

МОДЕЛИРАНЕ НА КИНЕТИКАТА НА ТОКОВИ НОСИТЕЛИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВИ ПРИБОРИ

Михаил Христов Недялков

ДИСЕРТАЦИЯ

ЗА ПРИСЪЖДАНЕ НА НАУЧНА СТЕПЕН

"Доктор на науките"

ПО НАУЧНА СПЕЦИАЛНОСТ

01.01.13 "МАТЕМАТИЧЕСКО МОДЕЛИРАНЕ И ПРИЛОЖЕНИЕ НА МАТЕМАТИКАТА"

Outline I

- 1 Авторска справка
- 2 Преглед
 - Мотивировка и актуалност на темата
 - Цел и Задачи
 - Структура
- 3 Глава 1: Моделиране на полупроводникови прибори
 - Монте Карло интегриране
- 4 Глава 2: Моделиране на класически транспорт
 - Преглед
 - Алгоритми за анализ на слаб сигнал
 - Нехомогенни едночастични алгоритми
 - Самосъгласувана смесена задача

Outline II

5 Глава 3: Квантов транспорт

- Еволюция в квантова жица
- Йерархия кинетични модели
- Модел на Вигнер-Болцман: Монте Карло подход

6 Основни приноси

Справка за публикациите

Настоящата дисертация е написана на базата на 29 публикации, от които 18 с импакт фактор, две глави от книги и останалите 9 в международни специализирани издания.

Публикациите са цитирани от независими автори повече от 90 пъти. Представен е списък с цитиранията на три избрани публикации: номер едно, пет и двадесет и шест, които са цитирани съответно 5, 5 и 41 пъти.

Кандидатът има над 100 публикации:

PEER REVIEWED JOURNALS: 48;

PEER REVIEWED PROCEEDINGS: 47, 18 IN BOOKS, 3 BOOK CHAPTERS;

REVIEWED ABSTRACTS IN CONFERENCE PROCEEDINGS: 34;

Публикациите от последните 5 години са цитирани от независими автори над 120 пъти.

Мотивировка и актуалност I

Компютърното моделиране на полупроводниковите (п/п) прибори е задача на изчислителната електроника - съвременна за математическото моделиране дисциплина.

Обединява физични, математични и електро-инженерни подходи, за дизайн, анализ и оптимизация.

Моделира се кинетиката на токовете носители определящо електричното поведение на п/п структури в интегралните схеми. Транспорта на носители:

в МИКРОСТРУКТУРИ класическата физика, уравнение на Болцман; скали - микро μ и пико; Монте Карло - основен подход, защото процесите имат директна вероятностна интерпретация.

в НАНОСТРУКТУРИ квантови модели, скали: нано n ($10^{-9}m$) и фемто ($10^{-15}s$)
Наноструктури - нови явления: тунелиране, квантуване

Зависи от (i) степента на сложност на модела на транспорт; (ii) прилагането на ефективни числени и компютърни технологии.

Цел и Задачи I

Да се развива *синергичната* връзка между кинетични модели на електронен транспорт и Монте Карло методите за тяхното симулиране.

- Развитие на универсален подход наречен ИТЕРАЦИОНЕН

Прилагане на МК теорията към моделите на класическа μ кинетика за (i) обобщаване съществуващите евристични алгоритми; (ii) извод на нови алгоритми с *подобрани свойства* \leftrightarrow *подобрани физични модели*.

- Обобщаване на подхода за квантов транспорт n

(i) извеждането на квантови модели; (ii) разработването на МК алгоритми, (iii) *тълкуването им в термините на частици* \leftrightarrow *нова интерпретация на квантови процеси*

- Прилагането на изведените класически и квантови алгоритми за анализ на *физични процеси, закони и явления*.

Структура: състои се от четири глави

Глава 1 е уводна и има задачата да въведе концепциите от статистическата механика, физиката на твърдото тяло и на квантовата механика във фазовото пространство, необходими за математическите модели.

Глава 2 разглежда развитието на Монте Карло алгоритмите за класически транспорт. Следва се историческия план, започващ с феноменологични техники. Представено е тяхното обобщаване от подход, наречен итерационен, приложението му за анализ на слаб сигнал и за извод на общ самосъгласуван Монте Карло алгоритъм с тегла за смесената задача с начални и гранични условия.

Глава 3 е посветена на квантов транспорт и представя извод на йерархия от модели, разработване на съответни алгоритми на базата на итерационния подход, тяхното прилагане и анализ.

Глава 4 е авторска справка.

1	Моделиране на полупроводникови прибори	18
1.1	Тенденции в развитието на микроелектрониката	19
1.2	Роля и задачи на моделирането	21
1.3	Моделиране на полупроводникови прибори	22
1.3.1	Основни модули	22
1.3.2	Транспортни модели	23
1.3.3	Аспекти на МПП	26
1.4	Основни понятия от полупроводниковия модел	30
1.4.1	Електрони в кристалната решетка	30
1.4.1.1	Зонна структура	30
1.4.1.2	Динамика на носителите	32
1.4.1.3	Пренос на заряди	33
1.4.2	Нарушения на идеалността на решетката	34
1.4.2.1	Фонони	35
1.4.2.2	Обща характеристика на разсейването от фонони	37

1.5	Класически транспорт - уравнение на Болцман	41
1.5.1	Феноменологичен извод	41
1.5.2	Параметризация на траекториите	43
1.5.2.1	Класическа функция на разпределение	45
1.6	Квантов транспорт - уравнение на Вигнер	47
1.6.1	Операторна механика	48
1.6.2	Квантова механика във фазовото пространство	50
1.6.3	Извод на уравнението на Вигнер	52
1.6.4	Свойства на функцията на Вигнер	54
1.6.4.1	Класическа граница на уравнението	55
1.7	Монте Карло интегриране	57
1.8	Допълнения	60
1.8.1	Правило на съответствие	60
1.8.2	Функция на Вигнер	61

Интегрални уравнения I

Уравнение на Фредхолм от втори род с ядро K и свободен член f_0 :

$$f(Q) = \int dQ' f(Q') K(Q', Q) + f_0(Q)$$

Оценка на $f(Q)$ се получава от итеративното заместване на уравнението в себе: $f(Q) = \sum_i f_i(Q)$. За всеки член се използва Монте Карло метод за пресмятане на интеграли. Итеративния вид позволява да се оценяват последователно членовете, т.е. директно f .

