

Symulacje MC transportu elektronowego
w półprzewodnikach

Plan:

- równanie dryfu-dyfuzji a równanie transportowe Boltzmannna
- symulacja MC pojedynczych nośników:
 - rozpraszanie na fononach oraz samorozproszenie nośników
 - półprzewodniki zdegenerowane: zakaz Pauliego
- przykładowe wyniki symulacji MC dla silicenu (materiał Diracowski)

Literatura:

- C. Jacoboni, L. Reggiani, „**The MC method for the solution of charge transport in semiconductors with application to covalent materials**”, Rev. Mod. Phys. 55, (1983) 645
- M.V. Fischetti, et al., „**MC analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects**”, Phys. Rev. B 38, (1988) 9721
- C. Jacoboni, P. Lugli, chap. 14 in „**The MC method for semiconductor device simulation**”, ed. S. Selberherr, Springer
- X. Li, et al., „**Intrinsic electrical transport properties in monolayer silicene and MoS₂ from first principles**”, Phys. Rev. B 87, (2013) 115418
- P. Borowik, et al., „**MC study of electron transport in monolayer silicene**”, Semicond. Sci. Technol. 31, (2016) 115004
- D. Vasileska, et al., chapter 15 in „**Applications of MC in science and engineering**”, ed. Shaul Mordechai, IntechOPen, 2011

Wstęp

Po co używać MC w symulacji układów elektronicznych?

- Najbardziej ogólny opis transportu elektronowego daje równanie transportowe Boltzmann (BTE) dla funkcji rozkładu $f(r,v,t)$, jednak znalezienie jego rozwiązania, nawet numerycznie jest trudne

$$f = f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad \underbrace{\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_{\vec{p}} f}_{\text{liniowy operator różniczkowy = Liouvillian}} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll}$$

6 wymiarów (za dużo informacji)

- w układach o dużych rozmiarach (mikrometry), stosując metodę momentów można równanie BTE zastąpić zestawem równań dryfu-dyfuzji (DD)

- gęstość prądu

$$\vec{J}_n = -e n \mu_n \vec{\varepsilon} + e D_n \nabla n$$

$$\vec{J}_p = e p \mu_p \vec{\varepsilon} - e D_p \nabla p$$

- równanie ciągłości

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J}_n + U_n$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J}_p + U_p$$

$$\vec{J} = \vec{J}(\vec{r}, t)$$

$$n = n(\vec{r}, t)$$

$$p = p(\vec{r}, t)$$

$$\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}(\vec{r}, t)$$

- równanie Poissona

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla V) = -(p - n + N_D^+ - N_A^-)$$

tempo \longrightarrow $U_n(\vec{r}, t), U_p(\vec{r}, t)$
generowania i rekombinacji nosników

W tych równaniach nie występuje energia (temperatura) nośników ładunku, więc zakładamy:

- (1) nie jest potrzebna, (2) że T nośników jest taka sama jak układu (nieprawda, jest wyższa) lub (3) szukamy jej innymi metodami

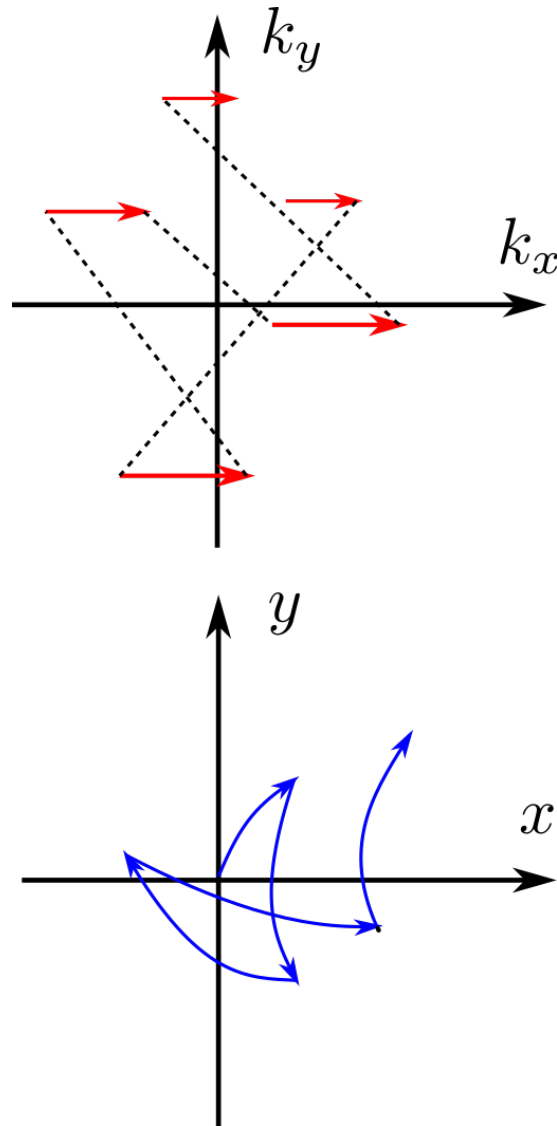
Dlaczego temperatura nośników jest istotna?

- pole elektryczne przyspiesza cząstki, to powoduje wzrost energii i temperatury T_n
- energia nośników wpływa na oddziaływanie z siecią atomową – absorpcja/emisja fononów, a to wpływa na ruchliwość nośników
- pojawia się wzrost **ciśnienia gazu elektronowego** (lub dziurowego) $\sim nk_B T_n$ co generuje dodatkową siłę w układzie, można próbować rozszerzyć równania DD o ten wyraz

$$\vec{J} = en\mu_n\vec{\varepsilon} - eD_n\nabla n - enD_T\nabla T_n$$

- takie poprawki nie rozwiązują definitywnie problemu, wraz ze zmniejszaniem rozmiaru układu istotna staje się „ziarnistość” ładunku - indywidualna charakterystyka nośników staje się dominująca, zwłaszcza ta związana z ich rozpraszaniem
- przejście od opisu DD/hydrodynamicznego do opisu cząsteczkowego musi uwzględniać losowy charakter rozpraszania cząstek na: zjonizowanych domieszkach, defektach sieci, innych nośnikach itp., informacje te (częstości rozpraszania) pochodzą zazwyczaj z rachunku zaburzeń (mechanika kwantowa)
- w najprostszym ujęciu symulacja MC jest procesem iteracyjnym, gdzie w pojedynczej iteracji wyróżniamy fazę swobodnego lotu w krótkim przedziale czasu (Δt) która kończy się procesem rozpraszania (Γ), które zachodzi natychmiastowo - po czym oba etapy są powtarzane wielokrotnie a potrzebne informacje uśredniane w czasie dla grupy cząstek
- informacje zbierane w trakcie symulacji MC na podstawie ewolucji trajektorii pojedynczych cząstek są statystycznie równoważne rozwiązaniu BTE w stanie równowagowym
- metoda MC również ma ograniczenia, jest metodą półklasyczną, więc gdy efekty kwantowe stają się dominujące, ona również daje nieprawidłowe wyniki

Przykładowa trajektoria w przestrzeni wektora falowego i w przestrzeni położeniowej.
Nagła (natychmiastowa) zmiana kierunku wektora falowego zachodzi w wyniku rozpraszania cząstki.



