



БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ
ТЕХНОЛОГИИ

Михаил Христов Недялков

МОДЕЛИРАНЕ НА КИНЕТИКАТА НА ТОКОВИ НОСИТЕЛИ В
ПОЛУПРОВОДНИКОВИ ПРИБОРИ

АВТОРЕФЕРАТ

на дисертация за присъждане на научна степен

”Доктор на науките”

по научна специалност

01.01.13

”Математическо моделиране и приложение на математиката”

София, 2011

Дисертационният труд е обсъден и насочен за защита на разширено заседание на секция "Паралелни алгоритми" при ИИКТ-БАН, състояло се на 14.06.2011.

Дисертационният труд съдържа 279 страници, 45 фигури и таблици и 14 страници литература, включваща 129 заглавия. Основава се на 29 авторски публикации (18 в списания с импакт фактор, две глави от книги и 9 в международни специализирани издания), за които са известни над 90 независими цитирания. Пълният списък с публикациите на автора има H-index=11.

Защитата на дисертацията ще се състои на 20.10.2011 от 14.00 часа в зала 218 на бл. 25А на ИИКТ-БАН, на открито заседание на научното жури в състав:

Жури в състав:

1. Проф. Д.н. Андрей Андреев
2. Проф. Д.н. Даниел Данчев
3. Проф. Д.н. Иван Димов
4. Доц. д-р Анета Караиванова
5. Проф. Д.н. Светозар Маргенов
6. Проф. Д.н. Ана Пройкива
7. Доц. д-р Стефан Стефанов

1.1 Мотивировка и актуалност на темата

Компютърното моделиране на полупроводниковите (п/п) прибори - градивните елементи на интегралните схеми, е задача на изчислителната електроника. Това е съвременна в областта на математическото моделиране дисциплина, която обединява физични, математични и електро-инженерни подходи, прилагани за дизайн, анализ и оптимизация на микро- и нано-електронни структури. Моделира се физичното поведение на такива прибори и структури, изразено в термините на транспорт на токови носители през активните им области, който е определящ за електричните им характеристики.

Предизвикателствата в тази област се поставят от развитието на електрониката в посока на минитюаризация и интеграция:

(i) Достигат се физичните граници на основните технологии. Така дизайнът, архитектурата, функционалността и софтуерът на съвременните чипове стават главно средство за поддържане на конкурентността на производителите. Лабораторните експерименти на принципа 'проба-грешка' са толкова скъпи в условията на комплицирани технологии, че моделирането и симулацията на компонентите се разглеждат като единствена тяхна алтернатива.

(ii) Все повече и по-сложни физични явления и процеси започват да влияят на електронния транспорт и така на характеристиките на суб-микронните прибори. Това налага развиването на все по-задълбочени физични модели, както и на съответните числени подходи за компютърната им реализация. Прогресът в тази област изцяло зависи от степента на сложност на модела на транспорт, както и от прилагането на ефективни числени и компютърни технологии.

Чрез физични подходи може да бъде изведена цяла йерархия от модели на процеса на електронен транспорт в п/п прибори. Те описват този процес в различна степен на сложност, която нараства с включване на новите явления, характеризиращи минитюаризацията на приборите. В съответствие нараства сложността на математическите подходи към уравненията в тези модели.

Аналитичните модели, използвани в 'детството' на микроелектрониката за проектиране на устройства и схеми, се заменят с дрейф-дифузионни и хидродинамични системи уравнения, които моделират електронния транспорт в прибори с микронни размери. Въвеждат се макро-параметри, базирани на моменти на уравнението на Болцман в полупроводници. Тъй като към тези системи уравнения е възможен само числен подход, са развити съответни детерминистични методи.

Актуална за следващите генерации прибори става суб-микронната скала, където е необходимо да се решава самото уравнение на Болцман. Това уравнение предоставя в рамките на класическата физика детайлно описание на кинетиката на системата токовите носители на микроиво. Физичните величини, характеризиращи системата, са функционали от неговото решение, наречено функция на разпределение. Еволюционните времена за системата са ограничени отдолу от пикосекундната скала ($10^{-12}s$), която характеризира времето между две взаимодействия на носителите с фонони (вibrации) и други нарушения на периодичността на кристалната решетка. Дефинираното във фазовото пространство на импулс \mathbf{p} и позиция \mathbf{r} уравнение е между 3- (хомогенен полупроводник, стационарен случай) и 7- размерно, което е сериозен

аргумент в полза на прилагането на стохастични методи за неговото решаване. Друг аргумент в полза на Монте Карло методите е, че процесите на динамика на електроните, както и самото решение на уравнението, се описват от имащи директна вероятностна интерпретация функции.

Разработването на съответните Монте Карло методи, започнало преди 40 години, може да се смята за една от големите стъпки напред в областта на моделиране на прибори. Дизайнери и инженери получават подробно физическо описание на процесите, определящи функционирането на всеки конкретен прибор. Монте Карло симулациите дават възможност да се изследват такива явления, които не подлежат на анализ чрез лабораторни експерименти. Така фразата 'симуляционен експеримент' става синоним на Монте Карло моделирането. Такава интерпретация се поддържа и от вероятностната прозрачност на класическия транспорт, благодарение на която първоначално Монте Карло методът за моделиране на прибори се възприема по-скоро като директна емуляция на природни процеси, отколкото като числен подход. Съгласно с това феноменологично схващане функцията на разпределение се получава в резултат от симулация на физическите вероятности в еволюция на носителите. Доказателства, че използваните алгоритми решават уравнението на Болцман, се появяват в литературата по-късно. Алтернативният подход - алгоритми, получени чрез прилагане на теорията на Монте Карло метода към уравнението на Болцман, започва своето развитие в края на 80-те години на миналия век и е наречен итерационен. Предимствата на този подход са няколко:

- (i) обобщават се феноменологичните алгоритми, които може да бъдат изведени като частни случаи и да им се направи числен анализ;
- (ii) създават се нови алгоритми с подобрени статистически свойства;
- (iii) може да се атакуват задачи по квантов транспорт, където моделите и кинетичните процеси не притежават характерната за класическото описание вероятностна интерпретация.

Характеристичните размери на съвременните прибори приближават долната граница суб-микронната скала: типични размери на активните области на днешните процесори са например транзистори с $45nm$ дължина на канала. Преходните процеси в тях се характеризират с времена, приближаващи фемтосекундната ($10^{-15}s$) скала. При тези условия съществуват редица явления като тунелиране, квантизация и нарушаване на закона за запазване на енергията, които са извън границите на класическата физика. Такъв тип квантови явления са класифицирани в Интернационалната пътна карта за полупроводници [1] съобразно с тяхната важност за функционирането на следващите поколения прибори и схеми. В секция *Моделиране и Симулация; Тежки Предизвикателства* за разработване на *Пределни Наноструктури* от първа необходимост са *Методи, Модели и Алгоритми*, които помагат да се предвидят технологичните граници, както и *изчислително-ефективни симулатори на квантов транспорт*. Актуални са задачите за *смесен транспорт*, където кохерентни явления като тунелиране и квантизация съществуват паралелно с де-кохерентни процеси като например взаимодействие с фонони.

1.2 Преглед

1.2.1 Цел и Задачи

Целта на дисертацията е да изследва синергичната връзка между развитието на кинетични модели на електронен транспорт в полупроводникови структури и прибори и развитието на Монте Карло методите за тяхното симулиране. Широкото навлизане на тези методи в областта се дължи на предлагания от класическата физика модел на Болцманови частици, който е в основата на транспорта в микронните прибори. Необходимостта от познаването на физични параметри и величини при различни условия на транспорт води до създаването на различни стохастични алгоритми, изведени евристично, като е използвана феноменологията на изследваните процеси. В дисертацията се поставят следните взаимосвързани задачи:

- **Развитието на обобщаващ класическите алгоритми, универсален подход,** на базата на формално прилагане на теорията на Монте Карло методите към уравненията, управляващи тези процеси.
- **Прилагането на този подход, наречен итерационен, за извод на нови алгоритми с подобрени свойства.** Оказва се, че в някои случаи изходният модел може да се преформулира в рамките на Монте Карло анализа по начин, позволяващ нова, подобрена физична интерпретация на разглежданите процеси. Поради това, че описанието на квантовата кинетика има по-скоро формален характер, търсенето на синергичната връзка между модел и метод е особено важно за разбирането и интерпретацията на транспорта в наноелектронните прибори. Това предполага обобщаването на итерационния подход в тази област, за което обаче се изискват подходящи квантови модели.
- **Извеждането на квантови модели,**
- **интерпретацията им в термините на частици,**
- **разработването на алгоритми,** са най-важните задачи в областта на квантовото моделиране.
- **Прилагането на изведените класически и квантови алгоритми** за конкретни симулационни задачи има накрая за цел не само изследване на числените им свойства, а позволява анализ на важни физични процеси, закони и явления.

1.2.2 Организация

Представянето на класическите модели и методи следва историческия ход на развитие: от уравнение на Болцман за хомогенен полупроводник, през стационарен нехомогенен транспорт, определен от граничните условия, времезависим транспорт и модели на слаб сигнал, до самосъгласуван транспорт, определен от начални и гранични условия.

Квантовата кинетика е представена от Вигнеровата формулировка на квантовата механика на системата електрон-потенциал. Включването на вибрациите на решетката към тази система може да се осъществи на различно ниво на сложност, като за целта е изведена йерархия от модели. Изводът им е систематичен и започва от обобщената електрон-фононна функция на Вигнер, към която е приложена система

от предположения и приближения. Получени са система уравнения за редуцираната електронна функция на Вигнер, два близки модела за фемтосекундна еволюция на начално състояние носители, които описват взаимодействието с фонони на квантово ниво, както и уравнението на Вигнер-Болцман, където транспортът е резултат от конкурентно взаимодействие между кохерентни процеси и разсейване от нарушения на решетката. Последното обобщава уравнението на Болцман, което се получава като частен случай при граничен преход $\hbar \rightarrow 0$.

Развитието на числения подход следва точно обратната посока - от класически към квантов транспорт. Първоначално развитите ансамблова и едночастична техники за решаване на хомогенното уравнение на Болцман използват директна емуляция на процесите на транспорт, с което следват принципа 'моделът определя метода'. Те се допълват от предложените по-късно в литературата техники за увеличаване на статистиката, на интеграла по траектории и на обратната еволюция. Всички те са обобщени като частни случаи от итерационният подход, с който започва систематичното прилагане на числената теория на Монте Карло метода към интегралната форма на транспортното уравнение или съответното спрегнато уравнение. Приносите на подхода към тази дисертация започват с разработването на модел за анализ на слаб сигнал и екстракция на материални параметри. Обобщени са съществуващите евристични алгоритми и са изведени нови такива за конкретните физични условия. С добавянето на пространствените координати кинетиката на носителите става нехомогенна, с което проблемът се сдобива с гранични условия. Итерационният подход е обобщен за този случай, като се доказва ергодичността на стационарната физическа система - условие, което се постулира при емуляционната едночастична техника. Това е ясен пример за синергична връзка, при която 'методът подобрява модела'. Най-общата задача на класически транспорт е смесената задача, определена от начални и гранични условия, която е нелинейна поради самосъгласуването с уравнението на Поасон. С помощта на спрегнатото уравнение е изведен самосъгласуван алгоритъм с модифициране на теглата.

Пренасянето на този подход към модели на квантов транспорт се определя от следните особености на избрания квантов формализъм. Функцията на Вигнер се дефинира във фазовото пространство, много класически концепции и съотношения остават валидни, в частност де-кохерентните процеси може да се опишат от същите модели за разсейване от фонони, които се използват и в уравнението на Болцман. Принципната разлика между двата случая е, че в квантовите модели отсъства вероятностната прозрачност на класическия транспорт. Вероятностна интерпретация има самото решение, т.е. такава може да се даде едва след решаването на тези модели. Така в случая приложим се оказва единствено итерационният подход. Друга особеност е, че физичните функции в тези модели са с променлив знак. Това води до т.нар. знаков проблем, поради който изведените алгоритми са значително по-трудоемки от класическите си аналози.

Итерационни алгоритми с обратна еволюция са разработени и приложени за уравненията за фемтосекундна еволюция на оптично генерирани неравновесни носители, термализирани от фонони в квантова жица. Решенията за различни еволюционни времена са богати на квантови ефекти, като нарушаване закона за запазване на

енергията, влияние на приложеното електрично поле върху процеса на разсейване, ефекти на забавяне на еволюцията и ултрабърз пространствен трансфер. При модела на Вигнер-Болцман се използва спрегнато уравнение, водещо до нормална еволюция на Монте Карло траекториите. Особеностите на алгоритъма водят до интерпретацията на квантовия транспорт като генерация на частици, която се определя от електричния потенциал и е локална по позиция, но с определено разпределение по импулс. Генерираните частици имат напълно класическо поведение, като квантовата информация се пренася само от техния поляритет или знак. Две частици, попадащи в една точка на фазовото пространство, анихилират, ако имат различен знак. Тази картина на квантов процес, обяснен в класически термини, отново показва синергичната връзка, при която численият метод, изведен на базата на транспортния модел, служи за интерпретация на модела.

1.2.3 Структура

Дисертацията се състои 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 формулирането на математическите модели. Дискутират се ролята и задачите на моделирането на полупроводниковите прибори, въвежда се полупроводниковият модел, фазово пространство и траектории и уравненията на Болцман и Вигнер. Накрая са изложени основите на Монте Карло подходите за оценка на интеграли, решаване на интегрални уравнения и преформулиране на задачата с помощта на спрегнато уравнение.

Глава 2 разглежда развитието на Монте Карло алгоритмите за класически транспорт. Следва се историческия план, започващ с едночастичната и ансамблова техники. Тяхното обобщаване от итерационния подход, 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 е представено в детайли. Приносите на автора за извода, развитието и приложенията на итерационния подход са формулирани в 5 твърдения и 10 теореми, а разработените алгоритми са 8.

