

SPİNTRONİK SİSTEMLERİN MONTE CARLO SİMÜLASYONU

*İbrahim SAVRAN**

Özet: Çalışmada gerek teorik gerekse deneysel olarak oldukça popüler olan spintronik alanında Monte Carlo simülasyon yöntemi ile spin enjekte edilmiş yarıiletkenlerde spin sönümlenmesi incelenmiştir. Simülasyondan elde edilen sönümlenme süresinin D'yokonov'un analitik sonucu ile uyumlu olduğu görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Spin, spintronik, Monte Carlo simülasyonu

Spintronics Simulation with Monte Carlo Method

Abstract: In this paper, we demonstrated a Monte Carlo model for a spin injected semiconductor device. Such a different and simple method enables us to generate robust spin structures whose properties can be tuned by the structure's length. As a result, we pointed out that the spin polarization decay time of the simulation is reasonable comparing with D'yokonov's analytic derivations.

Key Words: Spin, Spintronics, Monte Carlo simulation

1. GİRİŞ

Elektronikte, Moore yasası gereği her yeni nesilde transistörler küçültülmüştür. Küçülen transistörlerin anahtarlama süresi daha kısa olduğundan devrelerin performansı artmasına karşılık, entegrelerin statik güç tüketimi artmıştır. Statik güç tüketimi problemi, beraberinde ısınma problemini de getirmiştir. Üretici firmalar küçültmeyi yavaşlatıp ve çekirdek sayısını artırarak, güç ve ısı probleminde geçici çözüm bulmuşlardır. Güç ve ısı problemini tamamen ortadan kaldırmak için klasik üretim normlarının dışına çıkılması gerekmektedir. Farklı önermeler yapılsa da, elektronun spin özelliği gelecek nesil sistemlerin trendini belirlemede, uygulanabilir teknolojiler listesinin ön sıralarında yer almaktadır (ITRS, 2003).

Spin-bazlı sistemlerin geliştirilmesiyle günümüz aygıtlarının yerini daha farklı çalışma prensibine sahip üstün devrelere bırakması düşünülmektedir (Prinz, 1995; Wolf ve diğ., 2001; Sarma, 2001; Awschalom ve diğ., 2002; Akinaga ve Ohno, 2002; Jonker, 2003; Zutic ve diğ., 2004). Son yıllarda ümit verici gelişmeler olmuştur. Bunlar arasında hard diskler için metal okuma başlığı, spin-bazlı manyetik algılayıcılar ve sabit-konumlu (nonvolatile) bellekler örnek olarak verilebilir.

Bugünün teknolojisinde, tranzistörlerin anahtarlama süresi pikosaniyeler seviyesinde olduğu göz önünde bulundurulursa, oda sıcaklığında birkaç nanosaniye spin polarizasyonu sağlamak önemli bir ilerlemedir (Ohno ve diğ., 1999). Buna ilave olarak, GaAs kuantum kuyusunda gerilim uygulanarak spin kontrolü gerçekleştirilmiş (Karimov ve diğ., 2003), ve yarı-iletken bir sistemde spin akım kontrolü yapılabilmektedir (Stevens ve diğ., 2003).

* University of South Carolina, Computer Science and Engineering, SC 29208, Columbia, USA.
İletişim Yazarı: İ. Savran (savran@email.sc.edu)

Spintronik cihazlarda bilgi, spinleri yukarı veya aşağı yönlendirmekle saklanabilir. Bilginin taşınması ise foton ile gerçekleştirilebilir. İletilen bilgi diğer uçtaki birim tarafından bir algılayıcıyla okunabilir (Jonker, 1995; Lannon ve diğ., 2003).

Bu çalışma toplam beş bölümden oluşmaktadır. İkinci bölüm, konuyla ilgili genel bilgiler ve tanımlarından oluşmaktadır. Üçüncü bölüm Monte Carlo simülasyon modelinin ayrıntılarını içermektedir. Sonraki bölümde simülasyonunun algoritması açıklanmıştır. Son bölüm, simülasyon sonuçlarını ve gelecekte yapılması planlanan çalışmaların özetini içermektedir.