Od BTE do symulacji MC pojedynczych cząstek

- równanie transportowe Boltzmann'a opisuje ewolucję jednocząstkowej funkcji rozkładu $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ w przestrzeni fazowej (dla niezdegenerowanego półprzewodnika – $f \ll 1$, dla $f \sim 1$ musimy brać pod uwagę zakaz Pauliego)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - e\vec{\varepsilon} \cdot \nabla_{\vec{p}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \sum_{i=1}^N \sum_{\vec{p}'} [R_i(\vec{p}', \vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}', t) - R_i(\vec{p}, \vec{p}') f(\vec{r}, \vec{p}, t)]$$

$$\frac{1}{\tau(\vec{p})} = \sum_{i=1}^N \sum_{\vec{p}'} R_i(\vec{p}, \vec{p}') \quad \begin{array}{l} \text{- tempo / szybkość ucieczki ze stanu o pędzie } \mathbf{p} \\ \mathbf{N} \text{ - ilość procesów fizycznych prowadzących do zmiany pędu} \end{array}$$

- to z jaką szybkością cząstka będzie opuszczać stan \mathbf{p} zależy od energii cząstki (pędu), w równaniach o wiele wygodniej jest operować stałymi częstościami, dlatego ze względów praktycznych wprowadzamy pomocniczą wielkość $\Omega(\mathbf{p})$, która oznacza częstość rozproszeń bez zmiany pędu (**self-scattering**)

$$\Gamma(\vec{p}) = \frac{1}{\tau(\vec{p})} + \Omega(\vec{p}) \quad (= \text{const} - \text{docelowo})$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} &= \left[\sum_{i=1}^N \sum_{\vec{p}'} R_i(\vec{p}', \vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}', t) \right] - f(\vec{r}, \vec{p}, t) \left(\frac{1}{\tau(\vec{p})} + \Omega(\vec{p}) \right) + f(\vec{r}, \vec{p}, t) \Omega(\vec{p}) \\ &= \left[\sum_{i=1}^N \sum_{\vec{p}'} R_i(\vec{p}', \vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}', t) \right] - f(\vec{r}, \vec{p}, t) \left(\frac{1}{\tau(\vec{p})} + \Omega(\vec{p}) \right) + \sum_{\vec{p}'} f(\vec{r}, \vec{p}', t) \Omega(\vec{p}) \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma(\vec{p}) &= \frac{1}{\tau(\vec{p})} + \Omega(\vec{p}) \\
 &= \sum_{i=1}^N \sum_{\vec{p}'} R_i(\vec{p}, \vec{p}') + \sum_{\vec{p}'} \Omega(\vec{p}) \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \\
 &= \sum_{\vec{p}'} \underbrace{\left[\sum_{i=1}^N R_i(\vec{p}, \vec{p}') + \Omega(\vec{p}) \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \right]}_{R_{eff}(\vec{p}, \vec{p}')}
 \end{aligned}$$

$$R_{eff}(\vec{p}, \vec{p}') = \sum_{i=1}^N R_i(\vec{p}, \vec{p}') + \Omega(\vec{p}) \delta_{\vec{p}, \vec{p}'}$$

- efektywna częstość rozpraszania zależy od N procesów fizycznych oraz fikcyjnego rozproszenia bez zmiany pędu

Po wbudowaniu samo-rozpraszania cząstki oraz przy założeniu jednorodnego rozkładu gęstości cząstek: $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f(\mathbf{p}, t)$ i postać BTE jest następująca

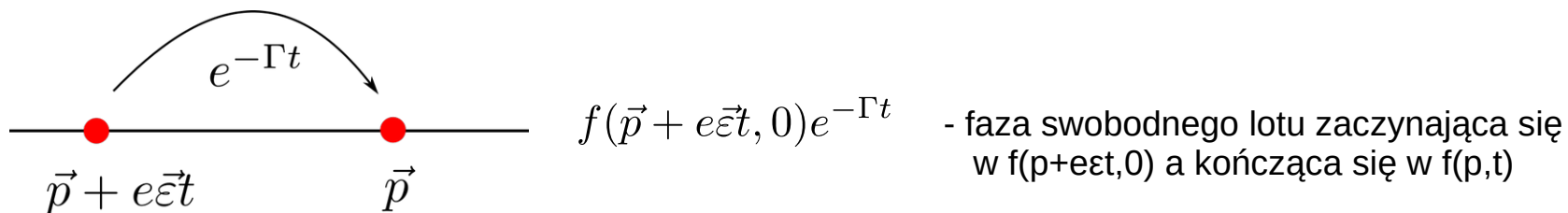
$$\frac{\partial f}{\partial t} - e\vec{\varepsilon} \nabla_{\vec{p}} f + \Gamma(\vec{p}) f(\vec{p}, t) = \sum_{\vec{p}'} \left[\sum_{i=1}^N R_i(\vec{p}', \vec{p}) + \underbrace{\left(\Gamma(\vec{p}) - \frac{1}{\tau(\vec{p})} \right)}_{\Omega(\vec{p})} \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \right] f(\vec{p}', t) = I(\vec{p}, t)$$

Dostaliśmy równanie BTE w znacznie uproszczonej postaci

$$\frac{\partial f}{\partial t} - e\vec{\varepsilon}\nabla_{\vec{p}}f + \Gamma(\vec{p})f(\vec{p}, t) = I(\vec{p}, t)$$

jego rozwiązanie można przedstawić w postaci całkowej
(w zasadzie jest to procedura całkowania po trajektoriach Chambersa-Reesa)

$$f(\vec{p}, t) = f(\vec{p} + e\vec{\varepsilon}t, 0)e^{-\Gamma t} + \int_0^t dt_1 \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}', t_1) R_{eff}(\vec{p}', \vec{p} + e\vec{\varepsilon}(t - t_1)) e^{-\Gamma(t-t_1)}$$



Całka oznacza zbiorczą informację o rozproszeniach prowadzących do zajęcia przez cząstkę stanu $\mathbf{p} + e\mathbf{\varepsilon}(\mathbf{t} - \mathbf{t}_1)$, który następnie ewoluuje do stanu końcowego \mathbf{p} z prawdopodobieństwem $e^{-\Gamma(\mathbf{t} - \mathbf{t}_1)}$

Z równaniami całkowymi mieliśmy już do czynienia i wiemy że MC potrafi je skutecznie rozwiązać.

- w trakcie swobodnego lotu na cząstkę działają siły powodujące zmianę pędu

$$\vec{p}(t) = \vec{p}(0) - e \left(\vec{\varepsilon} + \frac{\vec{p}}{m} \times \vec{B} \right)$$

- to oznacza, że powinniśmy zmienić sposób wyznaczania przedziału czasu, **w którym nie dochodzi do rozpraszania**

$$t_i = i \cdot \Delta t, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N \quad \Longrightarrow \quad q(t) = \prod_{i=0}^{N-1} \left(1 - \Gamma(\vec{p}(t_i)) \Delta t \right) \Gamma(\vec{p}(t_N)) \Delta t$$

$$\begin{aligned} q(t) &\approx \prod_{i=0}^{N-1} e^{-\Gamma(\vec{p}(t_i)) \Delta t} \Gamma(\vec{p}(t_N)) \Delta t \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} e^{-\sum_{i=0}^{N-1} \Gamma(\vec{p}(t_i)) \Delta t} \Gamma(\vec{p}(t_N)) \Delta t \\ &= \Gamma(\vec{p}(t)) e^{-\int_0^t \Gamma(\vec{p}(t')) dt'} \end{aligned}$$

tu pojawia się problem

- stosując standardową metodę odwracania dystrybuanty otrzymamy

$$\mathcal{U}(0, 1) \sim U = \int_0^t \Gamma(\vec{p}(t')) e^{-\int_0^{t'} \Gamma(\vec{p}(t'')) dt''} dt' = - \int_0^t \frac{d}{dt'} e^{-\int_0^{t'} \Gamma(\vec{p}(t'')) dt''} dt' = 1 - e^{-\int_0^t \Gamma(\vec{p}(t')) dt'}$$

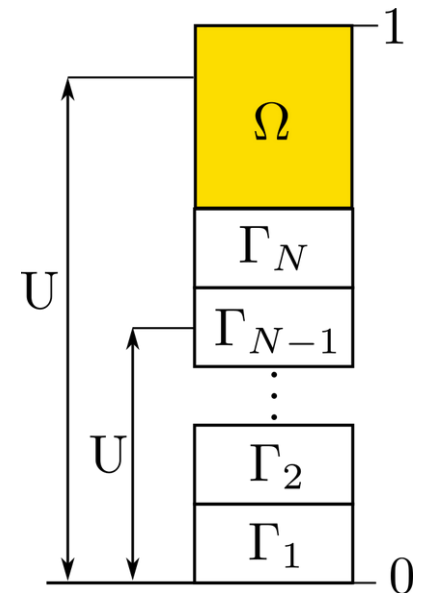
$$-\ln(1 - U) = \int_0^t \Gamma(\vec{p}(t')) dt'$$