По-обща задача търси средната стойност на f с дадена функция A :

$$\langle A \rangle = (A, f) = \int dQ A(Q) f(Q) \quad g(Q') = \int dQ K(Q', Q) g(Q) + A(Q')$$

Задачата се преформулира от спрегнатото уравнение:

Интегрални уравнения II

$$\langle A \rangle = \int dQ' A(Q') f(Q') = \int dQ f_0(Q) g(Q) = \sum_i \langle A \rangle_i$$

Представянето

$$\langle A \rangle = \sum_i \langle A \rangle_i = \int dQ f_0(Q) g(Q)$$

е в основата на **подхода** към разгледаните кинетични уравнения който съответно е наречен **итерационен**.

КЪМ ВСЯКА ТРАЕКТОРИЯ МОЖЕ ДА БЪДЕ АСОЦИИРАНА ”ЧИСЛЕНА ЧАСТИЦА” КОЕТО ЧЕСТО ПОЗВОЛЯВА ДА СЕ АНАЛИЗИРА И ИНТЕРПРЕТИРА ФИЗИЧНАТА СТРАНА НА РЕШАВАНОТО УРАВНЕНИЕ.

2	Моделиране на класически транспорт	66
2.1	Монте Карло техники	67
2.1.1	Едночастична техника	68
2.1.1.1	Траектория на една частица	69
2.1.1.2	Средна стойност на A	70
2.1.1.3	Саморазсейване	71
2.1.1.4	Гранични условия	71
2.1.2	Ансамблова техника	72
2.1.3	Техники за увеличаване на статистиката	74
2.1.4	Интеграл по траекториите	75
2.1.5	Техника на обратната еволюция	76
2.1.6	Итерационен подход	78
2.1.6.1	Техники с обратна еволюция	78

Задачи и техники

Видове транспорт: времезависим и стационарен; хомогенен и прибори;

- задача с начално условие;
- задача с гранични условия;
- самосъгласувана смесена задача;

Алгоритми:

- Феноменологични: Едночастичната и Ансамбловата техника: директна емуляция на процесите на транспорт; Доказателства, че решават уравнението на Болцман - в следствие.
- От самото уравнение: техники за увеличаване на статистиката, интеграл по траекториите, техника на обратната еволюция.
- Итерационен подход - от интегралната форма или спрегнатото уравнение. Обобщава съществуващите и създава нови техники.

2.2	Алгоритми за анализ на слаб сигнал	84
2.2.1	Традиционни методи	85
2.2.1.1	Стационарни алгоритми	85
2.2.1.2	Времезависими алгоритми	86
2.2.2	Итерационен метод	88
2.2.3	Монте Карло алгоритми	91
2.2.3.1	Представяне с крайни разлики	92
2.2.3.2	Колинеарни пертурбации	93
2.2.4	Симулационни резултати	96
2.2.5	Условия, близки до равновесните	100

Алгоритми за слаб сигнал I

Анализът на отклика на носителите в п/п към слаби промени в полето дава параметри за симулаторите на интегрални схеми

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_s + \mathbf{E}_1(t); \quad f(\mathbf{p}, t) = f_s(\mathbf{p}) + f_1(\mathbf{p}, t); \quad \langle A \rangle(t) = \langle A \rangle_s + \langle A \rangle_1(t)$$

$$\langle A \rangle(t) = \int d\mathbf{p} A(\mathbf{p}) (f_s(\mathbf{p}) + f_1(\mathbf{p}, t)), \quad \langle f \rangle = \langle (f_s + f_1) \rangle = 1 \leftrightarrow \langle f_s \rangle = \langle f \rangle = 1$$

Доказано е, че откликът към произволна пертурбация се получава от отклика $\langle A \rangle_{im}(t)$ към $\mathbf{E}_{im}\delta(t)$. Приближено уравнение за f_1 :

$$\frac{\partial f_1(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + q\mathbf{E}_s \cdot \nabla f_1(\mathbf{p}, t) = \int BS(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f_1(\mathbf{p}') d\mathbf{p} - q\mathbf{E}_1(t) \cdot \nabla f_s(\mathbf{p})$$

ФЕНОМЕНОЛОГИЧНИ МК АЛГОРИТМИ, НАПР. $E_{im}\theta(t)$ и ПОСЛЕ $\frac{d}{dt}\langle A \rangle(t)$.
ОСТАВЯ ОТВОРЕН И ВЪПРОСЪТ ЗА $\langle f \rangle = 1$.

Итерационен подход

Итерационният подход към уравнението решава случаят на импулс във времето, доказва нормировката $\langle f \rangle = 1$ и води до алгоритми, които обобщават съществуващите такива.

Theorem

Решението f за случай на импулс на полето

$$\mathbf{E}_1(t) = \mathbf{E}_{\text{im}}\delta(t)$$

се получава от разликата на решенията на уравнението на Болцман за еволюцията на две начални условия $G^\pm(\mathbf{p}) \geq 0$, такива, че

$$G^+ - G^- = q\mathbf{E}_{\text{im}} \cdot \nabla f_s(\mathbf{p}).$$

При това условието за нормировка $\langle f \rangle = 1$ се удовлетворява във всеки момент от еволюцията.

Модел частици

Импулсът в електричното поле в момент $t = 0$ създава мигновено началните условия G^+ и G^- на два ансамбъла частици P и M .