Глава 3 е посветена на моделирането на квантов транспорт и отразява приносите на автора за извод на йерархия от модели, разработване на съответни алгоритми на базата на итерационния подход, тяхното прилагане и анализ. Изведени са уравнения за еволюцията на фотогенерирани електрони в нано-жица, при които електрон-фононното взаимодействие има квантов характер. Решенията им са пресметнати с итерационния метод на обратната еволюция и демонстрират множество квантови ефекти. Обратното - при уравнението на Вигнер-Болцман взаимодействието с електричното поле има квантов характер, докато това с фонони е класическо разсейване от Болцманов тип. Прилагането на итерационния подход води до обща картина на генерация и анихилация на частици. Представеният анализ показва, че уравнението успешно решава актуални физични задачи за смесен транспорт. За изводите на представените резултати съществено се използват теореми и твърдения от предишната глава, на базата на които са формулирани 4 нови теореми и 2 алгоритъма.

Последната глава е техническа и предлага кратка биография и списък с използваните в дисертацията публикации на автора, тяхното цитиране от независими автори, както

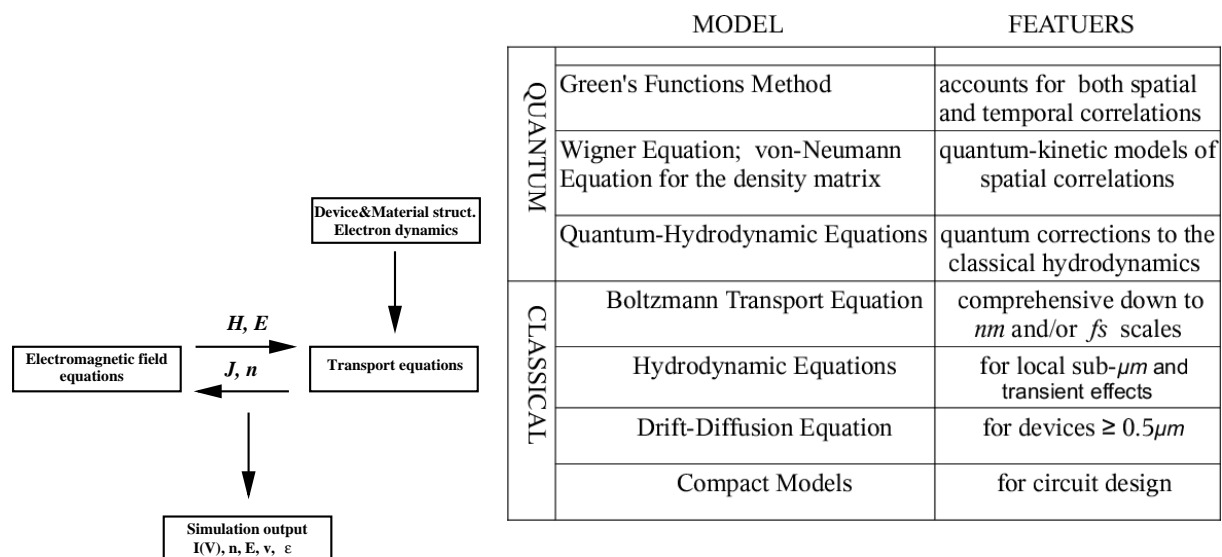
и списък с основните научни и научно-приложни приноси.

Цитирането на имена в текста е на кирилица, ако те се срещат така в специализираната литература на български език, и на латиница за останалите.

1.3 Съдържание

1.3.1 Глава 1: Моделиране на полупроводникови прибори

Основните компоненти на моделирането са представяни от два модула, които трябва да бъдат решавани самосъгласувано един с друг: това са транспортни уравнения, които описват потока на токови носители, и уравнения, описващи полетата, управляващи този поток, Фиг. 1.1, ляво. Тези модули са силно свързани един с друг. Полетата възникват от външни фактори, както и от концентрацията n и потока \mathbf{J} на зарядите, които са източници на електрично \mathbf{E} и магнитно \mathbf{H} поле съгласно с уравненията на Максвел. При широк клас физични условия, валидни за полупроводниците, тези уравнения може да бъдат заменени от уравнението на Поасон за електричния потенциал V . Полетата от своя страна са източници на сили, които ускоряват зарядите и така са отговорни за тяхната динамика. Изходни величини са волт-амперната



Фигура 1.1: Основни модули [2] и транспортни модели.

характеристика на прибора, както и разпределенията на концентрацията, електричното поле, средната скорост и енергия на зарядите.

Транспортни модели Тези модели са валидни при определени физични предположения, като най-общо посоката отдолу нагоре отговаря на тенденцията за намаляване на пространствените и времеви скали на транспорт на токови носители. Най-долу са аналитичните модели, които се получават като приближения на уравнението на Болцман на основата на предположение за локално равновесие на токовите носители

в полупроводниковата структура. Предположението за локалност престава да бъде в сила при прибори със субмикронни размери, където неравновесни ефекти като балистичен транспорт и явления, дължащи се на горещи носители, налагат решаването на самото уравнение на Болцман. С навлизането в нанометровата скала и/или при терахерцов режим на работа актуални стават нови явления от кинетиката и динамиката на носителите, които са извън областта на класическия Болцманов модел. Те изискват квантово описание, осигурявано от моделите на транспорт, представени в горната част на Фиг. 1.1, дясно. Тези модели се базират на различни формализми на квантовата механика и съответно се развиват от различни школи по моделиране на прибори.

Аспектите на моделирането на прибори, свързани с Фиг. 1.1, са два: (i) Развитието на математически подходи е от изключително значение: прогресът в областта зависи както от това колко комплексен е транспортният модел, така и от прилагането на ефективни числени методи, алгоритми и компютърни технологии. (ii) Класическата хармония между теоретико-физичен и числено-математически подходи липсва в горната квантова част на Фиг. 1.1. Причината е, че това направление още е в процес на развитие, като до момента липсват както универсален квантов модел за симулацията, така и ефективен числен метод.

Основните величини от полупроводниковия модел са в основата на транспортните модели, като едно множество материални параметри предоставят входните параметри на всяка симулация. Такива са електронната зонна структура, дължаща се на периодичния потенциал в кристала, при анализа на който се въвеждат вълновия вектор \mathbf{k} , енергия на електрона ϵ в зоната l :

$$\epsilon_l(\mathbf{k}) = \epsilon_l(\mathbf{k}_0) + \sum_{\mu\nu} \frac{\hbar^2 k_\mu k_\nu}{2m_{\mu\nu}^*}, \quad \frac{1}{m_{\mu\nu}^*} = \frac{\partial^2 \epsilon_l(\mathbf{k}_0)}{\partial k_\mu \partial k_\nu}, \quad \mu, \nu = x, y, z, \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}. \quad (1.1)$$

Величината m^* играе ролята на (и се нарича) ефективна маса, а $\hbar \mathbf{k}$ - на импулс. Следва, че периодичният потенциал в кристала води до ефективна промяна на масата на носителите. Движението им се получава, ако има приложено и електрично поле $\mathbf{E} = -\nabla \phi(\mathbf{r})$. Показва се, че ако то се мени слабо на разстояния, сравними с периода на решетката, може да се приложат класическите уравнения на Хамилтон:

$$\frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = -e\mathbf{E}, \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) = \mathbf{v} \quad (1.2)$$

Хамилтонианът $\mathcal{H} = \epsilon(\mathbf{k}) - e\phi(\mathbf{r})$ на движещия се в потенциално поле електрон със заряд $-e$ е сумата от неговата кинетична и потенциална енергии.

Нарушения на идеалността на решетката: Фонони Според (1.2) електроните в идеален периодичен потенциал и приложено електрично поле се ускоряват без никакво съпротивление, което би довело до постоянно нарастване на тока. В реалния случай нарушенията на периодичността като примеси, заредени и неутрални дефекти, дислокации и вибрации на атомите разсейват електроните и така ограничават нарастването на тока. Вибрациите на решетката са най-важният процес, отговорен за

релаксацията на импулса и енергията на електроните. Те може да бъдат представени удобно в базис от елементарни колективни възбуждания, наречени фонони: отклонението \mathbf{u} на всеки йон от възел \mathbf{R} може да се представи като суперпозиция на т.нар. нормални колебания, които са колективни за йоните:

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2V\rho\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^+) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}, \quad \left(\frac{da_{\mathbf{q}}}{dt} = i\omega_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}} \right), \quad (1.3)$$

където V и ρ са обемът и плътността на кристала, \mathbf{q} е вълнов вектор, $\omega_{\mathbf{q}}$ е честота на колебания, $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ е единичен вектор на поляризация, а $a_{\mathbf{q}}, a_{-\mathbf{q}}^+$ са хармонично-осцилиращи комплексно-спрегнати променливи. Сумата от кинетичната и потенциалната енергия на йоните определя хамилтониана на колебанията като функция на \mathbf{u} и $d\mathbf{u}/dt$ и от там на $\mathcal{H} = \mathcal{H}(a, a^+)$. Нещо повече - може да се покаже, че това са канонични променливи, защото удовлетворяват уравненията на Хамилтон, (1.2). Преходът към квантова механика се извършва като на a и спрегнатата променлива a^+ се съпоставят оператори, удовлетворяващи комутационните съотношения $\hat{a}_{\mathbf{q}}\hat{a}_{\mathbf{q}'}^+ - \hat{a}_{\mathbf{q}'}^+\hat{a}_{\mathbf{q}} = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$. В частност операторът \mathcal{H} има собствени функции $\Pi_{\mathbf{q}} |n_{\mathbf{q}}\rangle$, където $|n_{\mathbf{q}}\rangle$ са собствени функции на оператора $\hat{a}_{\mathbf{q}}^+\hat{a}_{\mathbf{q}}$ със собствена стойност $n_{\mathbf{q}}$, което е натурално число.

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}}^+\hat{a}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right), \quad \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}} + 1/2), \quad \hat{a}_{\mathbf{q}}^{(+)} |n_{\mathbf{q}}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{q}} - 1} |n_{\mathbf{q}} - 1\rangle. \quad (1.4)$$

Така вибрациите на решетката съответстват на сума от елементарни възбуждения -фонони, които са $n_{\mathbf{q}}$ за дадена стойност на вълновия вектор \mathbf{q} . Равновесният брой фонони $n(\mathbf{q})$ се определя от това, че енергията $E(n, \mathbf{q}) = \hbar\omega_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}} + 1/2)$ е разпределена с вероятност $P(n, \mathbf{q})$, пропорционална на $\exp(-E(n, \mathbf{q})/kT)$, където k е константата на Болцман, а T е температурата. $n(\mathbf{q}) = \sum_n nP(n, \mathbf{q}) = \left(e^{\hbar\omega_{\mathbf{q}}/kT} - 1 \right)^{-1}$ се нарича функция на Бозе-Айнщайн. В кристал с един атом в елементарната клетка има три вида акустични фонони, за които $\omega_{\mathbf{q}} \rightarrow 0$, ако $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Ако клетката съдържа N атома, има още $N - 1$ оптични фонона, чиято честота най-общо слабо зависи от вълновия вектор. Може да се покаже, че при акустични фонони всички атоми в елементарната клетка се отместват еднакво, докато при оптичните осцилират в противоположни посоки. Така към квантовото число \mathbf{q} се добавя и числото $j = 1, \dots, N$, като се казва, че фононите са от вид \mathbf{q}, j . Освен това номенклатурата им се увеличава според типа на енергията на взаимодействие, като има оптични фонони от тип деформационен потенциал, полярни оптични фонони, съществуващи в йонните кристали.

Обща характеристика на разсейването от фонони Потенциалната енергия на електрона в полето на йоните се развива в ред по отклонението им \mathbf{u} от възлите на решетката. Запазва се линейният член, така че Хамилтонианът \mathcal{H}_{e-ph} е линеен по \hat{a} и \hat{a}^+ . Теорията на пертурбациите изчислява броя преходи за единица време от състояние $|i\rangle$ в състояния df около $|f\rangle$ на системата електрон-фонони като:

$$S(i \rightarrow f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \mathcal{H}_{e-ph} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) df. \quad (1.5)$$

При дискретни нива S има смисъл на вероятност за разсейване за единица време, а в останалите случаи зависи и от избрания спектър и нормализацията на функциите, описващи състоянията. Преходът или разсейването е мигновено: S не зависи от t , а само от началното и крайно състояние, които са от вида: $\Psi_{l'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \prod_{\mathbf{q}', j'} |n_{\mathbf{q}', j'}'\rangle$ и $\Psi_{l''}(\mathbf{k}'', \mathbf{r}) \prod_{\mathbf{q}'', j''} |n_{\mathbf{q}'', j''}''\rangle$. Матричният елемент в (1.5) може да бъде разделен на електронна част с участието на Ψ и фононна част, която е линейна по операторите $\hat{a}_{\mathbf{q}, j} + \hat{a}_{\mathbf{q}, j}^+$. Според последното уравнение в (1.4), взаимодействието се характеризира от следните правила за отбор: $\delta_{j, j'} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \delta_{j, j''} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}''} \left(\sqrt{n_{\mathbf{q}, j}' } \delta_{n'', n'-1} + \sqrt{n_{\mathbf{q}, j}'} + 1 \delta_{n'', n'+1} \right)$. Така всеки акт на взаимодействието или унищожаване (първи член в скобата), или раждане (втори член в скобата) един (и само един) фонон. Следователно в делта функцията в (1.5) участват началната и крайната енергия на електрона и енергията на фонона $\pm \hbar \omega_{\mathbf{q}, j}$, което дава закона за запазване на енергията при взаимодействието между две частици. Второто основно предположение за класическата картина на Болцманов транспорт е, че фононите остават в равновесие. Усредняването по равновесното разпределение води до замяна на $n_{\mathbf{q}, j}'$ с равновесната му стойност $n'(\mathbf{q}, j)$, като процесът на унищожение получава фактор $n'(\mathbf{q}, j) + 1$, а този на раждане - $n'(\mathbf{q}, j)$. Електронната част на матричния елемент е интеграл по електронната координата $\mathbf{R} - \mathbf{r}$, където \mathbf{R} е радиус-вектор на възел на решетката, а \mathbf{r} е относителната координата. Основният резултат от интегрирането на функциите, зависещи от \mathbf{R} , като например експонентата в (1.3), е закон за запазване на импулса $\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'' \pm \mathbf{q})$, където част от началния импулс $\hbar \mathbf{k}'$ на електрона се отдава (приема) на (от) родения (унищожен) фонон с импулс $\hbar \mathbf{q}$. Интегралът по относителната координата води до още правила за отбор, зависещи от симетрията на взаимодействието и на Ψ . Обсъдените свойства водят до следната обща формулировка на сумарната скорост на разсейване за единица време на електрон от състояние \mathbf{k}, l от даден вид фонони \mathbf{q}, j :

$$S(\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l', j) = A \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' \pm \mathbf{q}) \left(n(\mathbf{q}, j) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\epsilon(\mathbf{k}, l) - \epsilon(\mathbf{k}', l') \pm \hbar \omega_{\mathbf{q}, j}), \quad (1.6)$$

където функцията $A(\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l', j)$ се определя от конкретното взаимодействие. Скоростта на разсейване S , както и сумарната скорост $\lambda(\mathbf{k}, l) = \int \sum_{l'} S(\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l') d\mathbf{k}'$ на разсейване от \mathbf{k}, l , са основни понятия в моделите на транспорт на носители.