- ze względu na ciągłą zmianę pędu cząstki i wartości Γ , wzór w tej postaci jest nieprzydatny

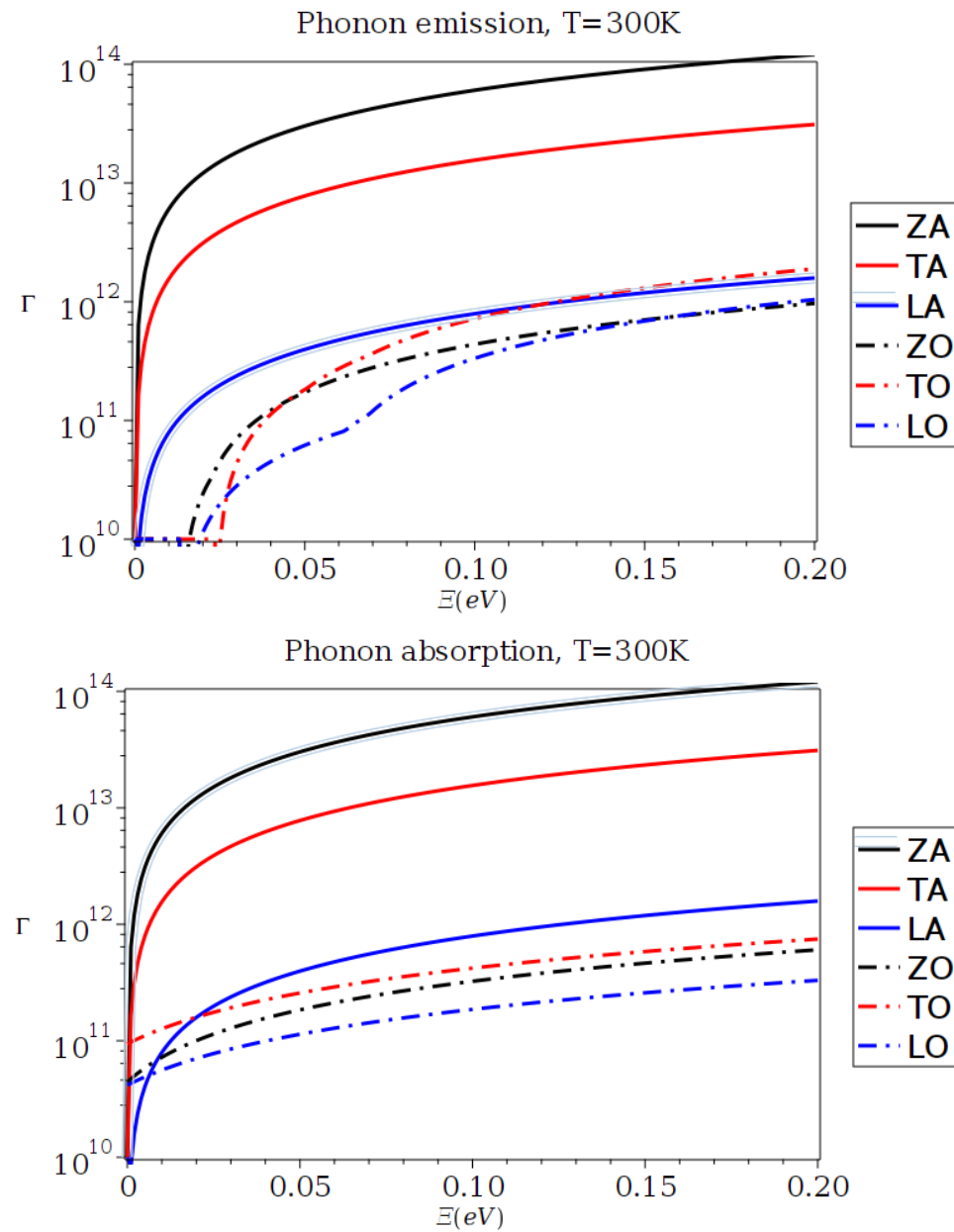
... ale do równania BTE wprowadziliśmy wyraz Ω , który nie powoduje zmiany pędu, teraz go wykorzystamy – pozwoli utrzymać stałą wartość Γ

$$\Gamma(\vec{p}) = \frac{1}{\tau(\vec{p}(t))} + \Omega = \sum_i \Gamma_i(\vec{p}) + \Omega_{const}$$

$$t = -\frac{1}{\Gamma} \ln(1 - U)$$



Przykład: absorpcja/emisja fononu przez elektron w monowarstwowym silicenie (buckled-Si)



- zmiana częstości rozpraszania zależy od energii i może zmieniać się w zakresie kilku rzędów wielkości, pojawia się nowy problem związany z wydajnością symulacji MC – większość wylosowanych procesów rozpraszania może być typu **self-scattering**

- aby zapobiec utracie wydajności należy dostosować wartości Ω do mniejszych przedziałów energii

$$\Gamma_{max} = \begin{cases} \Gamma_{max,1}, & E \leq E_1 \\ \Gamma_{max,2}, & E > E_1 \end{cases}$$

- może się jednak zdarzyć, że cząstka w trakcie swobodnego lotu zostanie przyspieszona do energii większych niż to przewidzieliśmy - wtedy należy dokonać korekty
- w trakcie lotu kontrolujemy energię, gdy wykryjemy $E > E_1$ w chwili t_1 wówczas dokonujemy zmian

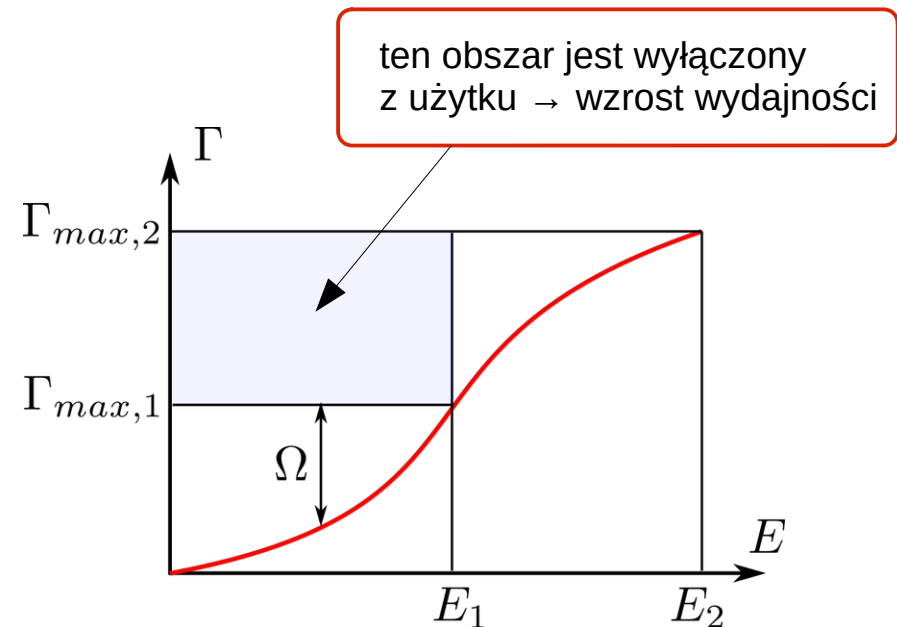
$$q(t) = \begin{cases} \Gamma_{max,1} e^{-\Gamma_{max,1} t} dt, & t < t_1 \\ \Gamma_{max,2} e^{-\Gamma_{max,1} t_1 - (t-t_1)\Gamma_{max,2}} dt, & t \geq t_1 \end{cases}$$

co prowadzi do modyfikacji czasu lotu

$$t_{new} = -\frac{1}{\Gamma_{max,2}} \ln(U) + t_1 \left(1 - \frac{\Gamma_{max,1}}{\Gamma_{max,2}} \right)$$