Еволюцията на тези ансамбли, които съдържат еднакъв брой частици, се осъществява под въздействието на постоянно електрично поле. В съответствие функцията на отклик

$$\langle A \rangle_{\text{im}}(t) = \langle A \rangle_P(t) - \langle A \rangle_M(t).$$

За големи еволюционни времена двата ансамбъла релаксират към стационарната функция f_s , а отклика на системата - към 0.

$$f_{\text{im}}^{\pm}(\mathbf{p}, t \rightarrow \infty) = C f_s(\mathbf{p}), \quad C = \int G^{\pm}(\mathbf{p}) d\mathbf{p}, \quad \langle A \rangle_{\text{im}}(t \rightarrow \infty) = 0.$$

От модела са изведени 2 ансамблови алгоритъма, използващи различен избор на декомпозиция на G и 2 едночастични за колинеарни стационарно и импулсно полета. Обобщават съществуващите феноменологични алгоритми.

Приложения: TTR ефект I

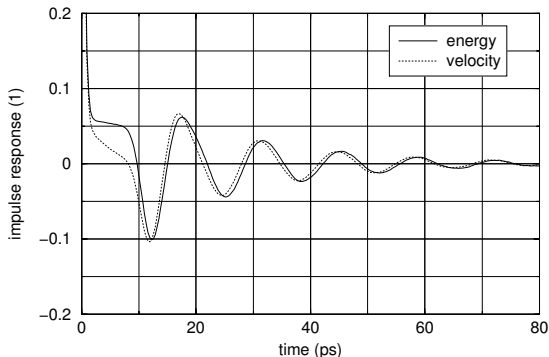


Figure: Нормализирани диференциална енергия $\partial\langle\epsilon\rangle_{\text{im}}/\partial E_{\text{im}}$ и скорост $\partial\langle v\rangle_{\text{im}}/\partial E_{\text{im}}$ в GaAs, $T = 10\text{K}$ и $E_s = 120\text{V/cm}$: TTR ефект

Приложения: TTR ефект II

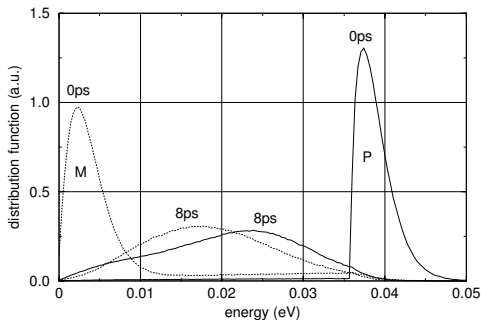


Figure: Разпределение по енергии на двата ансамбъла при 0 и 8 пикосекунди

2.3	Нехомогенни едночастични алгоритми	104
2.3.1	Стационарни условия	104
2.3.2	Итерационен извод на едночастични алгоритми	107
2.3.2.1	Спрегнатото уравнение	108
2.3.2.2	Гранични условия	109
2.3.3	Нехомогенни едночастични алгоритми и ергодичност	112
2.3.3.1	Усредняване по състоянията преди разсейване	114
2.3.3.2	Ергодичност на системата	116
2.3.3.3	Избор на границата	118
2.3.4	Алгоритъм с разделяне на траекториите от ИП	122
2.3.5	Алгоритъм на обратната еволюция от ИП	123

Стационарна задача с гранични условия

Разглеждаме задачата за намиране на функционал от решението на стационарното нехомогенно уравнение на Болцман, определено от условия f_b по границата на област.

При стационарни условия няма еволюция на физичните характеристики: силата на електричното поле \mathbf{F} , граничните условия, както и S зависят от пространствените координати, но не и от времето.

Доказват се две твърдения: стационарните траектории, както и уравнението на Болцман са инвариантни по отношение на смяна на началото на отчитане на времето.

Извежда се интегралната форма на уравнението и се въвежда времето $t_b(\mathbf{p}, \mathbf{r})$, за което една частица, движейки се обратно по траекторията, инициализирана от $(\mathbf{p}, \mathbf{r}), 0$ достига границата.

Задача: да се намери средната стойност на функцията f в област Ω :

$$f_{\Omega} = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \theta_{\Omega}(\mathbf{p}', \mathbf{r}'),$$

се преформулира с помощта на спрегнатото уравнение.

Theorem

Съответното спрегнато уравнение е:

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') = \int_0^{\infty} d\tau \int d\mathbf{p}_a S(\mathbf{p}', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}') e^{-\int_0^{\tau} \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} g(\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau)) \theta_D(\mathbf{r}') + \theta_{\Omega}(\mathbf{p}', \mathbf{r}'),$$

където траекториите са инициализирани от $\mathbf{p}_a, \mathbf{r}', 0$, а θ_D е индикаторът на симулационната област D .

При доказателството първо се преобразува ядрото, като се въвеждат $\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}(t'))$ и индикаторът $\theta_D(\mathbf{r}')$, с цел да изравни броя на примованите и непримовани променливи, и после се прави смяна на интеграционните променливи с което се обръща посоката на времето и параметризацията на траекториите преминава от обратна в нормална.

Задачата се преформулира по следния начин:

$$f_{\Omega} = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') f_b(\mathbf{P}'(t_b), \mathbf{R}'(t_b)) e^{-\int_{t_b}^0 \lambda(\mathbf{P}'(y), \mathbf{R}'(y)) dy},$$

като е необходимо интегрирането по реалното пространство да остане само по границата на областта, дефинирана $B(\mathbf{r}) = c$, т.е. една \mathbf{r}_j да се замени с време. Моментът t_b тогава е решение на $B(\mathbf{R}(t)) - c = 0$.

Въвежда се допълнително интегриране по времето заедно с фактора $\delta(B(\mathbf{R}(t)) - c)\phi(\mathbf{R}(t))$ и израза за f_{Ω} се преобразува с помощта на:

$$\phi(\mathbf{R}(t_b)) = \left| (\nabla_{\mathbf{R}} B)(\mathbf{R}(t_b)) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt}(t_b) \right| = |(\nabla_{\mathbf{R}} B)(\mathbf{r}_b)| |\mathbf{v}_{\perp}(\mathbf{p}_b)|$$

Извежда се следният резултат:

Условия по границата

Theorem

Произведението $|\mathbf{v}_\perp| f_b$ от напречната компонента на скоростта и функцията на разпределение f_b задава условията по границата, определящи средната стойност f_Ω , която се изразява както следва:

$$f_\Omega = \int_0^\infty dt \int_{K_+} d\mathbf{p}_b \int_{\partial D} d\sigma |\mathbf{v}_\perp(\mathbf{p}_b)| f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}_b(y), \mathbf{R}_b(y)) dy} g(\mathbf{P}_b(t), \mathbf{R}_b(t))$$

∂D включва само частта от границата с контактите, докато K_+ включва само тези състояния, чиято скорост е насочена навътре в областта D .