Класически транспорт - уравнение на Болцман Феноменологичният извод на уравнението на Болцман играе основна роля за развитието на Монте Карло методите в областта. Изводът се основава на дискутираните основни предположения на класическия транспорт, а именно: бавноменящо се електрично поле, което позволява да се разглеждат електроните като материални точки, ускорявани от полето по класически, Нютонови траектории съгласно с (1.2); Решението се определя еднозначно от инициализационна точка \mathbf{p}, \mathbf{r} в начален момент t . Движението по траектории е прекъсвано от актове на разсейване, които са моментални по време и локални в реалното пространство, т.е. променя се само импулсът на разсейвания електрон. Разсейването се описва от функции, които са неотрицателни и имат директна вероятностна интерпретация. Процесът на електронен транспорт се описва

от функция f на разпределение на електроните във фазовото пространство. Уравнението за f се извежда с помощта на счетоводство на баланса на процесите, в които участват електроните: $\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col}$. Разсейването води до преразпределение на електроните между разглеждания фазов обем и останалата част от пространството: $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = \int d\mathbf{p}' S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) - \lambda(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$. Физичните величини A се дефинират като динамични функции $A(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ във фазовото пространство. Познанието на f дава възможност да се изчислят техните средни стойности чрез интегриране в дадена област на фазовото пространство. Изразът за $\frac{df}{dt}$ може да бъде получен от уравнението за еволюция на A . В основата е въпросът как се изменят динамичните функции A във времето. Нека означим с $A(t)$ тази зависимост. Възможни са два начина: (i) $A(t) = A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ е старата функция в новите координати; (ii) $A(t) = A(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ е нова функция в старите координати. В първия случай се постулира, че законите на механиката не се изменят с времето: A остава една и съща функция за старите и за новите координати. Тогава с помощта на (1.2) се получава уравнението за еволюцията на A :

$$\frac{dA}{dt} = [A, \mathcal{H}]_P = \frac{\partial A(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial A(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}}; \quad [\mathbf{r}, \mathbf{p}]_P = 1 \quad (1.7)$$

Скобката на Поасон $[\cdot, \cdot]_P$ въвежда основно съотношение между динамичните функции и Хамилтониана \mathcal{H} . Тя води до запазващо алгебричната структура (автоморфизъм) съответствие между множествата такива функции във времето. Алтернативно, във втория случай трябва да се постулира закона за еволюцията на $A(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$. Ако той се избере в съответствие с (1.7), автоморфизмът в съответствие води до запазване на законите на механиката: новата функция в старите координати е старата функция в новите координати $A(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$! Уравнението на Болцман се получава от (1.7) и (1.2) [3] и теоремата на Лиувил:

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int d\mathbf{p}' S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) - \lambda(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) . \quad (1.8)$$

Квантов транспорт - уравнение на Вигнер Съществуват алтернативни формулировки на квантовата механика, като най-разпространен е абстрактният операторен формализъм в термините на Хилбертово пространство [4]. Е. Вигнер [5] предлага формулировка на квантовата механика във фазовото пространство. И физичните състояния, и наблюдаемите се представят от функции на фазовите координати. Трансформацията на Вейл [6] съпоставя на всеки оператор от операторната механика по една функция от фазовото пространство. В тази картина се запазват основни съотношения от класическата статистическа механика. В частност основните величини в операторната механика - средна (очаквана) стойност и вероятно разпределение, се оценяват във фазовото пространство чрез формули, подобни на тези от класическата статистика. По тази причина основната величина в тази картина - функцията на Вигнер, съответства, от една страна, на функцията на разпределение и затова често е наричана квази-разпределение, а от друга, и на матрицата на плътността от

операторната механика. Исторически, Вигнеровата теория е изградена върху операторната механика, като по-късно се доказва и обратното, което я прави автономна формулировка на квантовата механика. В дисертацията е следван класическият път, поради което първо се резюмират основните принципи на операторната механика.

Операторна механика Физичните величини са представени от Ермитови оператори \hat{A} : $\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$, $\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{mn}$, $\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{1}$. Тези оператори имат реални собствени стойности, съответстващи на възможните, които може да има дадена физическа величина и пълна система от ортонормални собствени вектори, които дефинират Хилбертовото пространство H на състоянията на физическата система. Състоянията се представят от тези елементи $|\Psi_t\rangle$ от H , които са квадратично интегрируеми. Постулира се уравнението за еволюция на $|\Psi_t\rangle$:

$$\hat{H}|\Psi_t\rangle = i\hbar\frac{\partial|\Psi_t\rangle}{\partial t}, \quad \langle\Psi_t|\Psi_t\rangle = 1, \quad |\Psi_t\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle.$$

Познаването на $|\Psi_t\rangle$ дава пълната информация за състоянието на дадена физическа система, като за нея се казва, че е в чисто състояние. Как обаче се получават операторите, съответстващи на физичните величини? Операторната механика постулира принципа на съответствие, според който на класическите позиции и импулс съответстват Ермитовите оператори $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$, а на скобката на Поасон - комутатора $[\cdot, \cdot]_{-}$ $\mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}$, $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}$, $\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}} = [\hat{r}_i, \hat{p}_j]_{-} = i\hbar\delta_{ij}$. Очакваната релация $A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \stackrel{?}{\rightarrow} A(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \hat{A}$ е нееднозначна, защото аргументите - оператори не комутират. Релацията ще бъде уточнена по-късно, след като се въведе матрица на плътността. Следва, че координатата и импулсът на една частица не дефинират фазово пространство в квантовата механика. Една физична система може да бъде представена от собствените функции само на единия оператор, например в координатно представяне: $\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$, $\int d\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = \hat{1}$, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}$. Средната стойност на всяка физична величина A в състояние Ψ_t е:

$$\langle A \rangle(t) = \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\langle\Psi_t|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\hat{A}|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\Psi_t\rangle = \int d\mathbf{r} (d\mathbf{r}' A(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r})) = Tr(\hat{\rho}_t\hat{A}) \quad (1.9)$$

Величината ρ_t ($\hat{\rho}_t$) се нарича матрица (оператор) на плътността. $\rho_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Psi_t^*(\mathbf{r}')\Psi_t(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\Psi_t\rangle\langle\Psi_t|\mathbf{r}'\rangle = \langle\mathbf{r}|\hat{\rho}_t|\mathbf{r}'\rangle$ Релацията (1.9) е универсална, тъй като операцията не зависи от избора на базиса: средната стойност на една физична величина се дава от следата и с матрицата на плътността. Директните изчисления водят до уравнението на еволюция за $\hat{\rho}$:

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}_t}{dt} = [\mathcal{H}, \hat{\rho}_t]_{-}, \quad Tr(\hat{\rho}_t) = 1. \quad (1.10)$$

Уравнението на фон-Нойман (1.10) е от фундаментално значение за квантовата статистика. То обобщава случаите, в които информацията за системата не е пълна, а статистически разпределена. Такъв е например случаят, ако системата е отворена, т.е. взаимодейства с друга част от вселената. Прието е да се казва, че в този случай състоянието е смесено. За смесено състояние не съществува решение $|\Psi_t\rangle$, което да дава описание на системата. За тези случаи се постулира (1.10).

Квантова механика във фазовото пространство Подредбата на операторите $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{r}}$ се постулира, като са възможни различни варианти. Вигнеровата формулировка използва напълно симетризирана подредба:

$$\hat{A} = \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \int dsd\mathbf{q}\beta(\mathbf{s}, \mathbf{q})e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}}+\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})}, \quad \beta(\mathbf{s}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{r}d\mathbf{p}A(\mathbf{r}, \mathbf{p})e^{-i(\mathbf{s}\mathbf{r}+\mathbf{q}\mathbf{p})}. \quad (1.11)$$

От тук в частност следва функцията на Вигнер, получена от матрицата на плътността $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ чрез смяната $\mathbf{r}_1 = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$:

$$f_w(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r}_2 \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2, t) e^{-i\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{p}/\hbar}.$$

Уравнението на Вигнер за еволюция на частица в поле V се получава от (1.10) :

$$\frac{\partial f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{r}} = \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t). \quad (1.12)$$

където V_w е потенциалът на Вигнер, съответстващ на:

$$V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\hbar(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{r}' \cdot \mathbf{p}/\hbar} (V(\mathbf{r} - \mathbf{r}'/2) - V(\mathbf{r} + \mathbf{r}'/2)). \quad (1.13)$$

Монте Карло интегриране В тази секция се резюмира Монте Карло подходът за оценка на интеграли и решения на интегрални уравнения, както и се въвеждат необходимите означения и термини.

Очакваната стойност E_ψ на случайна величина ψ , която приема стойности $\psi(Q)$ с вероятностна плътност $p_\psi(Q)$, се изразява чрез интеграла $E_\psi = \int dQ p_\psi(Q) \psi(Q)$, където Q е точка от \mathcal{R}^n . Основният Монте Карло подход за оценка на E_ψ е като се осъществят N независими реализации на вероятностната плътност p_ψ . Съответно се генерират N случайни точки Q_1, \dots, Q_N , които представляват N мерна статистическа извадка за ψ . Средната стойност η на извадката оценява математическото очакване E_ψ

$$E_\psi \simeq \eta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi(Q_i), \quad \mathcal{P}\{|E_\psi - \eta| \leq \frac{3\sigma_\psi}{\sqrt{N}}\} \simeq 0.997 \quad (1.14)$$

с точност, която зависи от броя независими реализации N и стандартното отклонение σ_ψ на случайната величина. Съгласно с правилото на "трите σ " вероятността \mathcal{P} за η да принаглежи на интервала $3\sigma_\psi/\sqrt{N}$ около стойността E_ψ е много голяма (0.997). Идеята на Монте Карло подхода за оценка на интеграли е да представи даден интеграл като очаквана стойност:

$$I = \int f(Q) dy = \int p(Q) \frac{f(Q)}{p(Q)}, \quad p(Q) \geq 0, \quad \int p(Q) dy = 1 \quad (1.15)$$

на случайната величина $\psi = f/p$. Вероятностната плътност p може да бъде произволна, но допустима за f : $p \neq 0$, ако $f \neq 0$. В зависимост от избора на p се

получават различни случайни величини. Всички те имат същата очаквана стойност I , но различна дисперсия и по-високи моменти. Може да се покаже, че дисперсията се минимизира, ако p се избере пропорционално на $|f|$. Тази идея се обобщава за решаване на интегрални уравнения. Разглежда се уравнение на Фредхолм от втори род с ядро K и свободен член f_0 , което за удобство е записано по два начина:

$$f(Q) = \int dQ' f(Q') K(Q', Q) + f_0(Q) = \int dQ' K'(Q, Q') f(Q') + f_0(Q) . \quad (1.16)$$

Итеративното заместване на уравнението в себе си води до представяне на решението като ред на Нойман $f(Q) = \sum_i f_i(Q)$. Членовете на реда са последователни итерации на ядрото върху началното условие. Всеки член е многомерен интеграл от вида (1.15) и може да бъде оценен с Монте Карло метод.

$$f_2(Q) = \int dQ_1 dQ_2 P(Q, Q_1) P(Q_1, Q_2) \frac{K'(Q, Q_1)}{P(Q, Q_1)} \frac{K'(Q_1, Q_2)}{P(Q_1, Q_2)} . \quad (1.17)$$

Тук плътността p се получава от последователни прилагания на преходната плътност P , с което може да се оценят един след друг членовете в реда на Нойман, т.е. директно да се даде оценка за f . P е въведена по-долу като част от една по-обща задача която търси средната стойност на f с дадена функция A : $\langle A \rangle = (A, f) = \int dQ A(Q) f(Q)$. В този случай може да се разгледа едно уравнение спрегнато на (1.16):

$$g(Q') = \int dQ K(Q', Q) g(Q) + A(Q') . \quad (1.18)$$

Ако (1.16) се умножи с g , (1.18) се умножи с f , и получените уравнения се интегрират и сравнят, се получава равенството $(A, f) = (f_0, g)$:

$$\langle A \rangle = \int dQ' A(Q') f(Q') = \int dQ f_0(Q) g(Q) = \sum_i \langle A \rangle_i . \quad (1.19)$$

Последният член се получава с помощта на реда на Нойман на (1.18).

$$g(Q') = A(Q') + \sum_{n=1}^{\infty} \int dQ K^n(Q', Q) A(Q); \quad K^n(Q', Q) = \int dQ_1 K(Q', Q_1) K^{n-1}(Q_1, Q) . \quad (1.20)$$

който води до представянето (1.19). Итеративният му характер позволява една траектория да се използва за едновременна оценка на последователните членове, т.е. да оценява директно $\langle A \rangle$. Това представяне е в основата на подхода към транспортните уравнения разгледани в тази дисертация, и съответно е наречен итерационен. Към всяка траектория може да бъде асоциирана "числена частица" която, както ще бъде показано често позволява да се анализира и интерпретира физичната страна на решаваното уравнение.