- używamy tego samego U , które wygenerowało t

$$t = -\frac{1}{\Gamma} \ln(1 - U)$$



Współczynnik dyfuzji, ruchliwość nośników

- w specyficznych warunkach: $T \sim 4$ K (ciekły hel), kryształ niedomieszkowany o małej liczbie dyslokacji, transport odbywa się w sposób balistyczny tj. średnia droga swobodna jest większa niż rozmiary układu
- ale dla $T \gg 1$ K termiczne drgania sieci (fonony) powodują rozpraszanie nośników, ich ruch może mieć **charakter dyfuzyjny**
- w zakresie niewielkich pól zewnętrznych **współczynnik dyfuzji (D)** jest liniowo powiązany z **ruchliwością (μ)**, wówczas prąd dryfu jest kompensowany gradientem gęstości

$$j = n\mu\varepsilon - D\nabla n = 0 \quad \Longrightarrow \quad n\mu\varepsilon = D\nabla n$$

dla pola jednorodnego rozkład gęstości zmienia się wykładniczo

$$V(x) = -F \cdot x = -q\varepsilon x \quad \Longrightarrow \quad n(x) \sim e^{-\frac{V(x)}{k_B T}} = e^{\frac{q\varepsilon x}{k_B T}} \quad \Longrightarrow \quad \nabla n(x) = \frac{q\varepsilon}{k_B T} n(x)$$

$$D = \frac{k_B T}{q} \mu \quad \text{- wzór Einsteina}$$

wzór uzyskany z metody momentów

W przypadku symulacji MC mamy możliwość określenia obu wielkości niezależnie

$$\mu = \frac{\langle v \rangle}{\varepsilon}$$

$$D = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)(v - \langle v \rangle) \rangle$$

wartości średnie wyznaczone są dla pewnego przedziału czasu dla grupy symulowanych cząstek

Współczynnik dyfuzji można wyznaczyć także przy użyciu **funkcji autokorelacji prędkości** $C(t)$
 - która jest miarą szybkości utraty informacji ze względu na oddziaływanie z otoczeniem (dyfuzja)

$$x(t) = x(0) + \int_0^t v(t') dt'$$

$$\delta x = x - \langle x \rangle$$

$$\delta v = v - \langle v \rangle$$

$$x - \langle x \rangle = x(0) + \int_0^t v(t') dt' - \langle x(0) \rangle - \int_0^t \langle v(t') \rangle dt' = \delta x(0) + \int_0^t \delta v(t') dt'$$

$$\begin{aligned} D &= \langle (x - \langle x \rangle)(v - \langle v \rangle) \rangle = \left\langle \left(\delta x(0) + \int_0^t \delta v(t') dt' \right) \delta v(t) \right\rangle \\ &= \underbrace{\langle \delta x(0) \delta v(t) \rangle}_{\approx 0} + \left\langle \int_0^t \delta v(t') dt' \delta v(t) \right\rangle \end{aligned}$$

- dla dużych t , prędkości stają się niezależne od początkowego położenia

$$\tau = t - t' \quad \implies \quad D = \int_0^t \langle \delta v(t) \delta v(t - \tau) \rangle d\tau$$

w stanie ustalonym można oczekiwać, że równoważne będzie wyrażenie korelacyjne

$$\langle \delta v(t) \delta v(t - \tau) \rangle = \langle \delta v(t) \delta v(t + \tau) \rangle \equiv C(\tau)$$

$$D = \int_0^\infty C(\tau) d\tau$$

- funkcję autokorelacji wyznacza się rejestrując prędkość wybranej cząstki dla długiego przedziału czasu, następnie obliczając pierwszy moment oraz uśredniając po czasie iloczyn w brackecie dla różnych przesunięć τ

Propagacja cząstek w fazie swobodnego lotu

- symulacje MC wykonuje się najczęściej dla półmetali, półprzewodników, gdyż te są istotne z punktu widzenia zastosowań w elektronice
- w dynamice lotu należy uwzględnić fakt iż cząstki mogą znajdować się w różnych pasmach, a to oznacza różną zmianę relacji dyspersji i np. masy efektywnej

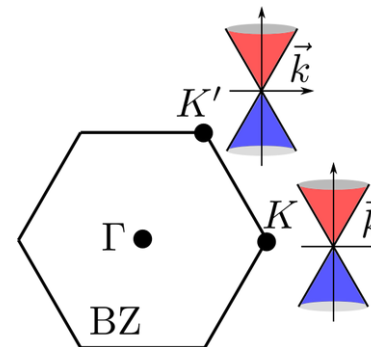
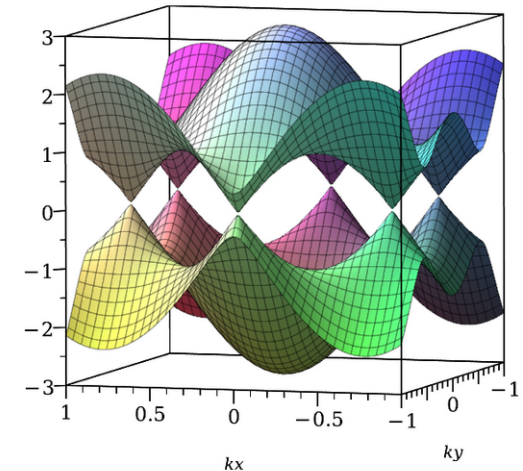
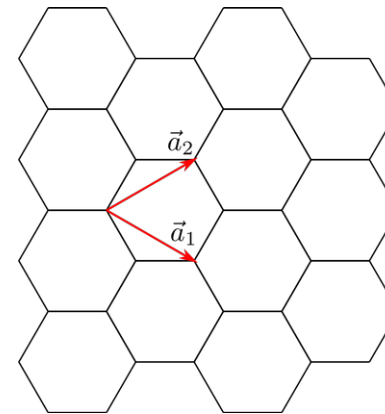
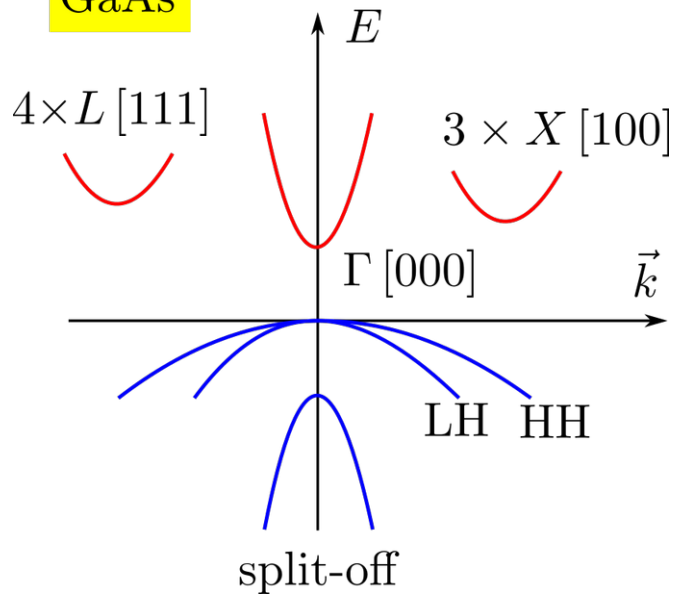
$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

$$\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = -e\vec{\varepsilon}$$

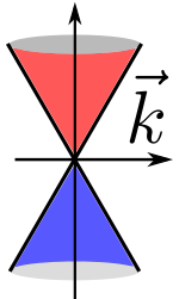
$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$$

