N_{max} که در هر یک از ساختارهای DWELL متفاوت است، بیشینه گنجایش نقطه کوانتومی را نشان می دهد که بعد از آن حداقل یک الکترون از QD خارج می شود. بنابراین با افزایش الکترونها، انرژی جنبشی نیز افزایش می یابد تا زمانیکه الکترون از سد پتانسیل QD عبور کند و وارد QW شود (N>Nmax)، در اینصورت روند افزایشی انرژی جنبشی متوقف می شود.

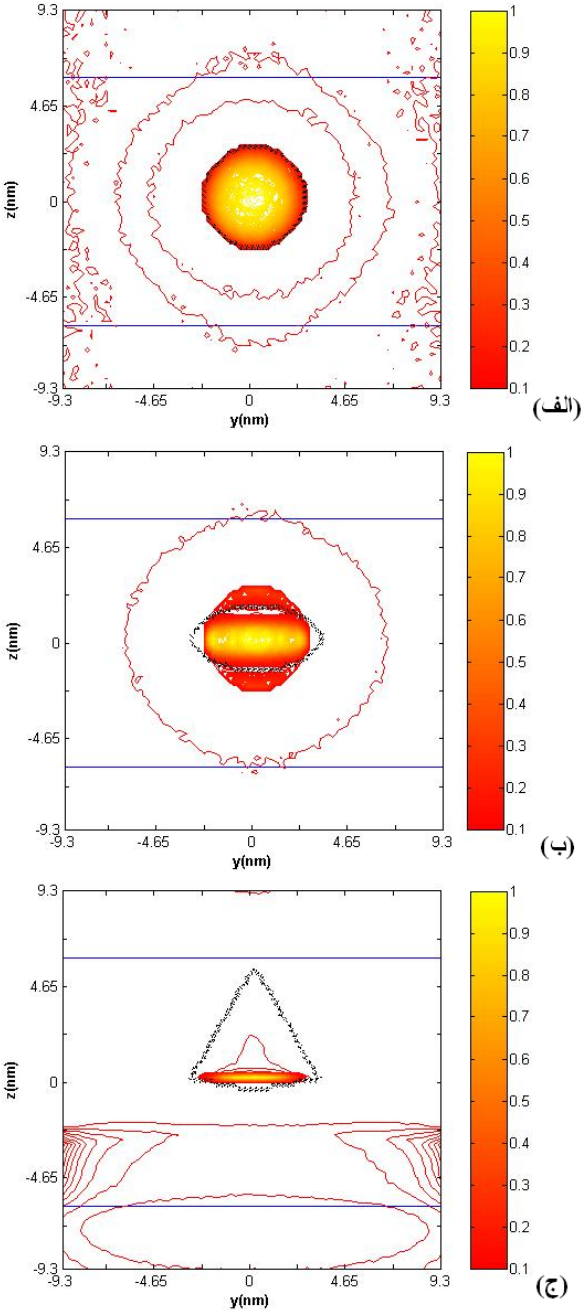


شکل۲ : نمودار تغییرات (الف) انرژی کل و (ب) انرژی جنبشی برحسب N برای SDWELL، EDWELL و CDWELL.

شکل ۳ نتایج حاصل از محاسبه توزیع الکترونها در ساختارهای DWELL را نشان می دهد. در شکل ۳-الف ملاحظه می گردد، توزیع الکترون در SDWELL متقارن است و از شکل کره تبعیت می کند. الکترونها به صورت شعاعی از پتانسیل محدود کننده QD کروی عبور می کنند و وارد چاه کوانتومی می شوند. شکل ۳-ب توزیع الکترون در EDWELL را نشان می دهد. در این ساختار الکترونها از سطح بالایی و پایینی QD بیضوی که دارای انحنای کمتری هستند، وارد چاه می شوند. توزیع الکترون در CDWELL (شکل ۳-ج) نشان می دهد که الکترون درون QD مخروطی در کف نقطه کوانتومی متمرکز است واز آنجا که دارای کمترین انحنااست وارد چاه می شود.