1.3.2 Глава 2: Моделиране на класически транспорт

В началото на тази глава е даден преглед на класическите Монте Карло алгоритми за електронен транспорт, които исторически започват с моделиране на стационарни

или времезависещи процеси (задача с начално условие) в хомогенни полупроводници, описвани от пространството на импулсите. Първите алгоритми: Едночастичната и Ансамбловата техника, са изведени от феноменологични съображения и се възприемат като директна емуляция на процесите на дрейф и разсейване, определящи функцията на разпределение. По-късно тези алгоритми се обобщават за нехомогенната задача, която въвежда пространствените координати. Впоследствие се извеждат доказателства, че тези феноменологични алгоритми решават уравнението на Болцман. Следват алгоритми, за получаването на които се използват различни формулировки на самото уравнение, като Техники за увеличаване на статистиката (с разделяне или по област), Интеграл по траекториите, Техника на обратната еволюция. Накрая тези алгоритми биват обобщени за задачата с начално условие благодарение на формален подход, наречен итерационен, който използва теорията на Монте Карло метода, приложен към интегралната форма на уравнението на Болцман: През 1988 г. в ИМ-БАН се провежда цикъл от семинари, на които проф. Иван Димов запознава с теория на Монте Карло методите студенти и аспиранти от широк кръг специалности, включително от тогавашния Институт по микроелектроника. Благодарение на това Nedjalkov и Vitanov [7] първо обобщават техниките за обратна еволюция и интеграл по траекториите, а след това в [8] и алгоритъма на ансамбловата техника. Систематично представяне на тези техники и анализ на сходимостта е направено от Nedjalkov и Dimov в [9]. Освен че се извеждат нови алгоритми, подходът дава възможност да се атакуват нови задачи за транспорт на носители. Първият принос в тази дисертация е директно прилагане на итерационния подход към задачата за определяне коефициентите на отклик към слаб сигнал. След това подходът е приложен за анализ на нехомогенната стационарна задача, определена от гранични условия. Използваните при тази задача алгоритми на едночастичната техника, за чиито феноменологичен извод се предполага ергодичност, са изведени като частен случай, а ергодичността е доказана в рамките на Монте Карло анализа. Доказано е, че решението на стационарната задача е инвариантно по отношение на избора на граница. Накрая е разгледана най-общата нестационарна задача, определена от начални и гранични условия. Изследвана е съответната случайна величина и са получени оценки за дисперсията. Изведени са алгоритми за подобряване на статистиката с модифициране на естествените вероятности. Решен е проблемът за самосъгласуването на тези алгоритми с уравнението на Поасон. Показани са някои приложения в актуални симулационни задачи.

Алгоритми за анализ на слаб сигнал Анализът на отклика на системата носители в един полупроводник към слаби промени в приложеното поле осигурява информация за параметри, необходими за моделиране на функционирането на приборите в една интегрална схема. Дадена диференциална функция на отклик зависи от честотата ω и силата на приложеното постоянно електрично поле \mathbf{E}_s , около което стават промените. От физическа гледна точка задачата се формулира като намиране на връзката между една слаба хармонична пертурбация $\mathbf{E}_1 e^{i\omega t}$, наложена върху \mathbf{E}_s , и индуцираните промени на средната стойност $\langle A \rangle$ на дадена физична величина $A(\mathbf{p})$, които ще осцилират със същата честота ω . Анализът по честоти може да се преформулира с помощта на Фурие трансформация в термините на време както следва. Първоначално системата носители е в стационарно състояние f_s . След това в момент

0 към стационарното поле се прилага \mathbf{E}_1 и сумарното поле \mathbf{E} става времезависимо. Валидни са релациите: $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_s + \mathbf{E}_1(t)$, $f(\mathbf{p}, t) = f_s(\mathbf{p}) + f_1(\mathbf{p}, t)$, които водят до следното представяне на средната стойност на $A = \langle A \rangle_s + \langle A \rangle_1(t)$:

$$\langle A \rangle(t) = \int A(\mathbf{p})f_s(\mathbf{p})d\mathbf{p} + \int A(\mathbf{p})f_1(\mathbf{p}, t)d\mathbf{p}, \quad \langle f \rangle = \langle (f_s + f_1) \rangle = 1. \quad (1.21)$$

Стационарното разпределение f_s се предполага нормализирано: $\langle f_s \rangle = 1$. Второто уравнение в (1.21) е необходимо условие за това представяне на $\langle A \rangle$. В литературата са предложени различни алгоритми, които използват стационарно или променливо поле при еволюцията по траекториите, и съответно са базирани на едночастична или ансамблова техники. Изведено е и приближено уравнение за f_1 :

$$\frac{\partial f_1(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + q\mathbf{E}_s \cdot \nabla f_1(\mathbf{p}, t) = \int S(\mathbf{p}', \mathbf{p})f_1(\mathbf{p}')d\mathbf{p}' - \lambda(\mathbf{p})f_1(\mathbf{p}) - q\mathbf{E}_1(t) \cdot \nabla f_s(\mathbf{p}), \quad (1.22)$$

като е разработен метод на решаването му за физичния процес на еволюция след пертурбация - стъпка във времето [10]. Понеже (1.22) е приближено уравнение, остава отворен въпросът за условието за нормировка на f , (1.21).

Итерационен метод: В дисертацията е доказано твърдение, че откликът $\langle A \rangle_1(t)$ към една пертурбация $\mathbf{E}_1(t)$ с произволна зависимост от времето може да бъде получен от познаването на отклика $\langle A \rangle_{\text{im}}(t)$ на един импулс във времето. Показано е, че прилагането на итерационния подход към уравнение (1.22), позволява да се третира директно случаят на импулс във времето, да се докаже нормировката (1.21) и да се изведат алгоритми, на които обобщават съществуващите в литературата подходи.

Теорема 1.1 *Решението на (1.22) 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 в (1.21) се удовлетворява във всеки момент.*

Наличието на δ -функция във времето в дясната част на (1.22) в случая на импулс на полето подсказва, че е удобно да се намери интегралната форма на това уравнение. За целта се въвежда инициализираната от \mathbf{p}, t стационарна траектория $\mathbf{P}(t') = \mathbf{p} - q\mathbf{E}_s(t - t')$ и се използва фактът, че $f_1 = 0$ за отрицателни времена.

$$f_{\text{im}}(\mathbf{p}, t) = \int_0^t dt' \int d\mathbf{p}' f_{\text{im}}(\mathbf{p}', t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} + G(\mathbf{P}(0)) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy},$$

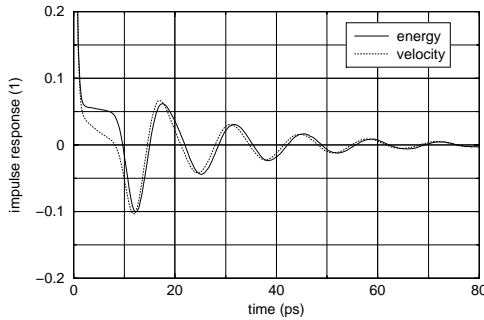
където $G(\mathbf{p}) = -q\mathbf{E}_{\text{im}} \cdot \nabla f_s(\mathbf{p})$. Уравнението формално прилича на интегралната форма на уравнението на Болцман, освен свободния член, който приема отрицателни стойности и така не може да се интерпретира като начална функция на разпределение. G обаче може да се представи като разлика на две неотрицателни функции $G = G^+ - G^-$, което благодарение на линейността на задачата води до две интегрални уравнения на Болцман с начални условия $f_{\text{im}}^\pm(\mathbf{p}, 0) = G^\pm(\mathbf{p}) \geq 0$ като $f_{\text{im}}(\mathbf{p}, t) = f_{\text{im}}^+(\mathbf{p}, t) - f_{\text{im}}^-(\mathbf{p}, t)$. Функцията f_{im} има следните свойства: от израза за G и теоремата на Гаус следва $\int G(\mathbf{p})d\mathbf{p} = 0$, така че двете функции f_{im}^\pm имат еднакви норми в началния момент $t = 0$. Тъй като уравнението на Болцман запазва нормировката, $\int f_{\text{im}}(\mathbf{p}, t)d\mathbf{p} = 0 \quad \forall t$, следва условието за нормировка в (1.21).

Модел: Тези резултати водят до следния физичен модел [11, 12]. 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 $\langle A \rangle_{\text{im}}(t)$ се получава от разликата от средните стойности на A по двата ансамбъла: $\langle A \rangle_{\text{im}}(t) = \langle A \rangle_P(t) - \langle A \rangle_M(t)$. За големи еволюционни времена двата ансамбъла релаксират към стационарната функция на разпределение f_s , а отклика на системата - към 0.

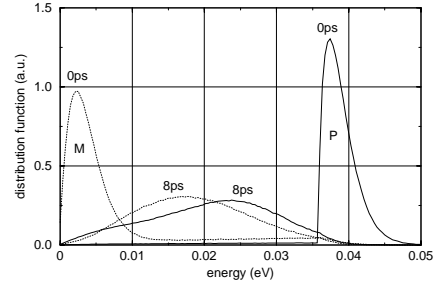
$$f_{\text{im}}^{\pm}(\mathbf{p}, t \rightarrow \infty) = C f_s(\mathbf{p}), \quad C = \int G^{\pm}(\mathbf{p}) d\mathbf{p}, \quad \langle A \rangle_{\text{im}}(t \rightarrow \infty) = 0.$$

На базата на модела са изведени 2 ансамбови алгоритъма, използващи различен избор на декомпозиция на G и 2 едночастични за колинеарни стационарно и импулсно полета, които обобщават съществуващите феноменологични алгоритми.

Приложения: Интересно явление може да се наблюдава при избор на ниски температури и полета в галиев арсенид. Фигура (1.2) показва диференциалните ско-

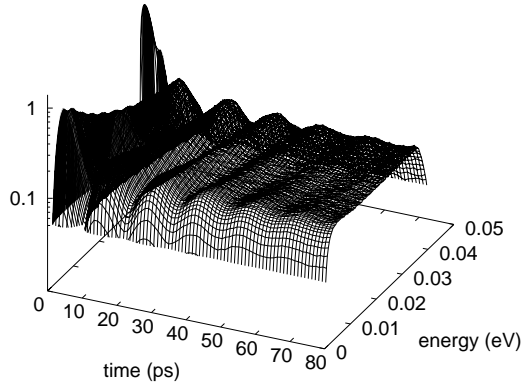


Фигура 1.2: TTR ефект

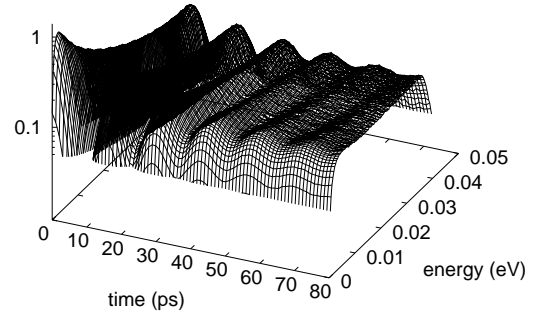


Фигура 1.3: Разпределение по енергии на двата ансамбъла при 0 и 8 пикосекунди

рост и енергия, нормализирани на съответните начални стойности при $T = 10K$ и $E_s = 120V/cm$. Независимостта на осцилациите от конкретната физична величина показва, че явлението е свързано с динамиката на носителите и се появява в средните величини чрез функцията на разпределение. Явлението се нарича Transit Time Resonance ефект [13] и се обяснява успешно от дискутирания модел със специфично редуване на насоченото движение на носителите, дължащо се на ускорение от електричното поле в условия на ниска скорост на разсейване от акустични фонони и ефективното им спиране от взаимодействието с полярни оптични фонони при достигане на енергияния праг от 0.036 eV. Над тази енергия скоростта на фононната емисия нараства драстично, така че електроните, които я достигат в резултат на ускорението на полето, бързо я губят, като практически спират своето движение след акт на разсейване. Фигура (1.3) показва началните пикове на M и P ансамблите. Еволюцията на M ансамбъла, който първоначално е образуван от електрони с ниска енергия, се характеризира от ускоряване от електричното поле в посока на фононния енергичен праг. Двата ансамбъла, които първоначално се разширяват до стационарно състояние се достигат средно около 80 пикосекунди. Двата ансамбъла имат еднаква енергия, само че спират по различни механизми. Фигури (1.4) и (1.5) и показват видовете Фиг. (1.3), където двете функции на разпределение са показани след 8 пикосекунди



Фигура 1.4: Еволюция на P ансамбъла



Фигура 1.5: Еволюция на M ансамбъла

еволюция. Точно това закъснение причинява осцилациите на физичните величини $\langle A \rangle_{\text{im}}(t)$. Разгледани са още условия, близки до равновесните и ефектът на принципа на Паули при големи концентрации на електроните.

Нехомогенни едночастични алгоритми Разглеждаме задачата за намиране на функционал от решението на стационарното нехомогенно уравнение на Болцман, определено от условия f_b по границата на областта, която за общия случай на шестмерна задача представлява равнина в реалното пространство. При типични симулационни задачи физическата система е отворена. Смята се, че през част от тази равнина се осъществява контакт с един или повече резервоари на електрони, така че са зададени гранични функции на разпределение. Останалата част от повърхността отразява електроните - дифузно или огледално, така че потокът им през границата се смята за нула. 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.

Твърдение 1.3.1 *Стационарните траектории са инвариантни по отношение на смяна на началото на отчитане на времето:*

$$\mathbf{P}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{P}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \quad \mathbf{R}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{R}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) .$$

Инициализацията на траекториите е от $t, \mathbf{p}, \mathbf{r}$, като ако $t_1 < t$, параметризацията е обратна във времето, а при $t_1 > t$ се нарича нормална.

Твърдение 1.3.2 *Стационарното уравнение на Болцман е инвариантно по отношение избора на началото на отчитане на времето.*

Извежда се интегралната форма на уравнението (обобщено от уравнение (1.30) формулирано по-долу) 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.