Grafen / Silicen

GaAs



- w materiale Diracowskim relacja dyspersji energii jest liniowa (pomijamy trigonal-warping)



$$E(k) = \hbar v_F |\vec{k}| \quad v_F = 10^6 \text{ m/s}$$

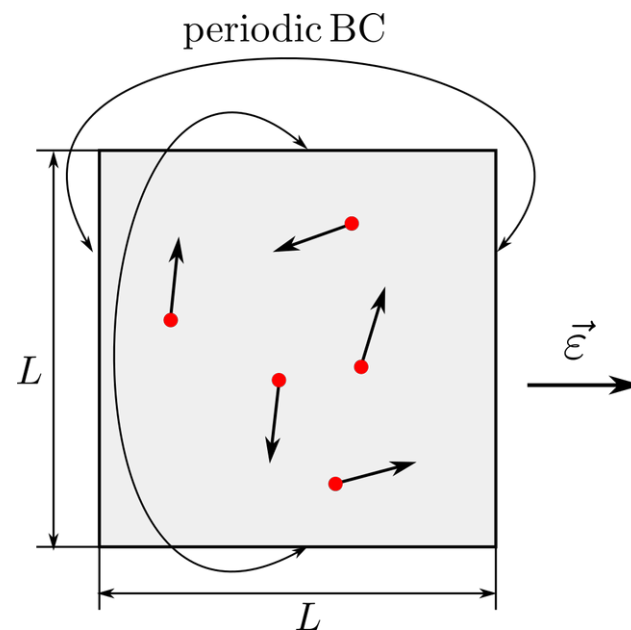
$$\vec{V}_{gr} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \vec{v}_F = v_F \frac{\vec{k}}{k} \quad \begin{cases} v_x = v_F \frac{k_x}{k} \\ v_y = v_F \frac{k_y}{k} \end{cases}$$

- na nośniki działają pole elektryczne które powoduje zmianę wektora falowego (**energii**), ale nie zmienia długości wektora prędkości

$$\vec{\varepsilon} = [\varepsilon_x, \varepsilon_y] \quad \begin{cases} \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{q}{\hbar} \vec{\varepsilon} \\ \frac{d\vec{r}}{dt} = v_F \frac{\vec{k}}{k} \end{cases}$$

- równania ruchu, które rozwiązuje się numerycznie (RK2 wystarczy, bo ruch przyśpieszony nie trwa długo)

- w najprostszym przypadku obliczenia prowadzimy na małym wycinku o powierzchni $L \times L$ wykorzystując okresowe warunki brzegowe (PWB)
- pozycja startowa cząstek jest nieistotna, po dłuższym czasie symulacji, cząstki randomizują swoje położenie oraz kierunki prędkości w wyniku wielokrotnych rozproszeń np. na fononach
- chcąc wyznaczyć funkcję autokorelacji prędkości należy śledzić trajektorię wybranej cząstki (lub grupy cząstek) przez dłuższy okres czasu uwzględniając PWB



Modelowanie rozpraszania na fononach

- nośniki w wyniku oddziaływania z siecią atomową mogą absorbować lub emitować fonony
- ze względu na relację dyspersji fonony dzielimy na dwie grupy:
 - akustyczne
 - optyczne
- natomiast w zależności od kierunku drgań na:
 - L – podłużne
 - T – poprzeczne, ale leżące w płaszczyźnie w której porusza się nośnik
 - Z – poprzeczne, wychylenia atomów skierowane prostopadle do płaszczyzny sieci
- prawdopodobieństwo oddziaływania silnie zależy od: (1) temperatury i (2) energii nośników
- oddziaływanie może prowadzić do pozostania w danym podpasmie (intravalley) lub spowodować przeniesienie do innego podpasma (intervalley)
- oddziaływanie zmienia wektor falowy k nośnika, który jest fermionem, zatem obowiązuje go **zakaz Pauliego**
 - w półprzewodnikach **niezdegenerowanych** ($f \ll 1$) rozpraszanie ze zmianą k nie stanowi problemu
 - ale dla **układów zdegenerowanych** ($f \sim 1$) rozpraszanie może zostać zablokowane ze względu na brak dozwolonego stanu po rozproszeniu
 - w przypadku zdegenerowanym konieczne jest wyznaczanie na zmian funkcji rozkładu $f(k)$ w trakcie symulacji
- rozpraszanie na fononach jest izotropowe – kąt po rozproszeniu ma wartość losową

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}' = k' [\cos \theta, \sin \theta], \quad \theta = 2\pi U, \quad U \sim \mathcal{U}(0, 1)$$

- prawdopodobieństwo rozproszenia na fononach akustycznych w pobliżu punktu Γ (z relacji dyspersji fononów), to rozpraszanie wewnątrzprasmowe

$$\Gamma_{k,\nu}^{(1)} = \frac{4D_1^2 k_B T}{\hbar^3 v_F^2 \rho v_\nu^2} E_k$$

D_1 – potencjał deformacyjny z rachunku zaburzeń 1-rzędu
 T – temperatura
 E_k – energia nośnika
 ρ – gęstość materiału
 v_ν - prędkość dźwięku modu

- prawdopodobieństwo rozpraszania na fononach optycznych lub akustycznych na granicy strefy Brillouina

$$\Gamma_{k,\nu}^{(2)} = \frac{D_0^2}{2\hbar^2 v_F^2 \rho \omega_\nu} \left[\underbrace{(E_k - \hbar\omega_\nu) N_\nu}_{\text{absorpcja}} + \underbrace{(E_k - \hbar\omega_\nu)(N_\nu + 1)\theta(E_k - \hbar\omega_\nu)}_{\text{emisja}} \right]$$

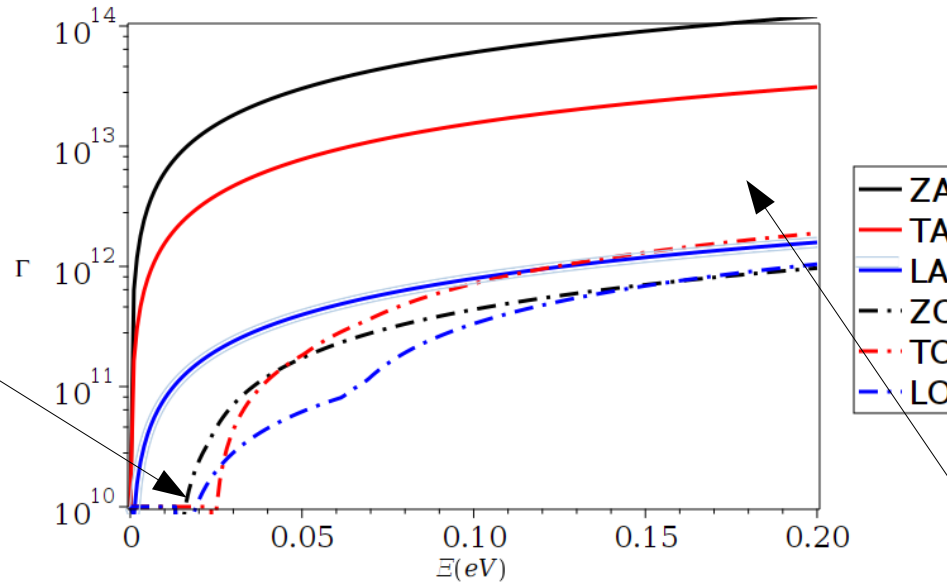
$$N_\nu = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

- liczba fononów danego typu

D_0 – potencjał deformacyjny z rachunku zaburzeń 0-wego rzędu
 $\hbar\omega_\nu$ – energia fononu
 θ – funkcja Heaviside'a (emisja to proces progowy)