От итерационен анализ на f_Ω , се извеждат двата основни феноменологични алгоритъма на едночастичната техника.

Алгоритъм по състоянията преди разсейване

Theorem

Средната стойност на една физична величина $\langle A \rangle_\Omega$ се получава от:

$$\langle A \rangle_\Omega = f_D \frac{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in \Omega)} A(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))}{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in \Omega)} \lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))},$$

където t_i са моментите, в които настъпва разсейване, а броят на носителите f_D в симулационната област се предполага известен.

Алгоритъм по време и ергодичност на системата

Theorem

Физическата система, отговаряща на стационарната задача, определена от гранични условия, е ергодна и в частност важи следната оценка:

$$\langle A \rangle_{\Omega} = f_D \frac{\int dt (A \theta_{\Omega})(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t))}{T}, \quad (1)$$

където t , наречено време на симулация, акумулира еволюционните времена на последователните части на последователните траектории, а T е тоталното време на симулация.

Ергодичността на системата следва от Монте Карло анализа и не е необходимо *a priori* предположението за замяна на усредняването по ансамбъл с усредняването по време при оценка на физичните величини.

Избор на границата

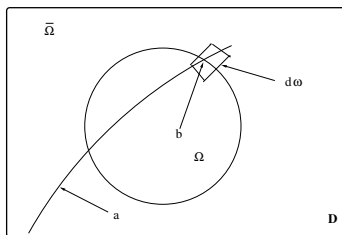


Figure: Задачата е да се изчисли $f_{\bar{\Omega}}$

- A) симулира се в D : траекториите започват и свършват от S_D .
- B) Симулира се в $\bar{\Omega}$: Траекториите започват и свършват на $S_D \cup S_{\Omega}$.
- C) Използва се f_{Ω} , симулация само в Ω : траекториите от и на S_{Ω} .
- B) и C) използват $f_b |v_{\perp}|$ върху Ω .

Дали траекториите на **A** могат да се разделят от S_{Ω} на подтраектории, които да бъдат интерпертирани като генерирани **B** и **C**?

Избор на границата

Theorem

*Стойността на $f_{\bar{\Omega}}$ не зависи от избора на границата: подходът **A** осигурява такова разпределение на траекториите по S_{Ω} , каквото би се получило при формалното прилагане на подходи **B** и **C**.*

В доказателството се показва, че стационарността на системата е необходимо условие за такова съгласуваност.

2.4	Самосъгласувана смесена задача	126
2.4.1	Постановка на задачата	127
2.4.2	Спрегнатото уравнение	128
2.4.3	Принос от началното и граничните условия	134
2.4.3.1	Начално условие	134
2.4.3.2	Гранични условия	135
2.4.4	Ансамблов алгоритъм за моделиране на прибори	137
2.4.5	Модифициране на естествените вероятности	142
2.4.5.1	Модифициране на началното и гранични условия	143
2.4.5.2	Модифициране на еволюционния процес	146
2.4.6	Самосъгласуван модифициран алгоритъм	148
2.4.6.1	Симулационни експерименти	153

Самосъгласувана смесена задача I

Уравнението на Болцман в присъствието на начално и гранични условия формулира най-общата задача на класически транспорт.

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int_0^t dt' \theta_D(\mathbf{R}(t')) \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t'), t') \cdots \\ + e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} f_i(\mathbf{P}(0), \mathbf{R}(0)) + e^{-\int_{t_b}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} f_b(\mathbf{P}(t_b), \mathbf{R}(t_b), t_b),$$

Задачата да се изчисли средната стойност на физична величина A

$$\langle A \rangle(t) = \int d\mathbf{p} \int_D d\mathbf{r} \int_0^\infty dt' A(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \delta(t - t') f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t'),$$

се преформулира с помощта на спрегнатото уравнение.

Самосъгласувана смесена задача II

Изведено е спрегнатото уравнение; Итерациите съответстват на естествената еволюция на класически Болцманови частици:

Theorem

Спрегнатото уравнение е:

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') + \int_{t'}^{\infty} d\tau \int d\mathbf{p}^a \theta_D(\mathbf{r}') S(\mathbf{p}', \mathbf{p}^a, \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^{\tau} \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} g(\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau), \tau),$$

където свободният член g_0 , съответстващ на задачата за намиране на $\langle A \rangle(t)$, има вид

$$g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = A(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \delta(t - t'),$$

а траекториите са инициализирани от $\mathbf{p}^a, \mathbf{r}', t'$.

Вероятностен анализ I

Намерена е случайната величина G отговаряща на естествените вероятности w и p_S от ядрото на спрегнатото уравнение

Theorem

G може да бъде представен като безкрайномерен интеграл:

$$G = \lim_{m \rightarrow \infty} \prod_{l=0}^m \int_{t_l}^{\infty} dt_{l+1} \int d\mathbf{p}_{l+1}^a w(t_{l+1}; \mathbf{p}_l^a, \mathbf{R}_{l-1}(t_l), t_l) p_S(\mathbf{P}_l(t_{l+1}), \mathbf{p}_{l+1}^a, \mathbf{R}_l(t_{l+1})) \dots$$

$$\times \sum_{i=0}^m \theta(t - t_i) \left(\prod_{j=0}^{i-1} \theta_D(\mathbf{R}_j(t_{j+1})) \right) \theta_\Omega(\mathbf{P}_i(t), \mathbf{R}_i(t)) \theta(t_{i+1} - t),$$