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

$$f_{\Omega} = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \theta_{\Omega}(\mathbf{p}', \mathbf{r}'), \quad (1.23)$$

се преформулира с помощта на спрегнатото уравнение.

Теорема 1.2 *Спрегнатото уравнение, съответстващо на (1.23), е:*

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') = \int_0^{\infty} d\tau \int d\mathbf{p}_a S(\mathbf{p}', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}') e^{-\int_0^{\tau} \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} g(\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau)) \theta_D(\mathbf{r}') + \theta_{\Omega}(\mathbf{p}', \mathbf{r}'), \quad (1.24)$$

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 δ функция и индикатор на симулационната област θ_D , имащи за цел да изравнят броя на примованите и непримовани променливи, и после се използва смяна на интеграционните променливи с което се обръща посоката на времето и параметризацията на траекториите преминава от обратна в нормална.

Гранични условия: Така задачата (1.23) се преформулира по следния начин:

$$f_{\Omega} = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') f_b(\mathbf{P}'(t_b), \mathbf{R}'(t_b)) e^{-\int_{t_b}^0 \lambda(\mathbf{P}'(y), \mathbf{R}'(y)) dy}, \quad (1.25)$$

като е необходимо: (i) интегрирането по реалното пространство да остане само по границата на областта; (ii) да се обърне посоката на еволюция по траекториите. Изразът (1.25) трябва да бъде преформулиран така, че интегралите да включват експлицитно границата, което предполага параметризация напред във времето. Следва се идеята всяка точка \mathbf{p}', \mathbf{r}' да бъде изразена чрез гранична точка и време $\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b, t$. При това точките \mathbf{p}', \mathbf{r}' които лежат върху траектория, която не достига границата, отпадат автоматично от (1.25), тъй като за тях $t_b = -\infty$.

Теорема 1.3 *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:*

$$f_{\Omega} = \int_0^{\infty} dt \int_{K_+} d\mathbf{p}_b \int_{\partial D} d\sigma |\mathbf{v}_{\perp}(\mathbf{p}_b)| f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}_b(y), \mathbf{R}_b(y)) dy} g(\mathbf{P}_b(t), \mathbf{R}_b(t)). \quad (1.26)$$

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

Най-общо границата се дефинира от уравнението $B(\mathbf{r}) = c$, където B е непрекъсната диференцируема функция на реалните координати, а c е константа. Моментът t , в който една траектория пресича границата, в такъв случай е решение на уравнението $B(\mathbf{R}(t)) - c = 0$. Това определение може да бъде използвано в (1.25), като се въведе допълнително интегриране по времето заедно с фактора $\delta(B(\mathbf{R}(t)) - c) \phi(\mathbf{R}(t))$. Целта на функцията ϕ е да запази стойността на f_{Ω} непроменена в съответствие с:

$$\int_{-\infty}^0 dt \delta(B(\mathbf{R}(t)) - c) \phi(\mathbf{R}(t)) = 1; \quad \int \delta(g(t)) \phi(t) dt = \int \delta(t - t_b) |g'(t_b)|^{-1} \phi(t_b) dt \quad (1.27)$$

Също така се предполага, че аргументът на делта функцията има само един корен, така че е валидно второто равенство в (1.27). От (1.27) следва за ϕ :

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

Тук \mathbf{v}_{\perp} е компонентата на скоростта, нормална към повърхността и \mathbf{r}_b , \mathbf{p}_b са стойностите на позицията и импулсът по границата. Така разширеното уравнение (1.25) добива вид:

$$f_{\Omega} = \int_{-\infty}^0 dt' \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \delta(B(\mathbf{R}(t')) - c) \phi(\mathbf{R}(t')) f_b(\mathbf{P}'(t'), \mathbf{R}'(t')) e^{-\int_{t'}^0 \lambda(\mathbf{P}'(y), \mathbf{R}'(y)) dy} .$$

То се преобразува, като се сменят променливите така, че да се получи параметризация напред във времето и после се използва тъждеството:

$$\int d\mathbf{r} \delta(B(\mathbf{r}) - c) h(\mathbf{r}) = \int \frac{d\sigma}{|(\nabla_{\mathbf{r}}B)(\mathbf{r}_b)|} h(\mathbf{r}_b) .$$

Нехомогенни едночастични алгоритми и ергодичност: Следва итерационен анализ на (1.26), с помощта на който се извеждат двата основни алгоритъма на едночастичната техника. (i) Алгоритъм с усредняване по състоянията преди разсейване:

Теорема 1.4 Средната стойност на една физична величина $\langle A \rangle_{\Omega}$ се получава съгласно с формула

$$\langle A \rangle_{\Omega} = f_D \frac{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in \Omega)} A(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))}{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in \Omega)} \lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))} , \quad (1.28)$$

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

Показва се, че j -тия член на итерационният ред за $f_{A\Omega}$ е произведение от последователни условни вероятности за свободен полет и разсейване, които са компоненти на траекторията на едни класически електрон, и завършва с:

$$I_A = \int_0^{\infty} dt_j \left\{ e^{-\int_0^{t_j} \lambda(\mathbf{P}_j(y), \mathbf{R}_j(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}(t_j), \mathbf{R}(t_j)) \right\} \frac{\theta_{\Omega}(\mathbf{P}_j(t_j), \mathbf{R}_j(t_j)) A(\mathbf{P}_j(t_j), \mathbf{R}_j(t_j))}{\lambda(\mathbf{P}(t_j), \mathbf{R}(t_j))} .$$

(ii) Алгоритъм с усредняване по време и ергодичност на системата

Теорема 1.5 Физическата система, отговаряща на стационарната задача, определена от гранични условия, е ергодна и в частност важи следната оценка:

$$\langle A \rangle_{\Omega} = f_D \frac{\int dt (A\theta_{\Omega})(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t))}{T} , \quad (1.29)$$

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

Доказателството се основава на алтернативно представяне на интеграла I_A .

$$I_A = \int_0^{\infty} dt_{j+1} \left\{ e^{-\int_0^{t_{j+1}} \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}_2(t_{j+1}), \mathbf{R}_2(t_{j+1})) \right\} \int_0^{t_{j+1}} dt_j (A\theta_{\Omega})(\mathbf{P}_2(t_j), \mathbf{R}_2(t_j))$$

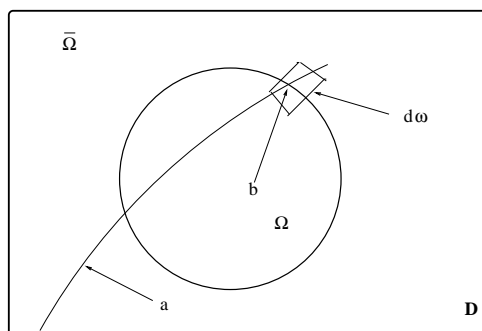
Така ергодичността на системата следва от Монте Карло метода (1.20), и не е необходимо *a priori* предположението за замяна на усредняването по ансамбъл с усредняването по време при оценка на физичните величини.

Избор на границата: Тук са дискутирани някои интересни особености на стохастичния подход, както и съгласуваността му по отношение на свободата за избор на границата. Разглеждаме една симулационната област D с граница S_D , определена от физични съображения. Вътре се избира произволна граница, която разделя симулационната област на подобласт Ω без обща граница с D : $S_\Omega \cap S_D = \emptyset$ и допълнението $\bar{\Omega}$, Фиг. 1.6. Задачата е да се изчисли $f_{\bar{\Omega}}$, като за удобство се предполага познаването на f_D и Φ_D . Разглеждат се три възможни подхода за приложение на алгоритъма:

А) Траекториите започват от S_D и свършват върху S_D . Времето, прекарано в $\bar{\Omega}$, се използва за оценка на $f_{\bar{\Omega}}$, но се симулира в цялата област D , която включва и Ω .

В) Алтернативно, алгоритъмът се прилага само в $\bar{\Omega}$. Траекториите започват от обединената граница $S_D \cup S_\Omega$ навътре в $\bar{\Omega}$. Всяка траектория се прекъсва при достигане на някоя от границите. В този случай не се симулира в Ω , но се използва $f_b|\mathbf{v}_\perp|$ върху границата с Ω , за инжекция на траектории към $\bar{\Omega}$.

С) От f_D се изважда f_Ω , получено от симулация само в Ω : траекториите започват от S_Ω и свършват върху S_Ω . Сега се използва $f_b|\mathbf{v}_\perp|$ върху границата с Ω , но за инжекция на траектории към $\bar{\Omega}$. Очевидно една симулация в D дава най-подробна информация, защото включва и двете подобласти. Въпросът е дали траекториите на **А** могат да се разделят от границата S_Ω на подтраектории, които да бъдат интерпретирани като траектории, генерирани от подходи **В** и **С**.



Фигура 1.6: Подобласти на симулационната област D

Теорема 1.6 *Стойността на $f_{\bar{\Omega}}$ не зависи от избора на границата: подходът **А** осигурява такова разпределение на траекториите по S_Ω , каквото би се получило при формалното прилагане на подходи **В** и **С**.*

В доказателството се показва, че стационарността на системата е необходимо условие за Теорема 1.6.

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

на носители в полупроводникови структури.

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int_0^t dt' \theta_D(\mathbf{R}(t')) \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t'), t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{R}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \\ + e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} f_i(\mathbf{P}(0), \mathbf{R}(0)) + e^{-\int_{t_b}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} f_b(\mathbf{P}(t_b), \mathbf{R}(t_b), t_b), \quad (1.30)$$

Интегрирането по времето е в интервала (t_0, t) . t е еволюционното време, а t_0 е по-голямото от началното време, прието за 0 и времето до границата t_b , като условието е всички точки от траекторията, параметризирана назад във времето в интервала $\tau_b = t - t_b$, да принадлежат на D . И в двата случая $f(t_0)$ е известно - зададено от началното или граничните условия. Докато при стационарни условия τ зависи само от инициализиращата точка \mathbf{p}, \mathbf{r} , сега условията са такива, че зависи и от t . За дадена инициализация $\mathbf{p}, \mathbf{r}, t$ на обратната траектория един от двата члена f_i или f_b винаги е нула. Функцията на разпределение е нормирана на броя носители в областта D , $N(t) = \langle \theta_D \rangle$. Съответно $N(t, \Omega) = \langle \theta_\Omega, f \rangle$ е актуалният брой носители в подобласт Ω . Задачата да се изчисли

$$\langle A \rangle = \int d\mathbf{p} \int_D d\mathbf{r} A(\mathbf{p}, \mathbf{r}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p} \int_D d\mathbf{r} \int_0^\infty dt' A(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \delta(t - t') f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t'), \quad (1.31)$$

средната стойност на физична величина A се преформулира с помощта на спрегнатото уравнение.

Теорема 1.7 *Спрегнатото на (1.30) уравнение е:*

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = \int_{t'}^\infty d\tau \int d\mathbf{p}^a \theta_D(\mathbf{r}') S(\mathbf{p}', \mathbf{p}^a, \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^\tau \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} g(\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau), \tau) + g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t'), \quad (1.32)$$

където свободният член g_0 , съответстващ на (1.31), има вид

$$g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = A(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (1.33)$$

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

Вероятностен модел: Решението на спрегнатото уравнение (1.32) при специалния избор на $A = \theta_\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ се използва за намиране на случайната величина, асоциирана с Ансамбловия Монте Карло метод. За целта разглеждаме величината:

$$G(\theta_\Omega, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0) = \int_0^\infty dt' e^{-\int_0^{t'} \lambda(\mathbf{P}_\alpha(y), \mathbf{R}_\alpha(y)) dy} g(\mathbf{P}_\alpha(t'), \mathbf{R}_\alpha(t'), 0)$$

която, както ще бъде показано, дава вероятността един носител с начални координати $\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0$ (тези стойности инициализират траекторията $\mathbf{P}_\alpha(y), \mathbf{R}_\alpha(y)$) да се появи в Ω в момент t , без да напуска D по време на еволюцията си. Въвеждат се величините p_S и w , за които се показва, че имат смисъл на вероятностни плътности за генерация на състояние \mathbf{p}' след разсейване и време t на свободен полет.

$$p_S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{r}) d\mathbf{p}' = \frac{S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{r})}{\lambda(\mathbf{p}, \mathbf{r})} d\mathbf{p}', \quad w(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0) dt = e^{-\int_{t_0}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \lambda(\mathbf{p}(t), \mathbf{R}(t)) dt. \quad (1.34)$$

Теорема 1.8 *C помощта на (1.34) G може да бъде представен като безкрайномерен интеграл:*

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

$$\times \sum_{i=0}^m \theta(t - t_i) \left(\prod_{j=0}^{i-1} \theta_D(\mathbf{R}_j(t_{j+1})) \right) \theta_\Omega(\mathbf{P}_i(t), \mathbf{R}_i(t)) \theta(t_{i+1} - t), \quad (1.35)$$

където е използвана конвенцията:

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

Следва анализ на физичните аспекти на полученото уравнение: да разгледаме специалния случай на еволюция в цялото фазово пространство \mathcal{T} , така че $\Omega = D = \mathcal{T}$. Тогава $\theta_\Omega = \theta_D = 1$ и случайната величина в (1.35) се свежда до

$$\psi_{\mathcal{T}} = \sum_{i=0}^{m-1} \theta(t - t_i) \theta(t_{i+1} - t); \quad 0 < t_1 < t_2 \dots$$

Времето ос се разделя на интервали от последователните времена в (1.35). За всяко време t и за всеки избор на последователните времена t_i има един и само един интервал $t_j < t < t_{j+1}$ който съдържа t . Тогава $\theta(t - t_j) \theta(t_{j+1} - t) = 1$, докато останалите членове в $\psi_{\mathcal{T}}$ са нула. Функциите на Хевисайд разделят еволюцията на взаимно изключващи се събития, вероятността за които се сумира до единица, $\psi = 1$. В този случай стойността на (1.35) се оценява лесно: $G(\theta_{\mathcal{T}}, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0) = 1 \quad \forall t, \quad \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha$. Този закон за запазване на вероятността е алтернативният начин да се каже, че частицата трябва да се намира все някъде в пространството по време на еволюцията. В общия случай, когато $\Omega \in D \neq \mathcal{T}$ индикаторите на симулационната област отхвърлят някои от събитията, отчитани от $\psi_{\mathcal{T}}$. Случайната величина ψ в (1.35) е вече не фиксирана на 1, но има нулата като алтернативна стойност. Така ψ отчита само събития, в които индикаторите на областта не са нула и отхвърля остатъка от събития, допълващи $G(\theta_\Omega, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0)$ до $G(\theta_{\mathcal{T}}, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0)$. Следва, че $G(\theta_\Omega, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0)$ е вероятността за един носител първоначално в $\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0$ да се появи в Ω в момент t , без да напуска D по време на еволюцията. Този анализ води до следната оценка:

Теорема 1.9 *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 $\sigma_\Omega(t)^2 = \int_0^t dt_b \sum_{l(t_b)} \sigma_{\psi_l(t_b)}^2(t)$.