2. TEMEL BİLGİLER

Simülasyon ile ilgili ayrıntılara geçmeden önce konuyla ilgili tanımların verilmesi konunun anlaşılması için faydalı olacaktır. Spin: (dönüş), 'yukarı' veya 'aşağı' olmak üzere atom altı parçacıkların sahip olduğu manyetik enerji durumu olarak ifade edilebilir. Spin, s , kuantum bir özelliktir ve bir parçacığın açısal momentumudur. Ancak spin, kuantum özelliğinden dolayı klasik açısal momentumdan farklıdır. Yarı-iletkenlerin sistemlerde spin elektronlarla taşınmaktadır ve elektronun spinini $1/2$ dir. Spin dinamiği manyetik etkileşimle kontrol edilebilmektedir. Spini kuantalamak için kullanılan sabite Bohr magneton sabiti denir ve bu sabit aşağıda verilmiştir:

$$\mu_B = 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

Spintronik: (magnetoelektronik veya spin-tabanlı elektronik), elektronun kullanılan özelliklerinin (yük ve serbest hareket) yanı sıra, bir kuantum özellik olan spinin aygıtlarda-devrelerde kullanılmasını temel alan mühendislik alanıdır. D'yakonov spintronik devrelerin çalışma prensibini şu şekilde tarif etmiştir: "Spintronik devrelerin çalışma prensibini birkaç aşamada anlatılabiliriz: Yarı iletkenlerde spin yoğunluğu oluşturmak; harici bir etkiyle bu spinini manipüle etmek ve son olarak da yarı iletkenin sonuç spin durumunu okuyabilmektir."

Monte Carlo Yöntemi: İlk olarak 1940'lı yıllarda, Von Neumann ve Ulam'ın çalışmalarında karşılaştıkları matematiksel olarak karmaşık ve deneysel olarak çözümü çok pahalı olan nükleer savunma problemlerini çözmek için kullanılan stokastik bir simülasyon metodudur.

Manyetik Alanın Spinle İlişkisi: Bir harici manyetik alana \vec{B} maruz kalmış spinin sahip olduğu potansiyel, Zeeman terimi ile ifade edilir:

$$U = \frac{g\mu\sigma\vec{B}}{2} \quad (1)$$

Formülde geçen g etkin g -faktörüdür. σ ise Pauli spin matrislerinin bir vektörünü temsil eder (Karimov ve diğ., 2003). Zeeman formülü ile verilen etkileşim, harici manyetik alana sahip bütün sistemler için önemlidir.

Spin Polarize Vektörü: Spin polarize yoğunluğu, P, bir vektörle ifade edilir ve aşağıda verilen yoğunluk matrisinden türetilir. Yoğunluk matrisi bir tek parçacığın (elektronun) polarizasyonunu belirtmektedir.

$$\rho_{\sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+P_z & P_x-iP_x \\ P_x+iP_x & 1-P_z \end{pmatrix} \quad (2)$$

3. MONTE CARLO SİMULASYON MODELİ

Monte Carlo simülasyon yöntemi, yarıiletken yapılarda yüklü parçacıkların hareketini modellemede daha önceden kullanılmıştır (Hess, 1991; Tomizawa, 1993; Landau ve Lifshitz, 1997). Modelin esnekliğinden dolayı farklı kombinasyonlar incelenerek değişik aygıt tasarımlarının simülasyonu yapılabilmektedir. Sözü geçen kombinasyonlar arasından bir kaçını saymak istersek bunlar: saçınım mekanizması, maddenin kristal yapısı ve aygıtın boyutudur (Tomizawa, 1993).