където е използвана конвенцията:

$$t_0 = 0; \quad \mathbf{p}_0^a = \mathbf{p}_\alpha; \quad \mathbf{R}_{-1} = \mathbf{r}_\alpha; \quad \mathbf{P}_0 = \mathbf{P}_\alpha; \quad \mathbf{R}_0 = \mathbf{R}_\alpha; \quad \prod_{j=0}^{-1} \theta_D = 1.$$

$$p_S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{r}) d\mathbf{p}' = \frac{S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{r})}{\lambda(\mathbf{p}, \mathbf{r})} d\mathbf{p}', \quad w(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0) dt = e^{-\int_{t_0}^t \lambda(\mathbf{p}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \lambda(\mathbf{p}(t), \mathbf{R}(t)) dt.$$

Вероятностен анализ II

Изведена е оценка на дисперсията

Theorem

Ако началното условие f_i е нормирано на единица, то дисперсията на съответната случайна величина е

$$\sigma_{\Omega}^2 = f_{\Omega}(1 - f_{\Omega}).$$

Ако f_i съответства на задача с $l = 1, \dots, N$ електрона, то $\sigma_{\Omega}^2 = \sum_l \sigma_{\psi l}^2$.
Ако в момент t_b от границите се инжектират $l(t_b) = 1, \dots, N(t_b)$ електрона, то дисперсията е

$$\sigma_{\Omega}(t)^2 = \int_0^t dt_b \sum_{l(t_b)} \sigma_{\psi l(t_b)}^2(t).$$

Резултати

Изведени са:

- Феноменологичен алгоритъм за моделиране на прибори:
специален избор на началната, гранична и преходна плътности
- Алгоритми с модифицирани вероятности: алтернативен избор
 - Модифицирана начална плътност:
 - Модифицирани гранични условия:
 - Свободен полет:
 - Разсейване от фонони:

Изводът на модифицирани алгоритми:

съществено използва линейността на задачата.

Самосъгласуваното решаване с уравнение на Поасон:

задачата става нелинейна!

Доказан е самосъгласуван модифициран алгоритъм

Резултати: самосъгласуван модифициран алгоритъм

Използва се, че процеса е Марков и полето е 'замразено' през интервалите на еволюция Δt на модифицираните траектории.

Theorem

На всяка еволюционна стъпка е възможно да се инициализира нов ансамбъл частици, като се следват правилата за избор на началната плътност чрез модифициране на началното условие. Този избор в частност може да е такъв, че да се използват изходните тегла и разпределение на частиците, които да продължат еволюцията си в следващия интервал Δt . Доказва се следната схема:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & WEMC & & PE & & WEMC & & PE \\
 f_0^{bias} & \xrightarrow{\Delta t} & f_{\Delta t}^{bias} & \rightarrow & f_{\Delta t} & \rightarrow & f_{\Delta t}^{bias} & \xrightarrow{2\Delta t} & f_{2\Delta t}^{bias} & \rightarrow & f_{2\Delta t} & \rightarrow & f_{2\Delta t}^{bias} \dots
 \end{array}$$

ДАДЕНИ СА РАЗЛИЧНИ СИМУЛАЦИОННИ РЕЗУЛТАТИ ПОКАЗВАЩИ ПРЕДИМСТВАТА НА ПОДХОДА С МОДИФИЦИРАНЕ.

Квантов транспорт: модели

Модели на кинетика на частици са естествени за класически транспорт.

При квантов транспорт такива модели може да се изведат благодарение на статистически анализ.

Вигнеровата формулировка на квантовата механика осигурява фазово пространство както и основни класически съотношения.

Актуален е **смесен** транспорт където кохерентни процеси тип e^- -потенциал протичат заедно с такива на декохеренция от взаимодействие e^- с фонони.

Извод на **смесени** модели от основни принципи, извод на Монте Карло алгоритми и симулации на тези модели.

Квантови модели

Изведена е йерархия смесени модели, която започва от обобщената функция на Вигнер, където двата типа взаимодействия са квантови, включва уравненията на Levinson и Вигнер-Болцман и завършва с модела на класически транспорт.

Обобщени са уравненията на Levinson и Barker-Ferry, (оригинално изведени за хомогенен p/p) за еволюция в квантова жица. Числени експерименти демонстрират квантови ефекти: CB, CR и ICFE.

Йерархията е представена при най-общи условия за квантов транспорт.

Последната част от главата е посветена на разработване на Монте Карло методи за решаване на уравнението на Вигнер-Болцман. Те дават картина на транспортни процеси, която обратно служи за физична интерпретация на моделите. Към Вигнеровия формализъм могат да бъдат асоциирани частици които имат ново качество, което е носител на квантовата информация.

3	Моделиране на квантов транспорт	160
3.1	Еволюция в квантова жица	165
3.1.1	Постановка на задачата	165
3.1.2	Обобщено уравнение на Вигнер	167
3.1.3	Уравнение за диагоналните елементи	170
3.1.4	Затваряне на ниво FOD елементи	171
3.1.5	Затваряне на ниво SOD елементи	175
3.1.5.1	Приближение на уравнението за f_{FOD}^+	176
3.1.5.2	Приближение на уравнението за f_{FOD}^-	185
3.1.5.3	Затваряне на получената система	186
3.1.6	Физични аспекти	187
3.1.6.1	Кинетични модели	187
3.1.6.2	Фоонната подсистема	190

Квантова жица: Уравнение на Левинсон

Theorem

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) f_w(z, p_z, t) = \sum_{\mathbf{q}'_{\perp}, p'_z} \int_0^t dt' \{ S(p_z, p'_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') f_w(z^-(t'), p_z'(t'), t') - S(p'_z, p_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') f_w(z^-(t'), p_z(t'), t') \},$$

$$S(p_z, p'_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') = 2|F_G(\mathbf{q}')|^2 \left[n(\mathbf{q}) \cos \left(\int_{t'}^t \frac{(\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p'_z(\tau)) - \hbar\omega_{\mathbf{q}'}) d\tau}{\hbar} \right) + (n(\mathbf{q}) + 1) \cos \left(\int_{t'}^t \frac{(\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p'_z(\tau)) + \hbar\omega_{\mathbf{q}'}) d\tau}{\hbar} \right) \right],$$