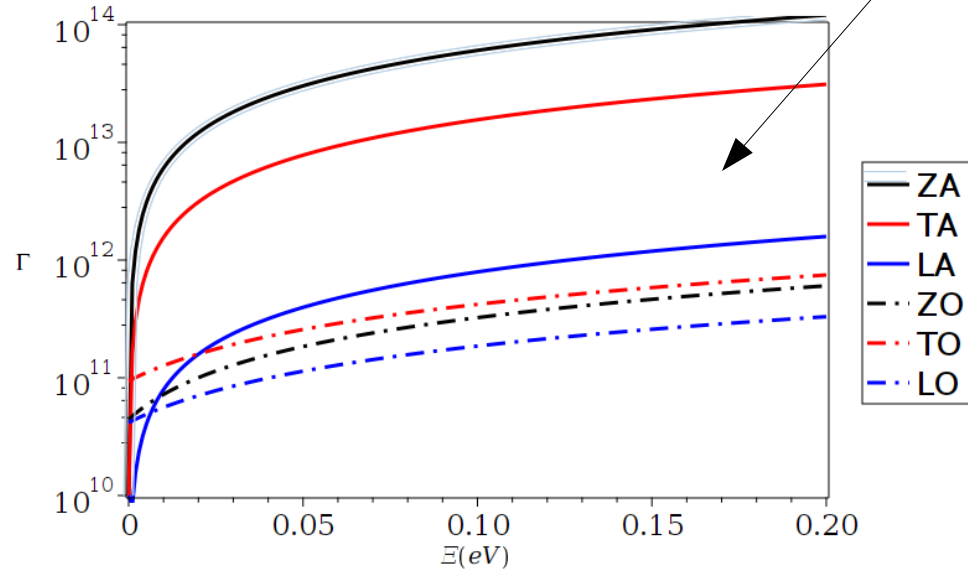
Zależność energetyczna częstości emisji / absorpcji fononu w silicenie

Phonon emission, T=300K



częstość rozproszeń rośnie wraz z energią, spodziewamy się że dla wysokich pól elektrycznych nastąpi degradacja ruchliwości

Phonon absorption, T=300K



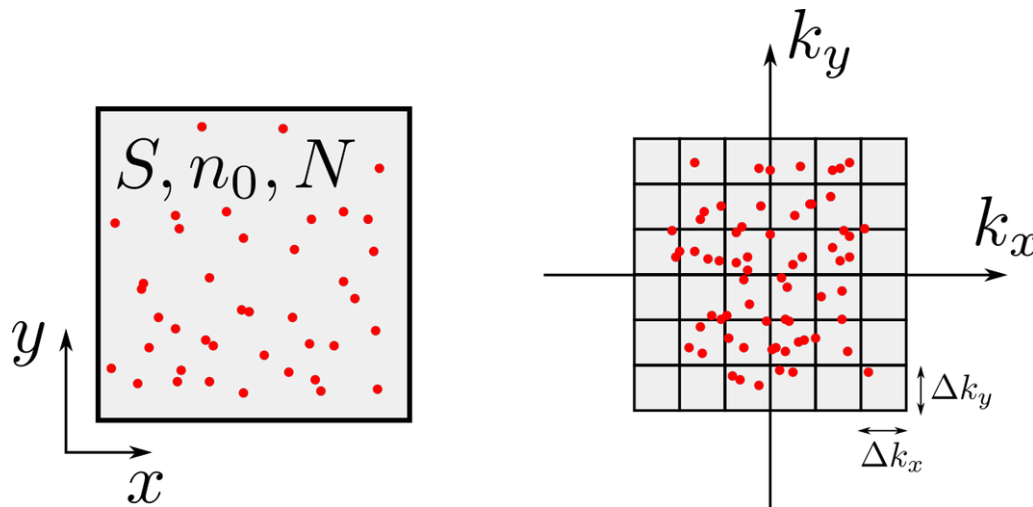
Półprzewodniki zdegenerowane – zakaz Pauliego

BTE z wbudowanym zakazem Pauliego ma postać

$$\frac{\partial f(\vec{k}, t)}{\partial t} - \frac{e}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, t) = \sum_{\vec{k}'} \left[f(\vec{k}', t) R(\vec{k}', \vec{k}) \underbrace{(1 - f(\vec{k}, t))}_{Pauli} - f(\vec{k}, t) R(\vec{k}, \vec{k}') \underbrace{(1 - f(\vec{k}', t))}_{Pauli} \right]$$

↑
 prawdopodobieństwo obsadzenia
 nowego stanu

- oprócz propagacji cząstek w przestrzeni konieczne jest monitorowanie funkcji rozkładu $f(k)$, aby to zrobić konieczne jest podzielenie wycinka przestrzeni wektora falowego na komórki, w których może jednocześnie przebywać pewna maksymalna liczba elektronów N_c



n_0 – zakładana gęstość cząstek w układzie

N – liczba symulowanych cząstek

$$S = \frac{N}{n_0} = L^2 \quad \text{– powierzchnia układu}$$

$$\Omega_c = \Delta k_x \Delta k_y \quad \text{– powierzchnia komórki w przestrzeni } k$$

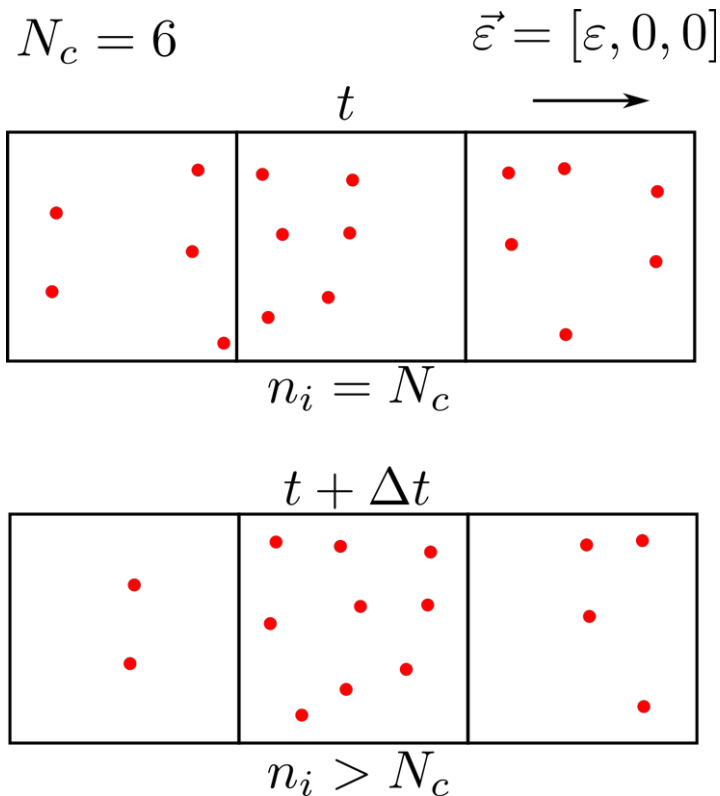
$$N_c = \frac{g_s \Omega_c}{(2\pi)^2} \quad \text{– największa dopuszczalna liczba elektronów w komórce (raczej nie będzie całkowita)}$$

optymalna wartość: $N_c \sim 8-10$

$$\frac{(2\pi)^2}{S} \quad \text{– obszar zajmowany przez 1 stan w przestrzeni } k$$

$$g_s = 2 \quad \text{– degeneracja spinowa}$$

- zmiana liczby obsadzeń w komórce jest skutkiem dwóch procesów
 - zmiany wektora k podczas fazy swobodnego lotu (przyśpieszenie)
 - podczas rozpraszania na fononach
- o ile w trakcie rozpraszania możemy kontrolować N_c w komórkach, to w trakcie ewolucji czasowej takiej możliwości nie ma



- algorytm rozpraszania uwzględniający zakaz Pauliego

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$$

$$f(\vec{k}') < 1? \implies \mathcal{U}(0, 1) \sim U < (1 - f(\vec{k}'))? \implies \vec{k} \rightarrow \vec{k}'$$