Saçınım olayı, aygıtı oluşturan atomların dizilişine, sıcaklığa ve aygıtın boyutlarına bağlıdır. Bu etkenler dikkate alınarak Fermi-altın kuralı ile saçınım oranı belirlenir. Simülasyon süresince her saçınım olayı aralığında, bir parçacık lokalize edilmiş trajektorisinde yol alır. Elektronların saçınım süreleri, Monte Carlo yöntemi gereği bir birinden tamamen bağımsızdır.

Monte Carlo metodunun tek olumsuz yanı, çok kısa zaman aralıklarıyla sayısal hesaplamalar gerektiğinden simülasyon süresi diğer yöntemlere göre uzun olmaktadır. Simülasyon süresini kısaltmak BBB için önerilen algoritma lokalite prensibi göz önünde bulundurularak sadeleştirilebilir. Sadeleştirme konusunu sonuçlar ve gelecek çalışmalar bölümünde tekrar değinilecektir.

$$\rho_i = \begin{pmatrix} 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Model, farklı veri yapıları kullanılarak geliştirilebilir. Elektronun spin bilgisini temsil için iki veri yapısı önerilmiştir bunlar: polarize matrisi (Fischetti ve Laux, 1995), ve polarize vektörü' dür (Saikin ve diğ., 2003). Bu çalışmada, modelin veri yapısı olarak spin matrisi kullanılmıştır. Simülasyonun başlaması, için elektronun spininin z yönünde set edilmesi (3) nolu formülle gösterilmiştir.

$$\rho_i = \begin{pmatrix} 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 1.0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$\rho_i = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.0 \\ 0.0 & 0.5 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Eğer spin -z yönünde set edilecekse o zaman dördüncü eşitlik kullanılır. Ya da elektronun spininin nötr olması istenebilir. Bu durumda ise beşinci yoğunluk matrisi kullanılabilir. Parçacığın hareketi dikkate alınarak spin matrisi, aşağıdaki formül (6) ile her adımda (δt) güncellenir. Simülasyonun adım süresi çok kısa olduğu için ($\delta t = 1e - 15s$), spin bağımlı Hamilton matrisinde bir değişiklik olmadığı kabul edilir.

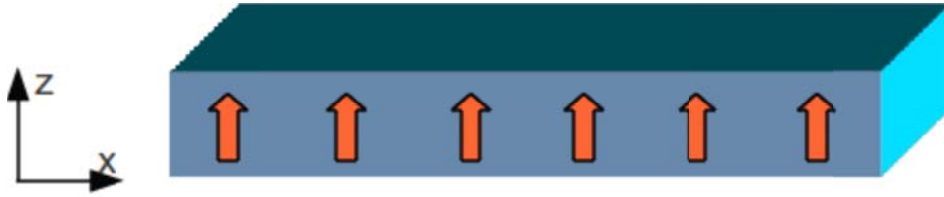
Genelde, Monte Carlo simülasyonlarında her bir simülasyon birimi, tek bir parçacığı veya bir grup elementi ifade eder. Yarı-iletken modellemeleri incelendiğinde her birim bir grup aynı karakteristiğe sahip elektronu veya boşluğu tanımlar. Bu çalışmada yoğunluk

matrisini güncelleyen formülde etkin elektron kütlesi kullanıldığı için her bir simülasyon elemanı bir elektronu örnekler.

$$\rho_i(t + \sigma t) = H\rho_i(t)H^\dagger \quad (6)$$

Yük dağılımı her örnekleme zamanında Poisson formülü kullanarak hesaplanır (Bournel, 1998). Burada v parametresi parçacığın belirlenen hız bileşenidir.