$n(\mathbf{q})$ е равновесният брой фонони от вид \mathbf{q} , релацията $p'_z = p_z - \hbar q'_z$ изразява закона за запазване на импулса по дължината на жицата z и

$$z^-(t') = z - \frac{1}{m} \int_{t'}^t \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} - eE(t - t') \right) d\tau.$$

Квантова жица: уравнение на Barker-Ferry

Theorem

Прекъсването на йерархията на ниво SOD елементи заедно с предположението за равновесни фонони, които при това имат постоянна честота, води до квантово-кинетичното уравнение на Levinson с ядро умножено с

$$\exp \left\{ - \int_{t'}^t \bar{\gamma} \left(\left(\frac{p_z + p'_z}{2} \right) (\tau) \right) d\tau \right\}$$

$$\bar{\gamma}(p) = \sum_{\mathbf{q}''} 2\pi\hbar |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \times$$

$$[(n(\mathbf{q}'') + 1)\delta(\epsilon(p) - \epsilon(p - \hbar\mathbf{q}'') - \hbar\omega) + n(\mathbf{q}'')\delta(\epsilon(p) - \epsilon(p + \hbar\mathbf{q}'') + \hbar\omega)]$$

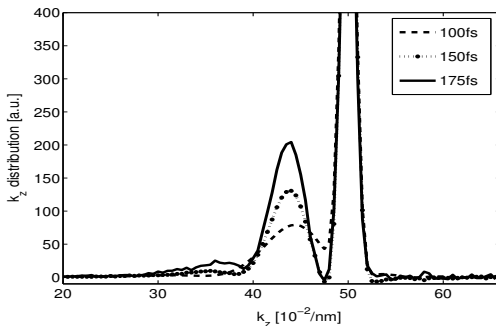
е едномерният еквивалент на сумарната скорост на Болцманово разсейване.

Полученото квантово-кинетично уравнение се редуцира до уравнението на Barker-Ferry, чиито оригинален извод с помощта на формализма на проекционни оператори е за случая на хомогенен полупроводник.

Симулационни резултати I

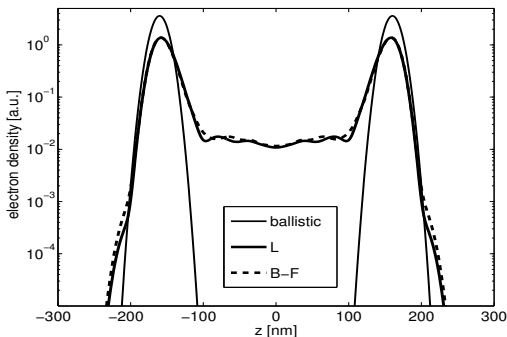
Разпределението по вълнов вектор (и така по енергия) и на концентрацията

$$f(k_z, t) = \int dz f_w(z, \hbar k_z, t); \quad n(z, t) = \int dp_z f_w(z, p_z, t).$$



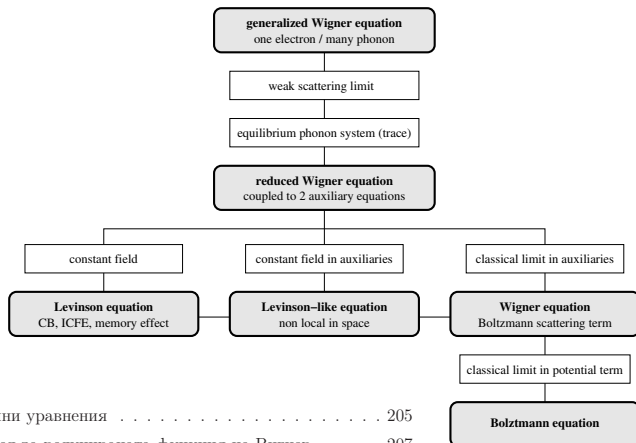
Ефекти на Collisional broadening & retardation

Симулационни резултати II



Концентрация на електроните след 175 фемтосекунди еволюция. Най-бързите според класическия модел електрони се намират във фронтовите участъци на балистичната крива (непрекъснатата линия). Най-бързите електрони от моделите на Levinson (плътна линия) и Barker-Ferry (прекъснатата линия) покриват по-голямо разстояние от началото, което довежда до ефекта UST.

Йерархия кинетични модели



- 3.2 Йерархия кинетични уравнения 205
- 3.2.1 Главен модел за редуцираната функция на Вигнер 207
- 3.2.2 Основно уравнение за редуцираната функция на Вигнер . . 208
- 3.2.3 Класическа граница: уравнение на Вигнер-Болцман 210

Модел на Вигнер-Болцман: Монте Карло подход

3.3	Модел на Вигнер-Болцман: Монте Карло подход	213
3.3.1	Формулировка на задачата	217
3.3.1.1	Стационарно уравнение на Вигнер-Болцман	218
3.3.1.2	Интегрален вид	219
3.3.2	Спрегнатото уравнение	220
3.3.3	Итерационно представяне на физичните средни	223
3.3.4	Монте Карло анализ на $\langle A \rangle$	225
3.3.4.1	Инжектиране от границата	225
3.3.4.2	Вероятностна интерпретация на \tilde{K}	226
3.3.4.3	Анализ на \tilde{A}	228
3.3.5	Стохастични алгоритми: Числени и физични аспекти	229
3.3.5.1	Вериги на Марков: квантови тегла	229
3.3.5.2	Класически транспорт и ергодичност	231

Спрегнато уравнение и итерационно представяне

Theorem

Спрегнатото уравнение, съответстващо на задачата за намиране на (f_w, A) има вид:

$$g(\mathbf{r}', \mathbf{p}') = \int d\mathbf{p} \int_0^\infty dt \theta_D(\mathbf{r}') \Gamma(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p}) \exp\left(-\int_0^t \mu(\mathbf{r}'(y), \mathbf{p}(y)) dy\right) g(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}(t)) + A(\mathbf{r}', \mathbf{p}')$$

Тук $(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}(t))$ е параметризирана напред във времето, инициализирана от $(\mathbf{r}', \mathbf{p})$.