Ансамблов алгоритъм за моделиране на прибори: Показва се, че само при специален избор на началната плътност, плътността по границата, както и на (1.34) за преходна плътност, с която се строят траекториите, всяка частица допринася в оценката $\langle A \rangle$ със същата стойност A_n на физичната характеристика A , каквато би имал един реален носител в заеманата фазова точка от частицата. В частност произходът на последната не може да бъде идентифициран. Оценката за $\langle A \rangle$ е сума от приносите

от начално и гранични условия:

$$\langle A \rangle(t) = \langle A \rangle_i + \langle A \rangle_b \simeq \sum_{n=1}^{N_i(t)} A_n + \sum_{n=1}^{N_b(t)} A_n = \sum_{n=1}^{N(t)} A_n.$$

Този избор на начално и гранични условия определя схемата, по която Ансамбловият Монте Карло алгоритъм инициализира частици в началния момент 0 вътре в областта D и във всеки момент $t_b \in [0, t]$ по границата. Един път инициализирани, тези частици следват еволюция, определена от естествените за Болцмановия транспортен процес вероятности w и p_S , последователното прилагане на които е ядрото на алгоритъма. Построените числените траектории са възможни реални траектории на полупроводниковите носители. В момент t само частиците, останали по време на еволюцията вътре в D , допринасят за оценката на A . Една Ансамблова Монте Карло частица има същите физични характеристики $A(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ като на един реален носител. Тези разсъждения позволяват да се разглежда така полученият алгоритъм като емуляция на естествения процес на транспорт на токовете носители. Това представя и широко разпространеното разбиране за Ансамбловия алгоритъм за симулация на полупроводниковите прибори. Разликата сега е, че този алгоритъм беше изведен от прилагането на формалните подходи на числената теория на Монте Карло метода. Изборът на алтернативни начална и преходна вероятностни плътности отваря пътя на алгоритми с модифицирани вероятности, които използват статистически тегла.

Модифициране на естествените вероятности: Преходната плътност не може да бъде произволно избрана поради това, че ядрото на уравнението на Болцман е изродено: в него трябва да се имат предвид всички делта функции, което означава, че модифицираната еволюция на частиците трябва да протича по сегменти от класически траектории, а при разсейването да се имат предвид законите за запазване на импулса и енергията. В този смисъл модифицираните вероятности може да бъдат представени като генерация на процеси на свободен полет и разсейване, които имат разпределения различни от естествените такива. При този подход еволюцията (и по такъв начин разпределението и броят) и теглото на частиците се различава от това на стандартните ансамбъл частици. Заместването на вероятностите на ансамбловия метод със съответни вероятности P^{bias} води до тегла $w(t) = P^B / P^{bias}(t)$ и да запазва пресмятаната стойност непроменена. Всяка модификация в еволюционен момент t определя фактор $w(t)$, който умножава натрупаното при преходната еволюция тегло w_e , което, от своя страна, умножава случайната величина за съответната оценка на физичните средни: $w_e = \prod_i w(t_i)$. Показва се, че оценката за средната стойност на A става: $\langle A \rangle(t) \simeq \sum_{n=1}^{N^{bias}(t)} w_n A_n$, където $N^{bias}(t)$ е броят на модифицираните частици, а w_n е теглото на n -тата от тях.

(i) *Модифицирана начална плътност:* Начално условие може да е всяка неотрицателна функция $P_{0,i}^{bias}$, нормализирана на единица в D , която не е нула, там където и началното условие не е нула. Теглото на частица, инициализирана в (\mathbf{p}, \mathbf{r}) , е:

$$w(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{P_{0,i}^B(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{P_{0,i}^{bias}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}, \quad \langle A \rangle_i \simeq \sum_{n=1}^{N(0)} \frac{P_{0,i}^B}{P_{0,i}^{bias}} \psi_n = \sum_{n=1}^{N(0)} \psi_n = \sum_{n=1}^{N_i^{bias}(t)} w_n A_n,$$

където N_i^{bias} е броят на останалите в симулационната област в момент t модифицирани частици. Горната оценка е направена при условие, че теглото в D се запазва.

(ii) *Модифицирани гранични условия:* Разгледани два възможни начина на избор на

f^{bias} . Равновесното разпределение $f_e(\epsilon, T) = \frac{1}{\bar{\epsilon}} \exp\{-\frac{\epsilon}{\bar{\epsilon}}\}$, $\bar{\epsilon} = 1.5k_B T$, може да бъде използвано за избора $f^{bias} = f_e(\epsilon, T_b)$ съответстващ на по-висока температура T_b в контактната област. Теглото се оценява от f_e/f^{bias} . Вторият избор на f^{bias} използва идеята за контрол на теглата. Желана стойност на теглата w_1 на модифицираните частици с енергия под дадена стойност ϵ_1 се постига, като f^{bias} се избере:

$$f^{bias}(\epsilon) = \frac{f_e(\epsilon)}{w_1 \bar{\epsilon}} \quad \epsilon \leq \epsilon_1, \quad f^{bias}(\epsilon) = \frac{f_e(\epsilon)}{w_2 \bar{\epsilon}} \quad \epsilon > \epsilon_1 \quad w_2 = \frac{w_1 f_e(\epsilon_1)}{c_1 - 1 + f_e(\epsilon_1)}.$$

Стойността на w_2 се определя от избора на w_1 и ϵ_1 в условието за нормировка на f^{bias} . Естественото разпределение се получава при избора $w_1 = 1$. При избор $w_1 > 1$ ефективно намалява броят частици с енергии под ϵ_1 . Съответно броят на леките частици с енергии над ϵ_1 , нараства.

(iii) *Свободен полет*: Разпределението на времетраенето на свободния полет може да се модифицира на w^{bias} чрез промяната на физичната стойност на сумарната вероятност за разсейване за единица време от дадено състояние λ в w с една числена такава, λ_b . Такова заместване води до тегло: $w(t) = p(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0)/w^{bias}(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0)$. В специалния случай на избор $\lambda_b = 0$ частиците могат да продължат без разсейване по траекторията си, натрупвайки тегло $w(t) = p(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0)$. По такъв начин частици с подходяща скорост може да бъдат 'окуражавани' да попадат в една желана област от симулационното пространство.

(iv) *Разсейване от фонони*: Разсейването от фонони може да бъде модифицирано чрез промяна на всяка от двете стъпки на избор на състоянието след разсейване. Изкуствено 'нагриване' на системата носители се получава, когато се даде предимство на абсорбция на фонони пред емисията им. В зависимост от избрания механизъм процесът може да бъде контролиран от параметъра $w \geq 1$,

$$\lambda_a^{bias} = \lambda_a + \lambda_e \left(1 - \frac{1}{w}\right), \quad \lambda_e^{bias} = \frac{\lambda_e}{w}.$$

Ако в процеса на симулация се избере например абсорбция, теглото на частицата се променя с фактора $\lambda_a/\lambda_a^{bias}$; алтернативно, при емисия този фактор е $\lambda_e/\lambda_e^{bias} = w$. Второ, частиците може да бъдат насочвани към предпочитана област чрез промяна на избора на ъгъла на разсейване. В частност разглеждаме изотропен процес, при който разпределението $\chi = \cos \theta$ е константа: $p(\chi) = 1/2$ за $\chi \in (-1, 1)$. Тук θ се дефинира като ъгъла на импулса на състоянието след разсейване с дадена посока. Следната модификация увеличава вероятността за разсейване напред за сметка на отражението в обратната посока.

$$p^{bias}(\chi) = \frac{1}{2w} \text{ if } -1 \leq \chi < \chi_0, \quad p^{bias}(\chi) = \frac{w}{2} \text{ if } \chi_0 \leq \chi < 1$$

Тук $w \geq 1$ е даден параметър, χ_0 се определя от нормализацията: $\chi_0 = w - 1/w + 1$. Въвежда се и $P^{bias}(\chi_0) = 1/1 + w$. В този случай ако r е равномерно разпределено случайно число в интервала между 0 и 1, то:

$$\text{if } r < P^{bias}(\chi_0) : \chi_r = 2wr - 1, \quad \frac{p}{p^{bias}} = w; \quad \text{else } \chi_r = 1 - \frac{2(r-1)}{w}, \quad \frac{p}{p^{bias}} = \frac{1}{w}.$$

Следва, че теглото на една частица се увеличава или намалява с фактора w всеки път, когато χ се генерира с тази плътност.

Самосъгласуван модифициран алгоритъм: Кулоновото взаимодействие между полупроводниковите носители се отчита от уравнението на Поасон:

$$\nabla(\epsilon\nabla V) = q(D + C), \quad C(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p}f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}).$$

Тук V е електричният потенциал в прибора и D е концентрацията на йонизираните примеси. Уравнението свързва електричния потенциал V с функцията на разпределение f . Уравнението на Болцман за взаимодействащи си или Кулонови носители става нелинейно чрез електричната сила $\mathbf{F}(f)(\mathbf{r}, t)$, която сега става зависима от функцията на разпределение f . Понеже всички резултати от предишната секция бяха получени на базата на линейността на разглежданите интегрални уравнения, повече не е възможно да се приложат стъпките, използвани за извода на алгоритмите, модифициращи естествения ход на еволюцията.

Решението се търси в итеративната процедура на самосъгласуването между ансамбъла частици, представляващ уравнението на Болцман и уравнението на Поасон. Последното се дискретизира, като симулационната област се разделя на мрежа от клетки Ψ_l . Ансамбълът частици се придвижва на стъпки във времето $\Delta t \simeq 0.1fs$. На края на всяка стъпка, да кажем в момент t , се пресмята разпределението на заряда $qC(\mathbf{r}_l, t)$, който се аташира към съседните точки от мрежата. Плътноста на заряда C_l се използва за намиране решението на уравнението на Поасон, което актуализира електричната сила $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ в рамките на следната схема:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{EMC} & \text{PE} & \text{EMC} & \text{PE} & \text{EMC} & \text{PE} & \\ f_0 & \xrightarrow{\Delta t} & f_{\Delta t} & \xrightarrow{2\Delta t} & f_{2\Delta t} & \cdots \xrightarrow{t} & f_t \end{array}$$

Електричната сила от своя страна управлява траекториите на частиците в следващия интервал по време $t, t + \Delta t$.

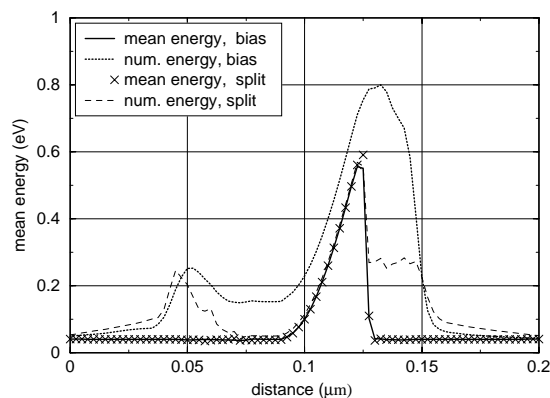
Доказва се, че прилагането на модифицирани събития става възможно благодарение на две свойства на горната схема: (1) Електричното поле остава 'замразено' между две последователни стъпки на решаване на уравнението на Поасон. (2) Марковският характер на еволюцията на Болцмановите частици. Възниква въпросът каква да бъде съдбата на модифицираните частици на всяка следваща еволюционна стъпка след актуализирането на полето. Може ли те да продължат еволюцията със същите разпределение и тегла, съответстващи на момента τ , или трябва да бъде инициализиран нов ансамбъл от частици, имащи нови тегла и разпределение, които да могат коректно да оценят разпределението на носителите в момент $\tau + \Delta t = t$? Отговорът е, че и двата начина са възможни.

Теорема 1.10 *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:*

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

Приложения: Представени са някои симулационни експерименти, които имат за цел да проверят практическата страна на описаните възможности за модифициране. Разгледани са две типични ситуации: надбариерна инжекция и протичане на подпрагов

ток, при които явления с малка вероятност контролират функционирането на прибора. Първо е разгледана стационарна задача на транспорт през $n-i-n$ диод, в който

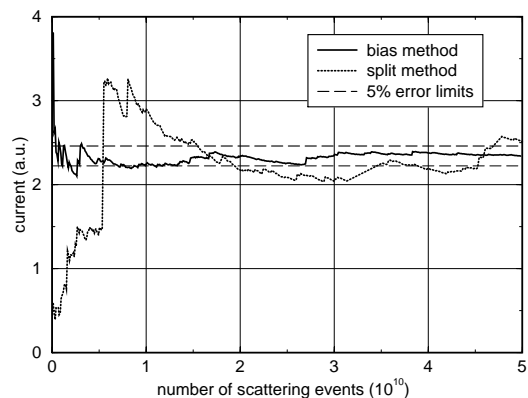


Фигура 1.7: Средна енергия на електроните (mean) и на симулираните частици, получени с разделяне (split) и с модифициране (bias).