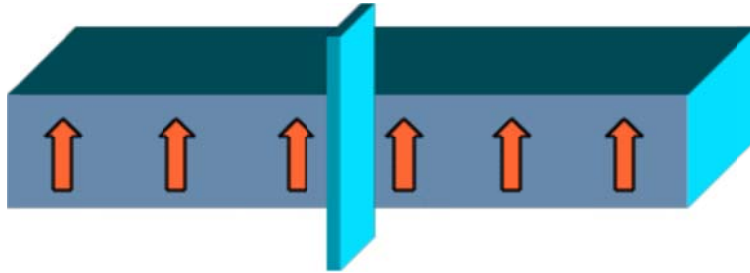
Model başlamadan önce bütün elektronlar uniform dağılımla aygıt üzerinde rassal olarak dağıtılır. Bütün elektronların hızları aynı (10^5 m/s) olmasına rağmen hız vektörünün bileşenleri yine rassal dağılımla belirlenir. Başlangıç durumunda, set edilecek değerlerden bir diğeri ise ilk saçınım süresinin hesaplanmasıdır. Son olarak bütün elektronlar +z yönünde polarize edilir (Şekil 1).



Şekil 1:
Yarı iletken sisteme spinlerin üniform enjekte edilmesi

Simülasyonun hazırlık aşaması tamamlandıktan sonra, çekirdek fonksiyon devreye girer ve her bir kısa zaman aralığı için bütün simülasyon ögesinin polarizasyon matrisi ve konumu güncellenir. Herhangi bir parçacık sınıra geldiğinde parçacığın hareketi için birkaç durum söz konusudur. Bunlardan ilki parçacığın yansması, bir diğeri ise cismin uygun istikamette saçınımı öngörülebilir. Bu deneyde bütün simülasyon ögelerine (10^5 tane) kıyasla çok az parçacığın sınırdan olacağı varsayımıyla ve hesaplanması daha basit olduğu için cismin sınırdan yansıdığı kabul edilmiştir.

Simülasyonun aygıtın her bölgesinde ortalama aynı değerleri gösterip göstermediğini anlamak için aygıt Şekil 2' deki gibi parçalanıp spin yoğunluğu test edilebilir.



Şekil 2:
Sistemin kısa uzunluklarda spin yoğunluğunun hesaplanması

Bu çalışmamızda temel amaç, günümüz devre sistemlerinin spin iletim modelini anlamak ve özümlenen bilgilerle yeni nesil devrelerin tasarımına ışık tutmaktır.



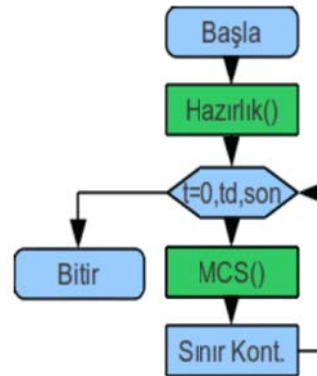
Şekil 3:
Simülasyon sonunda spin sönümlenmesi

Simülasyon süresince elektronların aygıt boyunca hareketinden dolayı spin yönelimleri değişir. Simülasyonun sonuna gelindiğinde normalize spin yoğunluğu minimum olur ($S \cong 0$) (bakınız Şekil 8).

4. MONTE CARLO SİMULASYONU

Monte Carlo simülasyon uygulamaları çoğunlukla hesap ağırlıklı ve bellek gereksinimi yüksek olan uygulamalardır. Bu nedenle modelleme için gerekli bellek ihtiyacı gözden kaçırılmamalıdır. Her bir elektronun bilgisi 24 bayt yer tuttuğu için simülasyon 100K eleman için 2.3MB, doğru orantılı olarak eleman sayısı 200K olarak belirlenirse 4.6MB belleğe ihtiyaç vardır.

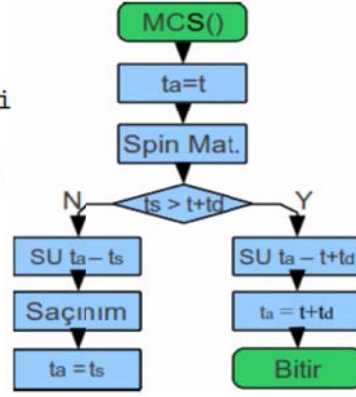
- 1- Başla
- 2- Hazırlık fonksiyonunu koştur.
- 3- Her 10 picosaniye zaman aralığı için (t_d)
 - a- Monte Carlo Simulasyonunu koştur.
 - b- Sınır kontrolü yap.
 - c- Normalize polarizasyon yoğunluğunu hesapla ve yazdır.
- 4- Bitir.