- oraz modyfikacja usuwająca nadmiarowe elektrony z komórki

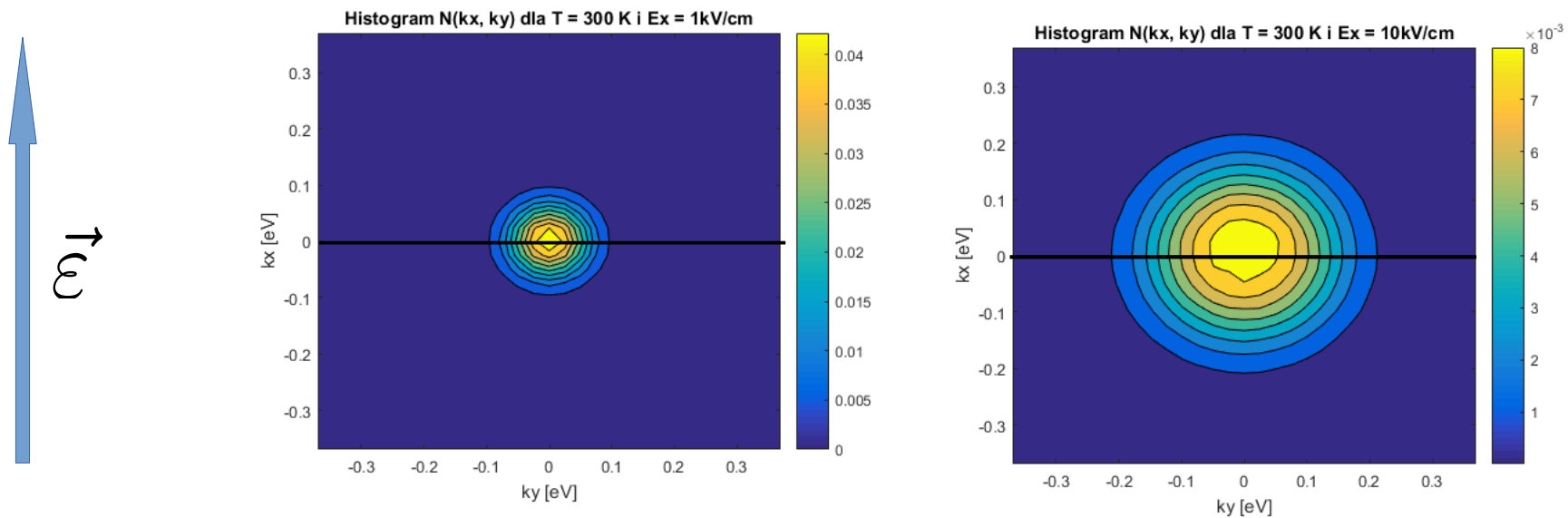
$$f(\vec{k}') > 1? \implies \mathcal{U}(0, 1) \sim U < \frac{n_i - N_c}{N_c}? \implies \vec{k}' \rightarrow \vec{k}$$

wybieramy jeden z elektronów i przesuwamy go do komórki k

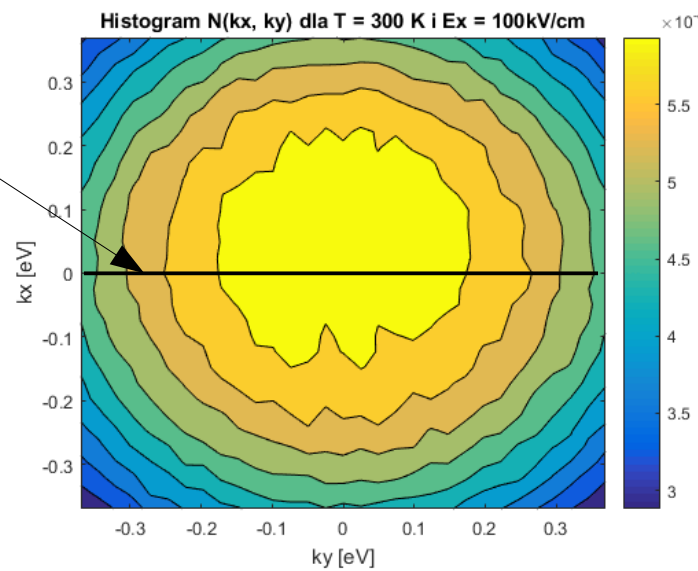
Uwaga:

o ile pierwszy proces ma podłoże fizyczne, to drugi jest tylko trikiem zapewniającym że w dłużym okresie czasu maksimum funkcji rozkładu tylko sporadycznie będzie przekraczać wartość 1.

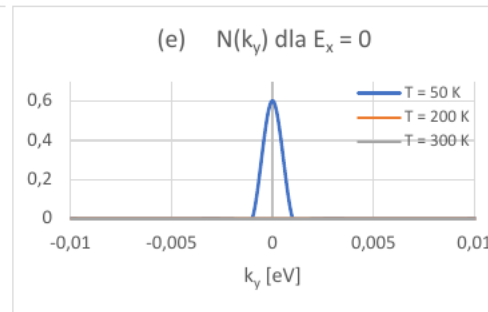
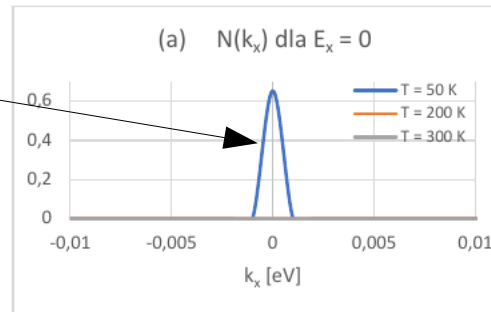
Wyniki symulacji MC dla silicenu (Olga Lysko, WFiIS, AGH, praca inżynierska, 2021)



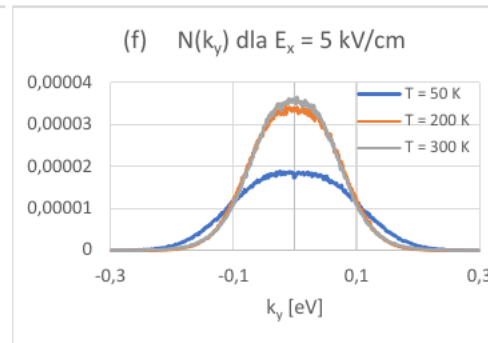
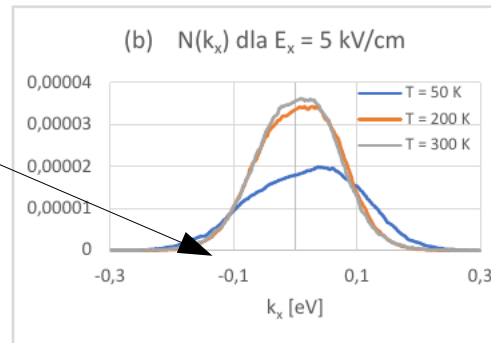
Narastające pole elektryczne spycha rozkład w kierunku narastającego potencjału (elektrony)



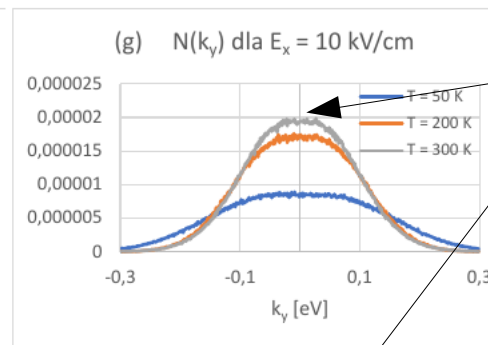
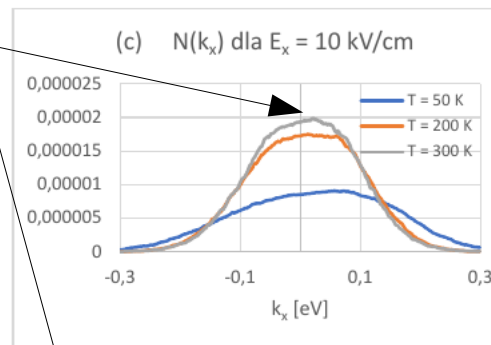
- gaz nie jest w pełni zdegenerowany $f \ll 1$ w niskiej T
- silna lokalizacja w k_x