$$\langle A \rangle = \oint_{\partial D} d\sigma(\mathbf{r}_b) \int_{P_+} d\mathbf{p}_b \int_0^\infty dt_0 |v_\perp(\mathbf{p}_b)| f_b(\mathbf{r}_b, \mathbf{p}_b) \exp\left(-\int_0^{t_0} \mu(\mathbf{r}_b(y), \mathbf{p}_b(y)) dy\right) g(\mathbf{r}_b(t_0), \mathbf{p}_b(t_0)).$$

$$\langle A \rangle = (b, (I - K)^{-1} A) = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - \tilde{K})^{-1} \tilde{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \langle A \rangle_i .$$

Вероятностен анализ на \tilde{K}

$$\frac{\Gamma}{\mu} = p_{\lambda}(\mathbf{r}', \mathbf{p}') p_{ph}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$$

$$+ p_{\gamma}(\mathbf{r}', \mathbf{p}') \left(\frac{1}{3} p_w^+(\mathbf{r}', \mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{1}{3} p_w^-(\mathbf{r}', \mathbf{p} - \mathbf{p}') + \frac{1}{3} p_{\delta}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \right) \quad 3$$

$$p_{\lambda} = \lambda(\mathbf{p}') / \mu(\mathbf{r}', \mathbf{p}'), \quad p_{\gamma} = \gamma(\mathbf{r}') / \mu(\mathbf{r}', \mathbf{p}'),$$

$$p_{ph} = S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) / \lambda(\mathbf{p}'), \quad p_w^{\pm} = V_w^{\pm}(\mathbf{r}', \mathbf{p}) / \gamma(\mathbf{r}'),$$

Алгоритъм с вериги на Марков: квантови тегла

Числените траектории се строят с помощта на p_b и n последователни итерации на p_t , следвана от останалите идентифицирани в \tilde{K} условни вероятности. Съответната случайна величина ψ_n се получава от

$$\psi_n = \Phi \prod_{k=1}^n \theta_{D_k} (\pm 3)^{i_k} \psi_A = \Phi W_n \psi_A, \quad \psi_{\langle A \rangle} = \sum_n \psi_n.$$

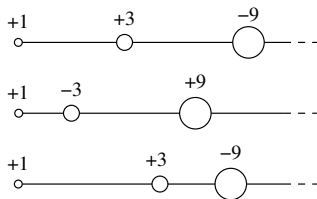


Figure: Алгоритъм I (кохерентен случай). На всяка от веригите на Марков съответства частица. Абсолютната стойност на теглото и се увеличава след всеки акт на разсейване, а промяната на знака се осъществява при реализация на отрицателната компонента на ядрото.

Оценка на теглото

Може да се оцени средното тегло W , което акумулират частиците по време на своята еволюция в симулационната област.

Theorem

Средното акумулирано тегло W расте експоненциално с времето, прекарвано от частиците в прибора и големината на γ :

$$W = \exp(2\gamma T) \quad \text{когато} \quad T\gamma \rightarrow \infty .$$

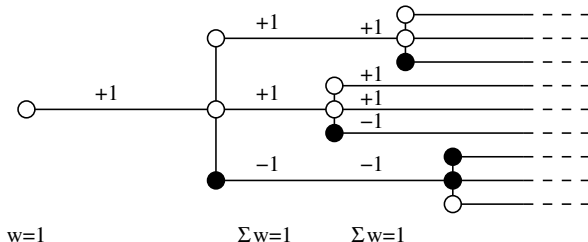
Наистина, T е сума от всички свободни полети с брой n на частицата до напускането ѝ на областта. Понеже честотата на расейване е γ , следва релацията $n = T\gamma$. Тогава при големи n теглото се оценява както следва:

$$W = \pm(3)^n = \left(1 + \frac{2\gamma}{\gamma}\right)^n = \left(1 + \frac{2\gamma T}{n}\right)^n \simeq \exp(2\gamma T) .$$

Типични: активната област ~ 10 nm, време $T \simeq 1ps$, $\gamma \simeq 10^{15}s^{-1}$ за потенциални бариери 0.3eV. Тогава $\gamma T = 1000$, което прави невъзможно прилагането на алгоритъма за реалистични квантови струкури, а само за до порядък по-малки бариери.

Алгоритъм с разклонени вериги: генерация

Взаимодействие в точка $Q' = (\mathbf{r}', \mathbf{p}')$: всяка компонента на ядрото генерира частица. Една от новите частици съвпада с началната или еквивалентно началната частица оцелява благодарение δ функцията. Две други частици се генерират от членовете p_w^\pm в състояния $Q^\pm = (\mathbf{r}', \mathbf{p}^\pm)$. Кохерентна картина:



Аниhilация: Две частици в една фазова точка имат еднакво вероятно бъдеще. При различен знак - обратни приноси към $\psi_{\langle A \rangle}$

КВАНТОВО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ: ГЕНЕРАЦИЯ И АНИХИЛАЦИЯ НА ЧАСТИЦИ!

Квантов модел с еволюция на частици

Еволюцията на всяка частица след раждането и е напълно Болцманово! **Квантовата информация е единствено от знака!**

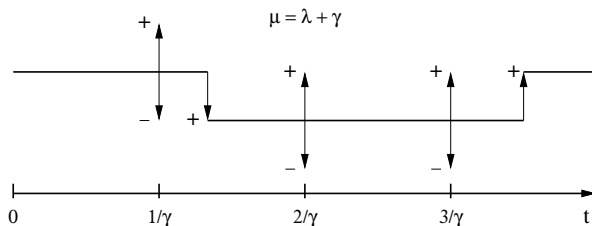


Схема на смесената еволюция на една частица във фазовото пространство по генерационния метод. Прекъсванията на главната траектория означават процеси на класическо разсейване.

Числени аспекти на модела на генерация

Частича от границата се симулира до излизането и, но създава вторични частици. Еволюцията им на свой ред създава третични такива и така нататък.

Областта никога не може да бъде освободена от частици. Кога да се спре изваждането за следваща инжекция от границата?

Алгоритъм, съответстващ на инжекция и извеждане на генерирани частици не може да бъде изведен от евристични съображения.