Şekil 4:
Monte Carlo Simülasyonu algoritması ve akış diyagramı

Daha fazla elemanlı deneyimlerde bellek gereksinimi günümüz minibilgisayarlarının tampon belleğine sığmayacak büyüklüğe erişir. Bu da uygulamanın zaten uzun olan süresine daha fazla uzatacaktır. Yazılımcıların bu önemli noktayı gözden kaçırmamaları ve problemin veri yapısını lokalite prensibine göre dizayn etmeleri gerekir.

- 1- Başla
- 2- Zaman atamasını yap,
- 3- Spin matrisini güncelle,
- 4- Eğer saçınım süresi >örnekleme süresi
Evet:
 - a) $(t_a - t + t_d)$ serbest uçuşu hesapla
 - b) Zaman ayarlamasını gerçekleştir.
 - c) Bitir.Hayır:
 - a) $(t_a - t_s)$ serbest uçuşu hesapla
 - b) Yeni saçınım zamanını belirle
 - c) Zaman ayarlamasını gerçekleştir.



Şekil 5:

Monte Carlo spin yoğunluğu metodunun algoritması ve akış diyagramı

Monte Carlo simülasyonunda eleman sayısı da oldukça önemlidir. Grafik 6 yalnızca 1000 elektronlu deneyin sonucunu göstermektedir. Grafik incelendiğinde, beklenen sonuçlarla hiçbir ilgisinin olmadığı görülecektir.

Bir sonraki grafik ise eleman sayısı 10K olan simülasyonun sonucudur. İlk 6-7 örneklemede, bir anormallik gözlenmemiştir. Fakat simülasyonun ilerleyen örnekleme sonuçları incelendiğinde gürültüden kaynaklanan dalgalanmaların olduğu fark edilebilir.

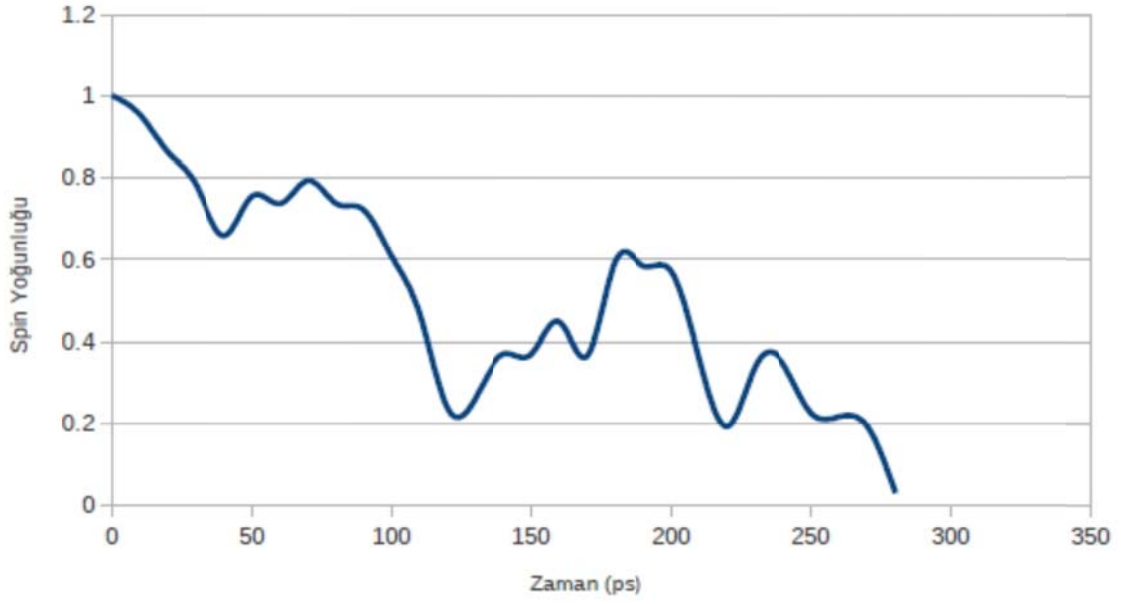
Bütün simülasyon metodlarında olduğu gibi, gürültüleri minimize etmek için yeteri çoğunlukta simüle elemanı kullanmak gerekir. Fakat fazla eleman sayısı, simülasyonun süresiyle birebir orantılı olduğu için, optimum sayı belirlenmelidir. Bu çalışmada simülasyon 100K, 200K ve 500K elemanla denenmiş, sonuçlarda farklılık gözlemlenmediğinden ve simülasyonun süresi de göz önünde bulundurularak, 100K elemanlı simülasyon sonuçları dikkate alınmıştır (bakınız şekil 8).