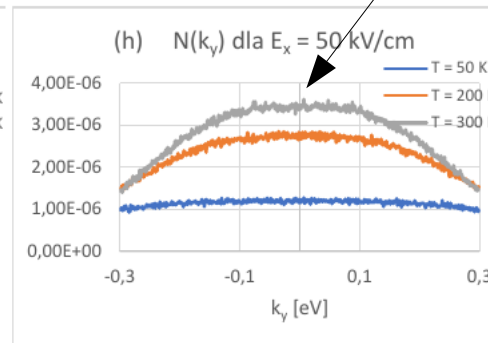
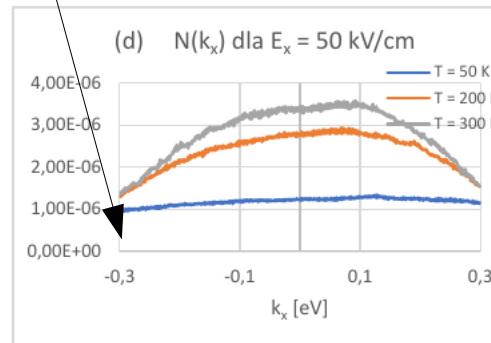
- wzrost pola rozmywa rozkład na większym obszarze k



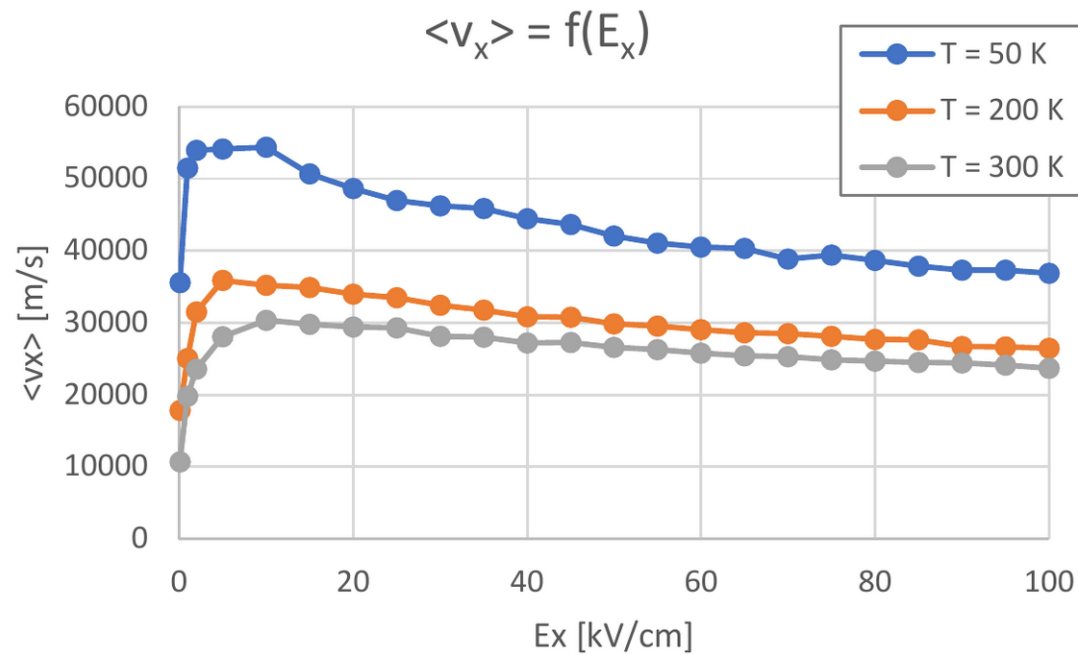
- maksimum rozkładu przesuwa się wzdłuż osi k_x



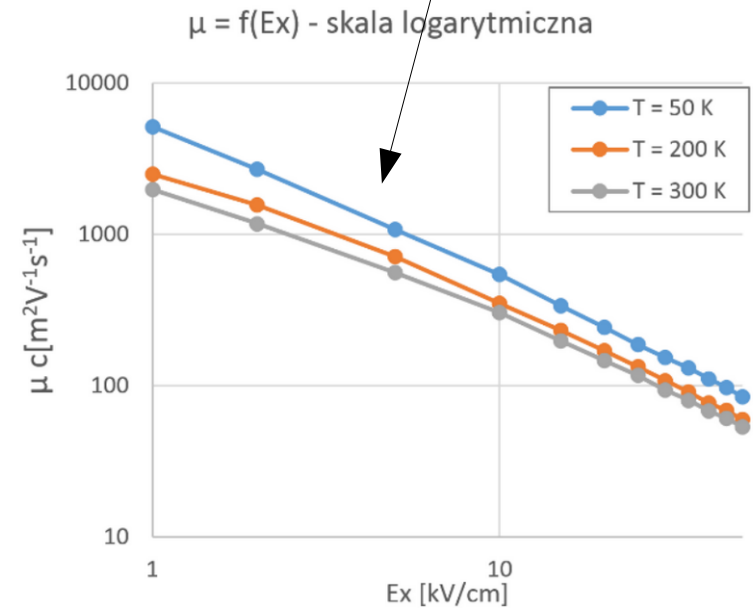
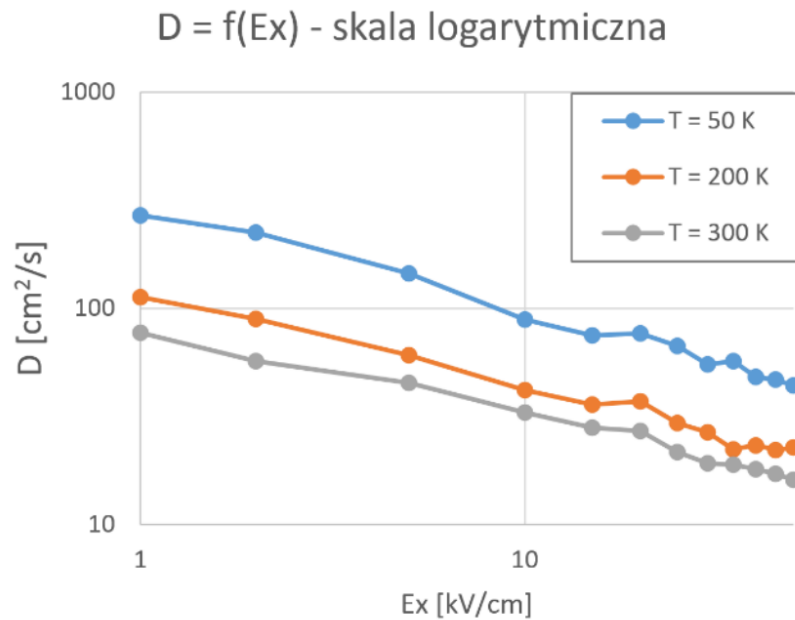
- pole rozmywa rozkład ale go nie przesuwa w k_y , tu pozostaje symetryczny



- wzrost natężenia pola elektrycznego prowadzi do szybkiej zmiany energii elektronów, co aktywuje procesy emisji fononów optycznych, w zasadzie częstość rozpraszania na fononach rośnie o kilka rzędów wielkości dla każdego typu rozpraszania
- wzrost częstości rozpraszania prowadzi do częstszego rozpraszania i randomizacji kierunku elektronu, w efekcie średnia prędkość w kierunku pola maleje



- ruchliwość największa w niskich temperaturach i niewielkich pól
- wzrost natężenia pola generuje wzrost częstości rozpraszania i spadek (degradację) ruchliwości



Rozkład energetyczny elektronów

$$p(E) = \frac{E}{(k_B T)^2} e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

- proces termalizacji elektronów przebiega szybciej w wyższej temperaturze

uwaga:

liczba iteracji jest duża ponieważ nie zastosowano optymalizacji dla self-scatteringu