Такъв алгоритъм може да бъде получен в резултат от следното представяне на итерационния ред за $\langle A \rangle$:

Числени аспекти на модела на генерация

Theorem

$\langle A \rangle$ може да бъде представена като:

$$\langle A \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} (\mathbf{v}_{\perp} f_b, ((I - L)^{-1} M)^k (I - L)^{-1} \tilde{A}),$$

където $L = p_t \theta_D (p_{\lambda} p_{ph} + p_{\gamma} p_{\delta})$ и $M = p_t \theta_{DP} p_{\gamma} (p_w^+ - p_w^-)$.

Наистина тези оператори представляват декомпозиция на ядрото \tilde{K} :

$$\tilde{K} = L + M$$

Доказва се верността на следното уравнение:

$$(I - \tilde{K})^{-1} = (I - L)^{-1} + (I - \tilde{K})^{-1} M (I - L)^{-1} .$$

Итерационен анализ на $\langle A \rangle$

$$(A)_1 = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1} A)$$

е Болцманова еволюция може да бъде оценен класически.

$$(A)_2 = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1} M (I - L)^{-1} \tilde{A})$$

се разпада на два члена с помощта на делта функция:

$$(A)_2 = (P_1, (I - L)^{-1} \tilde{A}), \quad P_1(Q) = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1} M \delta)(Q) .$$

M съответства на генерация на двойка частици в точки Q^+ и Q^- .

Делта функцията съответства на проекция: $M\delta$ има смисъл на фиксиране или акумулиране на двете генерирани частици в точките на генерация.

ПОЛУЧАВА СЕ ИТЕРАТИВЕН АЛГОРИТЪМ ОТ ПОСЛЕДОВАТЕЛНИ СТЪПКИ НА ИЗВАЖДАНЕ И АКУМУЛИРАНЕ НА ЧАСТИЦИ В ОБЛАСТТА.

Алгоритъм

- 1) Инициализират се величините: ν оценяваща $\langle A \rangle$, μ_i и $i = 0, 1$, дефинирани върху мрежа във фазовото пространство за акумулация на частиците, избира се броят траектории N_1 , критерий за спиране R , инициализират се $i = 0$ и броят на итерациите $S = 0$.
- 2) N_1 частици се инжектират от границата, по време на тяхната еволюция до напускане на симулационната област се записват приносите от ψ_A към ν , при всяко саморазсейване се генерира двойка частици, чиито позиции и знак се съхраняват в μ_i .
- 3) Частиците, акумулирани в μ_i , се симулират до поглъщането им от границата. По време на всяка еволюция се записват приносите от ψ_A към ν , при всяко саморазсейване се генерира двойка частици, чиито позиции и знак се съхраняват в μ_{1-i} .
- 4) Актуализират се величините $S = S + 1$, $i = 1 - i$. Ако $S < R$, се отива на стъпка 2).
- 5) Стойността на $\langle A \rangle / \Phi$ се оценява върху $N = RN_1$ траектории като ν / N .

Алгоритъмът може да бъде визуализиран както следва:

$$b \rightarrow w_{p1} \xrightarrow{b \rightarrow} (w_{p1} + w_{p2}) \xrightarrow{b \rightarrow} (w_{p1} + w_{p2} + w_{p3}) \dots,$$

Приноси I

- 1 Предложен е модел за анализ на слаб сигнал, който изразява реакцията на физичната система като Болцманова еволюцията на две начални условия. Изведени са четири общи алгоритъма, два от които обобщават съществуващите такива, както и два специализирани алгоритъма за условия, близки до равновесните, и при голяма концентрация на електроните. Научно-приложните резултати са свързани с получаване релаксацията на физични параметри, изследване на ефекти, както и на влиянието на принципа на Паули върху електронната кинетика.
- 2 Нехомогенната стационарна задача за Болцманов транспорт е преформулирана с помощта на спрегнатото уравнение и са изведени съответстващите гранични условия. Изведени са основните феноменологични алгоритми на едночастичната техника. С помощта на Монте Карло анализ е доказана ергодичност на физичната система. Доказано е, че решението на стационарната задача е инвариантно по отношение на избор на алтернативна граница. Резултатите са формулирани в пет теореми, две твърдения и два алгоритъма.

Приноси II

- 3 Изведен е вероятностен модел за най-общата времезависима задача за класически транспорт, определена от начални и гранични условия. Получени са оценки за дисперсията за различни постановки на задачата. Разработени са техники за подобряване на статистиката с модифициране на естествените вероятности, свързани с начални и гранични условия, процесите на свободен полет и разсейване, както и еволюцията на съответните тегла. Решен е проблемът за самосъгласуването на тези алгоритми с уравнението на Поасон. В частност схемата може да е такава, че да избегне инициализация на всяка стъпка на самосъгласуване на решенията. Изследвани са приложения в актуални симулационни задачи. Резултатите са формулирани с помощта на четири теореми и четири твърдения.
- 4
- Изведена е йерархия от квантово-кинетични модели, които описват в различна степен на приближение включването на вибрациите на решетката във Вигнеровата формулировка на квантовата механика за системата електрон-потенциал. Получени са система уравнения електронна функция на Вигнер, която е сведена до основно уравнение, а от него е изведен модел, наречен уравнение на Вигнер-Болцман.
 - При специален избор на физичната система основното уравнение се свежда до уравнението на Levinson за хомогенен полупроводник или до неговото обобщение за случая на квантова жица. За този случай е изведено и нехомогенното уравнение на Barker-Ferry.

Приноси III

Научно-приложните резултати са свързани с анализ на решенията им за квантови ефекти като UST и нарушаване на закона за запазване на енергията, получени с Монте Карло техника на обратната еволюция.

- 5 Стационарната задача за уравнението на Вигнер-Болцман с гранични условия е преформулирана с помощта на изведеното спрегнато уравнение. Получени и анализирани са два алгоритъма за квантови частици. При единия е доказано, че теглата растат експоненциално. От вторият, базиран на генерация и аниhilация на частици, е получена удобна интерпретация на взаимодействието електрон-потенциал. Този алгоритъм е приложен за симулация на наноструктури и критично сравнен с резултатите от други подходи.