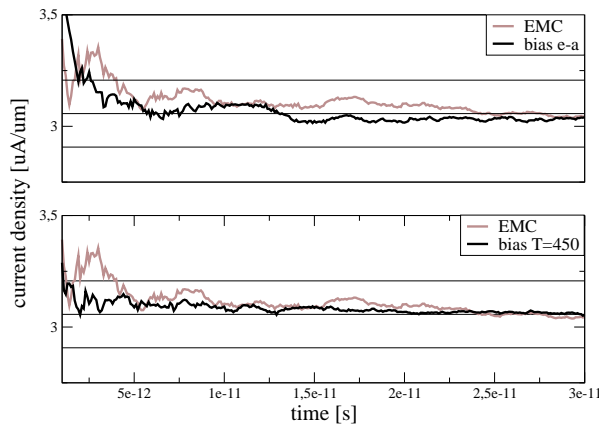
потенциалната бариера, формирана в i областта е с височина 0.8 електронволта. При тези условия, поради екстремалните стойности на вграденото поле, концентрацията на електроните намалява над 14 порядъка и задачата може да се разглежда като линейна, както и да се използва едночастичният алгоритъм. На Фиг. 1.7 са сравнени алгоритъмът с разделяне на траекториите и един алгоритъм, при който се модифицират както вероятностите за емисия и абсорбция, в резултат на което се получава изкуствено загряване на частиците, така и изборът на ъгъла на състоянието след разсейване. И двата подхода се прилагат само в i областта. Показани са и разпределенията на енергията на числените частици, които разкриват типични особености на двата подхода: в случая с разделяне двата пика в ляво от главния се дължат на отразени от бариерата частици. Разделянето на траекториите спира при достигане на върха на бариерата, така че там енергията на физични носители и числени частици е една и съща за този алгоритъм. За разлика от него загретите частици имат значително по-висока енергия и съвсем различно енергетично разпределение. Независимо от това физичните криви показват отлично съвпадение, което е успешен тест на подхода с модифицирани вероятности. Други експерименти показват, че в i об-

ластта, където се търси подобряване на статистиката, този подход дава на порядък по-голяма точност в сравнение с метода на разделяне. Особено чувствителен към избора на алгоритъм се оказва токът през структурата. Модифицирането на естествените вероятности води в случая до по-бърза сходимост и по-голяма стабилност, както се вижда от поведението на кривите на Фиг. 1.8.

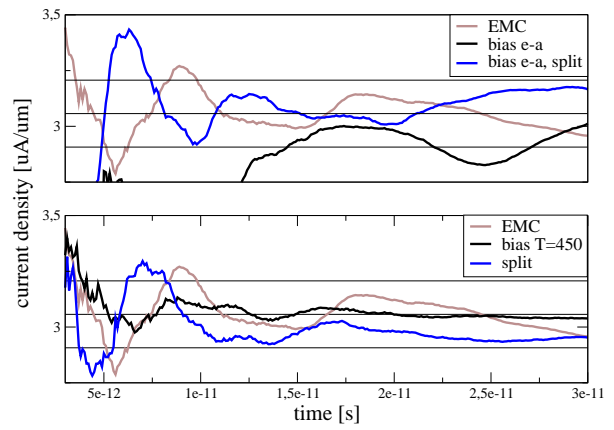
Следващите две фигури показват самосъгласувани симулации на тока в актуален прибор, произведен от Intel [14]. Това е MOSFET с дължина на гейта $15nm$, допинг в каналната област $2 \cdot 10^{19} cm^{-3}$, както и дебелина на окиса $0.8nm$. Симулиран е подпърагов режим на работа на прибора, определен от напрежение на гейта $V_G = 0.375V$,



Фигура 1.8: Еволюция на тока през прибора, получен с двата метода. Показан е интервалът, в който грешката е под 5 процента.



Фигура 1.9: Самосъгласувани двумерни симулации на MOSFET. Показан е подпраговият ток, получен от дрейфова скорост в канала чрез стандартния ансамблов алгоритъм (EMC), чрез модификация на вероятностите за емисия и абсорбция на фонони (e-a), и чрез повишаване на температурата в инжектирания контакт от 300 на 450. Отбелязан е интервалът, в който грешката е под 5 процента.



Фигура 1.10: Подпраговият терминален ток, получен от потока на частици в контактите чрез стандартния ансамблов алгоритъм (EMC), чрез модификация на вероятностите за емисия и абсорбция на фонони (e-a) и модификация на температурата, комбинацията на последният алгоритъм с техника за разделяне на траекториите (e-a,split), и само с разделяне на траекториите (split).

дрейново напрежение $V_D = 0.1V$, при температура на решетката $T = 300K$. Токът се изчислява по два начина - от дрейфовата скорост на частиците, усреднена в централната част на канала, или от потока им през контактите. Докато в първия случай, Фиг. 1.9, и двата модифицирани алгоритъма демонстрират по-голяма стабилност, което се свързва с факта, че в канала статистическите средни се получават главно от леки частици, при Фиг. 1.10 това не е така. Модифицираната крива (e-a) показва силна неустойчивост, което се обяснява с наличието и на леки, и на тежки частици в контактните области. Вариацията на теглата въздейства и чрез уравнението на Поасон, като води и до вариация в електричното поле. Наистина, паралелното прилагане на алгоритъма за разделяне на тежките частици води до подобрене на стабилността, крива (e-a, split). Отново модифицирането на температурата на инжектираните носители води до по-добри резултати, като за сравнение служи кривата (split), получена само чрез стандартния алгоритъм за разделяне на траекториите. Тези резултати показват, че прилагането на модифицирани алгоритми трябва да се използва съгласувано със съответните методи за получаване на физичните средни, които трябва да са свързани с областите на подобрена статистика.

1.3.3 Глава 3: Моделиране на квантов транспорт

В тази глава се разглежда развитието на някои теоретични и числени подходи, свързани с приложението на формализма на Вигнер за изследване и моделиране на физични явления, определящи транспорта на токови носители в наноелектронни структури. Поради това, че е дефинирана във фазовото пространство, Вигнеровата квантова механика дава възможност за естествено обобщение на понятията и методите, разработени в класическата механика. Запазват се основни класически съотношения като например това, че и наблюдаеми, и състояния са представяни от функции на координатите и импулса. Квантовомеханични очаквани стойности на физичните величини и тяхното вероятностно разпределение се изразяват по правила, подобни на тези от класическата статистическа механика. По такъв начин функцията на Вигнер се оказва квантов аналог на класическата функция на разпределение. Тя е реална величина като класическия си аналог, за разлика от който обаче допуска отрицателни стойности. По-нататък, равновесната функция на Вигнер формално съвпада с класическия си аналог, факт, който се оказва изключително удобен за третиране на граничните условия. Първите приложения на този формализъм за симулации на прибори, [15, 16, 17], започват преди повече от 20 години с изследвания на балистичен транспорт с помощта на кохерентната функция на Вигнер. Още тогава става ясно, че дисипативните процеси на де-кохеренция, каквито са взаимодействието на електроните с различни източници на разсейване, са не само механична част от физиката на полупроводниковите прибори: пренебрегването на взаимовръзката между кохерентните и дисипативни компоненти на транспорта може да доведе до неправилно разпределение на заряда в прибора и така до нефизично описание на поведението му [18]. Първоначално се използват феноменологични модели на основата на приближението на време на релаксация [19, 20, 21, 22]. Включването на Болцмановия оператор на разсейване в уравнението на Вигнер [23] се предлага отначало като априорно предположение, което може да е 'адекватно на дадено ниво' [18]. Може ли класическият модел на Болцманово разсейване да бъде включен в квантовата картина на Вигнеров транспорт? И ако може, то кои са физичните условия, при които такова описание на транспорта на носители е адекватно? Отговорът на тези въпроси не е тривиален и изисква: (I) изследване на условията, при които е възможно взаимодействията на електрона с нарушенията на периодичността на кристалната решетка да бъдат представени като класическо разсейване. Тоест необходим е анализ на скалите на физичните величини и явленията, които са извън или 'над' класическата картина в смисъл на Фиг. 1.1; (II) един теоретичен извод на самото уравнение чрез прилагане на основните принципи на квантовата механика.

(I) Анализът на скалите е свързан с изследването на ранната еволюция на оптически генерирани неравновесни носители, което се утвърди като важна област на физиката на твърдото тяло през последното десетилетие на миналия век. В резултат от сложното взаимодействие на носителите помежду си, с фонони, с поляризацията на решетката и с оптичното поле се наблюдават множество квантови ефекти. Измежду тях са не-Марков процес на развитие, дължащ се на памет за еволюцията, което води до нейното забавяне (Retardation Effect), енергетично уширение в резултат на нару-

шаване на закона за запазване на енергията (Collisional Broadening), [24], [25], [26], [27], както и ефекта от действието на полето в процеса на разсейване (Intra Collisional Field Effect), [28], [29], [30] [31] [32]. Тези ефекти се описват от различни модели за ранната динамика на системата, които са 'над' уравнението на Болцман, като отчитат взаимодействието на квантово ниво. Такива модели са системата уравнения на Блох [33], уравненията на Levinson [34] и Barker-Ferry [35] и други [36], [37]. Тук трябва да се отбележи ролята на моделирането в изследването на тези явления. Докато първите числени резултати са на възраст около две десетилетия, първите успешни измервания, които експериментално установяват СВ и RE ефектите, са направени преди десетилетие [25]. Това е свързано с изискванията за прецизност на експеримента, доближаващ границата на съотношенията за неопределеност.

Теория и експеримент показват нарушаване на закона за запазване на енергията в началната фаза на установяване на електрон-фононното взаимодействие, когато системата може да заема 'забранени' от класическата физика състояния [26, 31]. Класическата делта функция от енергията се формира при по-големи еволюционни времена, които са от порядъка на няколкостотин фемтосекунди за типични полупроводници като *GaAs*. Този преход е обяснен теоретично от Ringhofer et al [38]: с помощта на анализ, използващ малък параметър и водещ до делта функцията и първата ѝ поправка към уравнението. Необходимо условие за отпадане на поправката е производението от скалите на времето и енергията на фононите да стане много по-голямо от константата на Планк. Поради това, при големи еволюционни времена квантовите ефекти във взаимодействието между електрони и фонони може да бъдат пренебрегнати. Съответно ICFE не може да бъде наблюдаван при стационарен транспорт независимо от силата на полето [39], а само в процеса на установяването на взаимодействието, което предхожда формирането на класическата делта функция за запазване на енергията. Класическият Болцманов модел на разсейване е валиден за еволюционни времена, по-големи от този период. Физичните условия в повечето съвременни полупроводникови прибори се характеризират от пространствено-временни скали от няколко десетки нанометъра и пикосекунди. При тези условия остава валиден класическият модел на разсейване, докато кохерентната динамика изисква описание на квантово ниво. Като адекватен инструмент за моделиране на такива прибори се установява уравнението на Вигнер-Болцман.

(II) Изводът на Вигнер-Болцманово уравнение за взаимодействие с фонони е направен от Nedjalkov в [31], а наскоро за алтернативния случай на разсейване от йонизирани примеси от Querlioz et al [40], [41].

Подходът, използван в [31], позволява систематичен анализ на приближенията, както и обединяването им в йерархията от модели, показана на Фиг. 1.13 по-нататък в изложението. Йерархията започва от обобщената за цялата система функция на Вигнер [42], включва уравненията на Levinson и Вигнер-Болцман и завършва с модела на класически транспорт. Получено е и едно ново уравнение, при което взаимодействието електрон-потенциал е като в уравнението на Вигнер, докато електрон-фононното е като това на Levinson [43]. Напоследък този подход беше използван за обобщаване на уравненията на Levinson и Barker-Ferry, оригинално изведени за хомогенен полупроводник, за еволюция на начален пакет носители в квантова жица [44].

Изложението в тази глава следва конструкция, при която първо са изведени уравненията на Levinson и Barker-Ferry за квантова жица. Използвани са основни принципи на квантовата механика, приложени към система от физични допускания, на които след това е направен детайлен анализ. Показани са и числени резултати, които демонстрират ефектите на СВ, CR и ICFE. Те са изследвани в случай на силно електрично поле и ултрабърз транспорт в полупроводници в [45, 46, 47, 39, 31, 44] и в случай на фотоиндуцирани полупроводници в [48, 26]. След това е представена йерархията от кинетични модели, започваща с обобщената функция на Вигнер и свършваща с класическото уравнение на Болцман, която се извежда по същия начин, при най-общи условия за транспорт. Последната част от главата е посветена на разработване на Монте Карло методи и алгоритми. Тази конструкция на изложението позволява да се следва спиралата физични модели \rightarrow уравнения и обратно към физичен анализ и модифициране на модела. Числените подходи позволяват не само получаването на зависимости и резултати за физичен анализ, но и дават картина на транспортни процеси, която обратно служи за физична интерпретация на моделите. Благодарение на това ще бъде показано, че формалната аналогия между класическо и квантово описание на транспорт на носители става дори по-близка. Към Вигнеровия формализъм може да бъдат асоциирани частици. Те имат характеристиките на класически частици, като в резултат от действието на Вигнеровия потенциален оператор придобиват ново качество, което е носител на квантовата информация и се отчита при получаването на средните на физичните величини.