نتیجه گیری

در این مقاله به منظور تشریح قابلیت های ویژه روش انتگرال مسیر مونت کارلو ، به عنوان نمونه نتایج کاربرد آن در شبیه سازی 2D-PQD و ساختارهای DWELL ارائه گردید. محاسبه انرژی در PQD نشان داد که با افزایش تعداد الکترونها به ویژه در حالت برهم کنش قوی انرژی کل سیستم افزایش می‌یابد.



شکل۳: توزیع دو بعدی الکترون در (الف) SDWELL، (ب) EDWELL و (ج) CDWELL.

همچنین شبیه سازی ساختارهای DWELL و مقایسه آنها با یکدیگر نشان داد محدودیت شدید در QD مخروطی، موجب می شود بیشینه گنجایش الکترونی آن کمتر از بقیه باشد و الکترون در کف مخروط متمرکز شده و از آنجا وارد چاه گردد. علاوه بر این نشان داده شد که توزیع الکترونها در DWELL به شکل QD وابسته است.

با توجه به نتایج حاصل ملاحظه می گردد روش PIMC روشی کارآمد در شبیه سازی ادوات نانو الکترونیک است که به سادگی می توان تغییرات پروفایل پتانسیل را در الگوریتم محاسباتی آن اعمال نمود. همچنین می توان بر هم کنش بین الکترونی را با دقت کافی لحاظ کرد و معادله همیلتونی چند بعدی را به طور مستقیم حل نمود. با این روش می توان ویژگیهای متنوعی از سیستم، از جمله انرژی کل، انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی و چگالی الکترونی را محاسبه نمود.

مرجع‌ها

[1] P. Harrison and A. Valavanis; "*Quantum Wells, Wires and Dots*"; 4th edition, John Wiley & Sons. (2016)

[2] P. A. Sundqvist *et al.*; "Phase Transitions of a few-electron System in a Spherical Quantum Dot"; *Phys. Rev. B* **66** (2002) 075335:1-10.

[3] B. Reusch, W. Hausler and H. Grabert; "Wigner molecules in quantum dots"; *Phys. Rev. B* **63** (2001) 113313-6.

[4] E. Rasanen *et al.*; "Electronic Structure of Rectangular Quantum Dots"; *Phys. Rev. B.* **67** (2003) 235307: 1-8.

[5] R. Egger *et al.*; "Crossover from Fermi Liquid to Wigner Molecule Behavior in Quantum Dots"; *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 3320-3323.

[6] S. Groth *et al.*; "Ab initio quantum Monte Carlo simulations of the uniform electron gas without fixed nodes"; *Phy. Rev. B* **93** (2016) 058102.

[7] J. Shumway and D. M. Ceperley; "Quantum Monte Carlo Methods in the Study of Nanostructures", in *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology* **3**, edited by M. Rieth and W. Schommers, American Scientific Publishers (2006) 605-641.

[8] B. Reusch; "Quantum Simulations for Semiconductor Quantum Dots: From Artificial Atoms to Wigner Molecules"; PhD Thesis, Heinrich-Heine-University, Düsseldorf, Germany. (March 2003)

[9] N. Batenipour, K. Saghafi and M. K. Moravvej-farshi; "Quantum Dot Geometry as a Designing Tool for Dot-in-a-Well Structures"; *Mod. Phys. Lett. B* **24** (2010) 1675-1689.

[10]R. P. Feynman; "Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics"; *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.

[11]F. Krajewski; "New path integral simulation algorithms and their application to creep in the quantum sine-Gordon chain"; PhD Thesis. (August 2003)

[12]L. B. Barbera; "Path integral Monte Carlo Algorithms and applications to quantum fluids"; PhD Thesis, Universitat Politecnica De Catalunya, Barcelona. (2002)

أ Quantum Well (QW)

ب Quantum Wire (QWR)

ج Quantum Dot (QD)

د Hartree-Fock (HF)

ه Density Functional Theory (DFT)

و Quantum Monte Carlo (QMC)

ز Path Integral Monte Carlo (PIMC)

ح TwoDimentional Parabolic Quantum Dot (2D-PQD)

ط Dot-in-a-Well (DWELL)

ی Spherical Dot-in-a-Well (SDWELL)

ک Ellipsoidal Dot-in-a-Well (EDWELL)

ل Conical Dot-in-a-Well (CDWELL)

م Isomorphism

ن Li-Broughton (LB)