Örnekleme her 10ps' de yapılmıştır. Grafiklerden de anlaşılacağı gibi simülasyon toplam süresi 300ps' dir.

5. SONUÇLAR ve GELECEK ÇALIŞMALAR

Bu çalışmada spintronik cihazların temel davranışları modellenmiştir. Temel amaç yarı-iletken tek boyutlu bir aygıtta spini aynı yönde set edilmiş elektronların zamana bağlı olarak spin sönümlenmesi modellenmiştir. Aygıt uzunluğu 0:6m, ve toplam simüle eleman sayısı 100K olarak alınmış ve sonuç Şekil 8' de gösterilmiştir. Analitik sonuçlar ile simülasyon sonuçlarının uyumluluğu için bakınız (Slipko ve diğ., 2011).

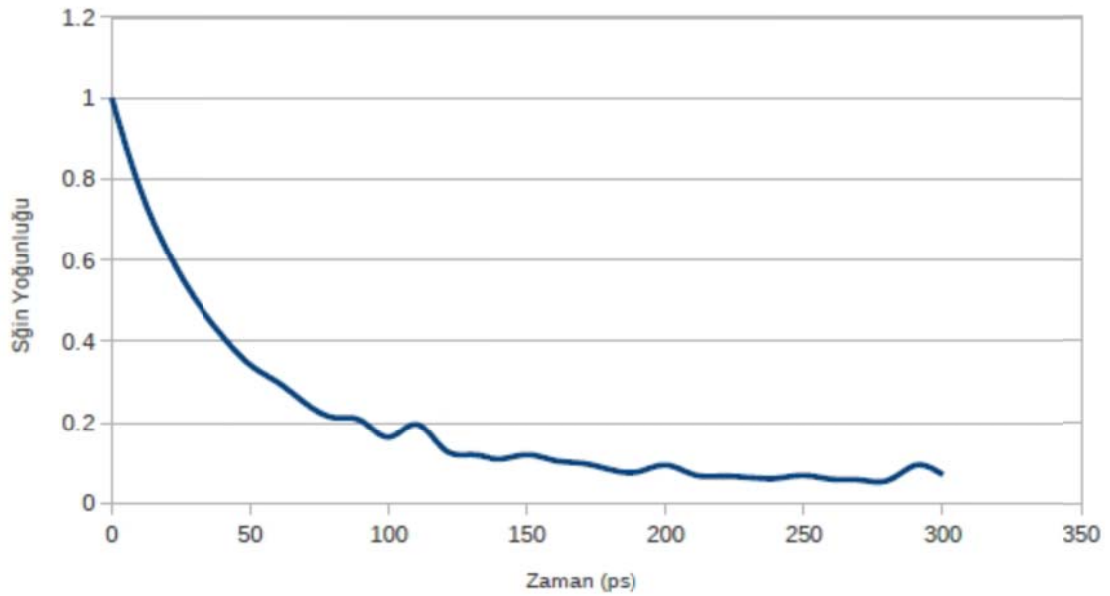
Spin Yoğunluğu-Zaman Grafiği



Şekil 6:

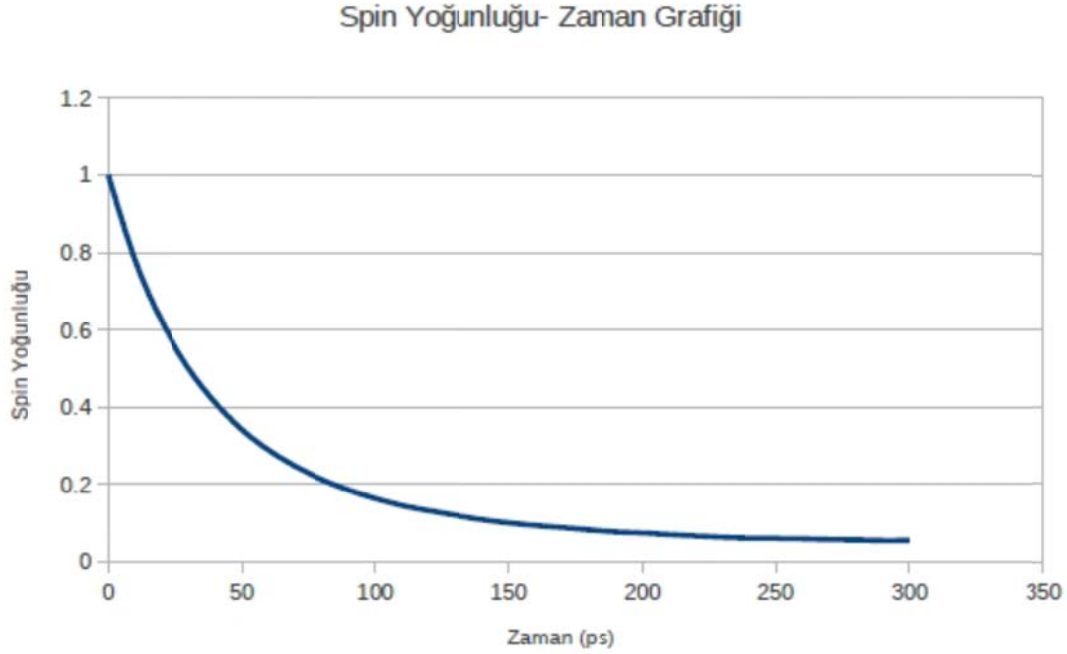
1K elemanlı sistemin spin yoğunluğunun zamana bağlı değişimi

Spin Yoğunluğu-Zaman Grafiği



Şekil 7:

10K elemanlı sistemin spin yoğunluğunun zamana bağlı değişimi



Şekil 8:
100K elemanlı sistemin spin yoğunluğunun zamana bağlı değişimi

Bu çalışmada, simülasyon süresi, parçacık sayısı ile orantılı artmaktadır. Monte Carlo simülasyon uygulamalarının problemlerinin en başında zaman gelmektedir. Bu nedenle farklı parçacık sayılı sistemler modellenmiştir (bakınız Şekil 6, 7 ve 8). 1K elemanlı sistemin gerçeği yansıtmadığı gözlemlenebilir. 10K lık simülasyon sonuçları ise ilk 5 veya 6 örnekleme için uygun olduğu gözlemlenmiş fakat simülasyon ilerleyen zamanında sapmalar gözlemlenmiştir. Bu problemi bertaraf etmek için, paralel sistemler kullanılabilir. Paralel sistemlerle daha fazla eleman kullanılarak gürültü minimize edilebilir. Ayrıca daha önce de belirtildiği gibi yoğunluk matrisi bir tek elektronun polarizesini göstermektedir. Matrisin bu özelliği simülasyonun paralel sistemlere adapte edilmesi kolaylaştırmaktadır.

KAYNAKLAR

1. Akinaga, H., Ohno, H. (2002). Semiconductor Spintronics, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 1, 1931.
2. Awschalom, D.D., Flatte, M.E., Samarth, N. (2002). Spintronics, *American Science*, 286, 66-73.
3. Bournel, A., Dollfus, P., Bruno, P., Hesto, P. (1998). Gate-induced Spin Precession in an In_{0.53}Ga_{0.47} as Two Dimensional Electron Gas, *European Physical Journal - Applied Physics*, 4, 1-4.
4. Das Sarma, S. (2001). Spintronics, *American Science*, 89, 516-523.
5. Fischetti, M.V., Laux, S.E. (1995). DAMOCLES Theoretical Manual, IBM, Yorktown Heights.
6. Henini, M., Airey, R. (2003). High Temperature Gate Control of Quantum Well Spin Memory, *Physical Review Letters*, 91, 246601/14.
7. Hess, K. (1991). Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond, *Kluwer Academic Publishers*, Boston.

8. <http://public.itrs.net/Files/2003ITRS/Home2003.htm>. Konu: Gelecekte yarıiletkenlerin kullanımı, Erişim Tarihi:02.07.2011.
9. Jonker, B.T. (1999). Polarised Optical Emission due to Decay or Recombination of Spin-polarised Injected Carriers, *Patent 5874749*, USA.
10. Jonker, B.T. (2003). Progress Toward Electrical Injection of Spin-polarised Electrons into Semiconductors, *Proceedings on the IEEE*, 91, 727-740.
11. Karimov, O.Z., John, G.H., Harley, R.T., Lau, W.H., Flatte, M.E., Henini, M. and Airey, R. (2003). High temperature gate control of quantum well spin memory, *Physical Review Letters*, 91, 246601/1-4.
12. Landau, L.D., Lifshitz, E.M. (1997). Quantum Mechanics, *Butter-worth-Heinemann*, Oxford.
13. Lannon, J.M., Dausch, D.E., Temple, D. (2003). High Sensitivity Polarized Discriminator Device, *Patent 5874749*, USA.
14. Ohno, Y., Terauchi, R., Adachi, T., Matsukura, F., Ohno, H. (1999). Spin Relaxation in GaAs (110) Quantum Wells, *Physical Review Letters*, 83, 4196-4199.
15. Prinz, G. (1995). Spin-polarised Transport, *Physical Today*, 48 (4), 58-63.
16. Saikin, S., Shen, M., Cheng, M.C., Privman, V. (2003). Semiclassical Monte Carlo Model for In-plane Transport of Spin-polarised Electrons in III-V Heterostructures, *Journal of Applied Physics*, 94, 1769-1775.
17. Shen, M., Saikin, S., Cheng, M.C. (2004) Monte Carlo Modeling of Spin Injection Through a Schottky Barrier and Spin Transport in a Semiconductor Quantum Well, *Journal of Applied Physics*, 96, 4319-4325.
18. Slipko, V.A., Savran, I., Pershin, Y.V. (2011). Spontaneous Emergence of Persistent Spin Helix from Homogeneous Spin Polarization, *Physics Review Letters*, B, 83, 193-197.
19. Stevens, M.J., Smirl, A.L., Bhat, R.D.R., Najmaie, A., Sipe, J.E., Van Driel, H.M. (2003). Quantum Interference Control of Ballistic Pure Spin Currents in Semiconductors, *Physics Review Letters*, 90, 136603/1-4.
20. Tomizawa, K. (1993). Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices, *Artech House*, London.
21. Wolf, S.A., Awschalom, D.D., Buhrman, R.A., Daughton, J.M., Von Molnar, S., Roukes, M.L., Chtchelkanova, A.Y., Treger, D.M. (2001). Spintronics: A Spin-based Electronics. Vision for the Future, *Vision for the Future, Science*, 294, 1488-1495.
22. Zutic, I., Fabian, J., Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and Applications, *Physical Reviews X*, 76, 323-410.

Makale 20.05.2011 tarihinde alınmış, 31.03.2012 tarihinde düzeltilmiş, 03.04.2012 tarihinde kabul edilmiştir.