Еволюция в квантова жица: Физическата система се състои от група токови носители, чиято еволюция протича в квантова жица, по която е разпределено електрично поле, и при условия на взаимодействие с вибрациите на решетката. Предполага се, че жицата е оформена технологично вътре в полупроводников кристал, така че вибрациите се описват от обемни фонони. Хамилтонианът на системата

$$H = H_0 + V + H_p + H_{e-p} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} + i\hbar \sum_{\mathbf{q}} F(\mathbf{q})(a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\hat{\mathbf{r}}} - a_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\hat{\mathbf{r}}})$$

се получава от тези на свободния електрон, H_0 и свободните фонони, H_p , потенциала в жицата $V(\mathbf{r})$ и електрон-фононното взаимодействие H_{e-p} . Тук $a_{\mathbf{q}}^\dagger$ и $a_{\mathbf{q}}$ са операторите на създаване и унищожение на фонон от вид \mathbf{q} , $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$ е енергията, а $F(\mathbf{q})$ е функция, която зависи от вида на фононите. Състоянието на фононната подсистема се описва числата $\{n_{\mathbf{q}}\} = \{n_{\mathbf{q}_1}, n_{\mathbf{q}_2}, \dots\}$, където $n_{\mathbf{q}}$ е броят фонони от вид \mathbf{q} , като за удобство всички фонони се предполагат от един и същи тип, така че индексът j става излишен. За краткост записваме базисните за системата вектори като: $|\{n_{\mathbf{q}}\}, \mathbf{r}\rangle = |\{n_{\mathbf{q}}\}\rangle |\mathbf{r}\rangle$. Електричното поле $E(t)$ е приложено по продължение на жицата z , в напречната равнина за удобство носителите се предполагат в основно състояние Ψ . Валидно е следното представяне: $H_0 + V(\mathbf{r}) = H_{\perp} + H_z = H_{0\perp} + V_{\perp} + H_{0z} + V(z)$, където $H_{\perp} \Psi = E_{\perp} \Psi$, $V(z) = -eEz$, и $|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}_{\perp}\rangle |z\rangle$. Това позволява да се раздели задачата на надлъжна (z) и напречна компонента на състоянието: $\hat{\rho}_t = |\Psi\rangle \langle \Psi| \hat{\rho}_{tz}$. Обобщената електрон-фононна функция на Вигнер се получава от оператора на плътността $\hat{\rho}_{tz}$:

$$f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz' e^{-ip_z z'/\hbar} \rho_z(z + \frac{z'}{2}, z - \frac{z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t).$$

Обобщено уравнение на Вигнер: Извежда се от уравнението на фон-Нойман за $\hat{\rho}_{tz}$.

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} - \frac{1}{i\hbar} \left(\epsilon(\{n_{\mathbf{q}}\}) - \epsilon(\{n'_{\mathbf{q}}\}) \right) \right) f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) = \\
& \sum_{\mathbf{q}'} F(\mathbf{q}') \left\{ \begin{aligned}
& G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) \\
& - G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) \\
& - G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'}} f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, t) \\
& + G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, t) \end{aligned} \right\}. \tag{1.36}
\end{aligned}$$

Уравнение (1.36), наречено GWF, свързва елемента $f_w(\dots, \{n\}, \{m\}, t)$ с четири съседни елемента с един фонон, добавен или изваден от левия или десния базис за конкретната стойност на сумационния индекс \mathbf{q}' . За всеки вид \mathbf{q} броят на фононите $n_{\mathbf{q}}$ може да бъде всяко натурално число и сумирането по \mathbf{q}' свързва всички видове фонони. С оглед на това, GWF може да бъде разглеждано и като безкрайна система от уравнения на електронните променливи. Тази система не може да бъде решена без въвеждане на съответни критерии, целящи да я прекъснат. Второ, детайлната информация за състоянието на фононите не е необходима, от интерес е редуцираната функция на Вигнер, описваща поведението на електронната подсистема. Така основната цел е да се прекъсне системата и чрез елиминиране на детайлната зависимост от фононните координати да се получи затворен модел само за редуцираната или електронна функция на Вигнер. Предположението за равновесни фонони се оказва съществено за елиминирането на фононните координати. Освен това естествената йерархия между елементите на системата се въвежда от факта, че физическата информация за електронната подсистема се съдържа в главния диагонал на (1.36), защото електронната функция на Вигнер се въвежда от следата:

$$f_w(z, p_z, t) = \sum_{\{n_{\mathbf{q}}\}} f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t)$$

на диагоналната по отношение на фононите GWF $f_w(\dots, \{n\}, \{n\}, t)$. Подходящи за прекъсване на системата на дадено разстояние от главния диагонал са предположенията за начално невзаимодействащи подсистеми, слабо взаимодействие, както и приближението на случайните фази RPA [33]. Според последния, в суми от типа $\sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \exp\{i(f(\mathbf{q}) - f(\mathbf{q}'))t\}$ се запазват само членове, за които $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$, като се пренебрегват бързо осцилиращите членове, които повече или по-малко се усредняват до нула. В конкретния случай такъв вид има имагинерният член от разликата в честотите на лявото и дясно фононно състояние, който определя осилациите във времето на GWF. Изследва се възможността за прекъсване на йерархията, като се оставят недиагонални елементи от първи (FOD) или първи и втори (SOD) порядък.

Затваряне на ниво FOD елементи; уравнение на Левинсон: Необходимо е да се оценят всички алгебрични комбинации, при които FOD елементите се изразяват обратно чрез диагонални елементи.

Теорема 1.11 *Прекъсването на йерархията на ниво FOD елементи заедно с предположението за равновесни фонони води до следното квантово-кинетично уравнение за електронната функция на Вигнер:*

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) f_w(z, p_z, t) = \sum_{\mathbf{q}'_{\perp}, p'_z} \int_0^t dt' \quad (1.37)$$

$$\left\{ S(p_z, p'_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') f_w(z^-(t'), p'_z(t'), t') - S(p'_z, p_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') f_w(z^-(t'), p_z(t'), t') \right\},$$

$$S(p_z, p'_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') = 2|F_G(\mathbf{q}')|^2 \left[n(\mathbf{q}) \cos \left(\int_{t'}^t \frac{(\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p'_z(\tau)) - \hbar\omega_{\mathbf{q}'}) d\tau}{\hbar} \right) \right. \\ \left. + (n(\mathbf{q}) + 1) \cos \left(\int_{t'}^t \frac{(\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p'_z(\tau)) + \hbar\omega_{\mathbf{q}'}) d\tau}{\hbar} \right) \right], \quad (1.38)$$

$n(\mathbf{q})$ 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

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

Това уравнение описва кинетиката на индуцирани в квантова жица система носители, взаимодействащи с обемни фонони. То се редуцира до уравнението на Levinson, чиито оригинален извод на базата на матрица на плътността е за случая на хомогенен полупроводник. Така полученото тук уравнение може да се нарече уравнение на Levinson за квантова жица или нехомогенно уравнение на Levinson.

Основно за извода на (1.37) е предположението, че фононната система играе роля на термостат, и по такъв начин остава в равновесие по време на еволюцията. Това формално означава, че променливите в диагоналните елементи може да бъдат разделени както следва:

$$f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') = f_w(z, p_z, t') \prod_{\mathbf{q}} P_{eq}(n_{\mathbf{q}}). \quad (1.39)$$

$P(n_{\mathbf{q}})$ е равновесната вероятност за разпределение на броя на фононите $n_{\mathbf{q}}$ от вид \mathbf{q} . Средният или равновесен брой фонони $n(\mathbf{q})$ е въведеното в Глава 1 разпределение на Бозе-Айнщайн. Следата по фононните координати води до елиминирането на последните и заместването им с числата $n(\mathbf{q})$. Отчитането на следващото ниво на приближение в прекъсване на йерархията усложнява значително изчисленията, но позволява да се отчете един важен физичен параметър, свързан с крайното време на живот на носителите в дадено квантово състояние в резултат от взаимодействието с фононите.

Затваряне на ниво SOD елементи: уравнение на Barker-Ferry

Теорема 1.12 *Прекъсването на йерархията на ниво SOD елементи заедно с предположението за равновесни фонони, които при това имат постоянна честота, води до квантово-кинетично уравнение (1.37) с ядро S (1.38), умножено с*

$$\exp \left\{ - \int_{t'}^t \bar{\gamma} \left(\left(\frac{p_z + p'_z}{2} \right) (\tau) \right) d\tau \right\}, \text{ където } \bar{\gamma}(p) = \sum_{\mathbf{q}''} 2\pi\hbar |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \times \\ [(n(\mathbf{q}'') + 1)\delta(\epsilon(p) - \epsilon(p - \hbar q''_z) - \hbar\omega) + n(\mathbf{q}'')\delta(\epsilon(p) - \epsilon(p + \hbar q''_z) + \hbar\omega)]$$

е едномерният еквивалент на сумарната скорост на Болцманово разсейване (1.6).

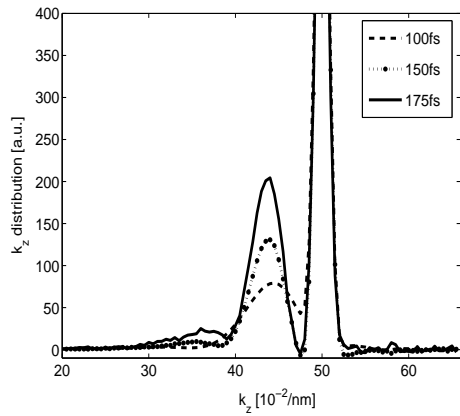
Полученото квантово-кинетично уравнение се редуцира до уравнението на Barker-Ferry, чиито оригинален извод с помощта на формализма на проекционни оператори е за случая на хомогенен полупроводник.

Физичните аспекти на двете уравнения са анализирани, като най-важният извод е свързан с предположението за слабо взаимодействие. Началното състояние се определя от невзаимодействащи подсистеми, така че всички недиагонални елементи са нула. Преходът в резултат от взаимодействието свързва диагонален елемент с FOD елемент и се връща обратно върху диагонален елемент. След края на взаимодействието цялата система се връща отново в диагонално състояние. Само един единствен преход се осъществява в даден момент. Моделите са адекватни за системи, при които времето на преходите е малка част от еволюционното време. Процеси, при които два или повече прехода въвеждат два или повече фона, са изключени. заедно с тези процеси, които въвеждат по-отдалечени от диагонала елементи в пътя, диагонален към диагонален елемент. При уравнението на Левинсон няма механизъм който да ограничава времетраенето на преходите. Уравнението на Barker-Ferry е на по-дълбоко ниво, като отчита взаимодействието между FOD и SOD елементи. Поради това времето на взаимодействие е ограничено от γ . Тези резултати предполагат съществуването на времева граница \mathcal{T} на валидността на двата модела. След това време корелацията с по-отдалечените от главния диагонал членове вече не може да бъде пренебрегната. За фононната подсистема е показано, че операцията по усредняване е легитимна при условие, че броят на напречните моди е много по-голям от броя на надлъжните такива.

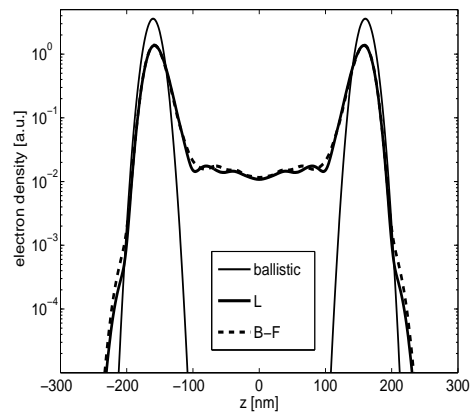
Симулационни резултати Показани са симулационни резултати, които демонстрират квантовия характер на изследваните кинетични уравнения. Използвана е Монте Карло техниката на обратната еволюция. Конкретно е разгледана жица от GaAs с квадратно сечение от 10 нанометра. Материалните параметри са взети от [27], като в частност има един полярно-оптичен фонон с постоянна енергия $\hbar\omega$. Електричното поле е нула. Началното условие се задава от произведение от две Гаусови разпределения по енергия и позиция, което съответства на пакет електрони, генерирани от лазерен импулс с енергия от 150meV около точката $z = 0$. Ще бъдат разгледани еволюцията на разпределението по вълнов вектор (и така по енергия) и на концентрацията, зададена от интегралите:

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

в които се предполага, че функцията е нормирана на единица. Лазерният пулс създава начално разпределение от носители, чиято средна енергия е значително над равновесната. Те започват да взаимодействат с фононите, като при екстремно ниски температури могат само да отдават енергия. По такъв начин електронната подсистема релаксира. При класическото описание на процеса, поради закона за запазване на енергията се получават точни реплики на началното разпределение, отстоящи от



Фигура 1.11: Разпределението $f(k_z, t)$ за три различни времена на еволюция.



Фигура 1.12: Концентрация на електроните след 175 фемтосекунди еволюция.

него на енергии, кратни на $\hbar\omega$. В областта от енергии над началното условие не могат да се появяват електрони. Ефектите, наблюдавани в квантовите решения, са на нарушаване законът за запазване на енергията и на забавяне на еволюцията, които се изразяват в появата на първоначално много широки реплики, които с нарастване на времето постепенно се стесняват. Наблюдава се поява на носители в класически забранената област от енергии. С нарастване на времето първата реплика започва да се оформя, Фиг. (1.11), като над 150 фемтосекунди се наблюдава появата на втората реплика. Разстоянието между началния и първия максимуми отговаря на енергията на фонона, но кривата е още уширена в сравнение с началното разпределение. След 175 фемтосекунди започва да се установява закона за запазване на енергията, който започва да оформя първата реплика на съответната крива. Фигура 1.12 показва концентрация на електроните след 175 фемтосекунди еволюция. Фронтите части на балистичната крива, разположени над 200 и под -200 нанометра, са формирани от най-бързите електрони, които биха се получили при класическо описание на взаимодействието. Това се дължи на факта, че според класическия модел при нулева температура на решетката електроните могат само да губят енергия. Както добре се вижда, фронтът на квантовите криви е разположен още по-далече от началото. Това е съвсем нов ефект, който е наречен утрабърз трансвер в пространството (UST) [32]. Той се дължи на електрони, които са получили енергия от взаимодействието и се движат по-бързо от най-бързите балистични електрони. Получаването на такава енергия се асоциира с липсата на закон за запазване на енергията в ранния стадий на еволюцията.

Йерархията кинетични модели може да бъде изведена с помощта на същите подходи, използвани за получаването на уравненията за еволюция в квантова жица. Обобщеното уравнение на Вигнер е подобно на (1.36), но сега зависи от пълния набор променливи \mathbf{r}, \mathbf{p} . Потенциалът има най-обща форма, което води до отпадането на члена с полето E в ляво на (1.36), и появата на члена

$$\int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t)$$

в дясната страна на уравнението, което няма да бъде формулирано тук. Последователно се извеждат:

Главен модел за редуцираната функция на Вигнер Получава се система от уравнения, в която редуцираната функция на Вигнер f_w е свързана с две допълнителни уравнения за две функции f_1 и f_2 свързани с FOD елементите.

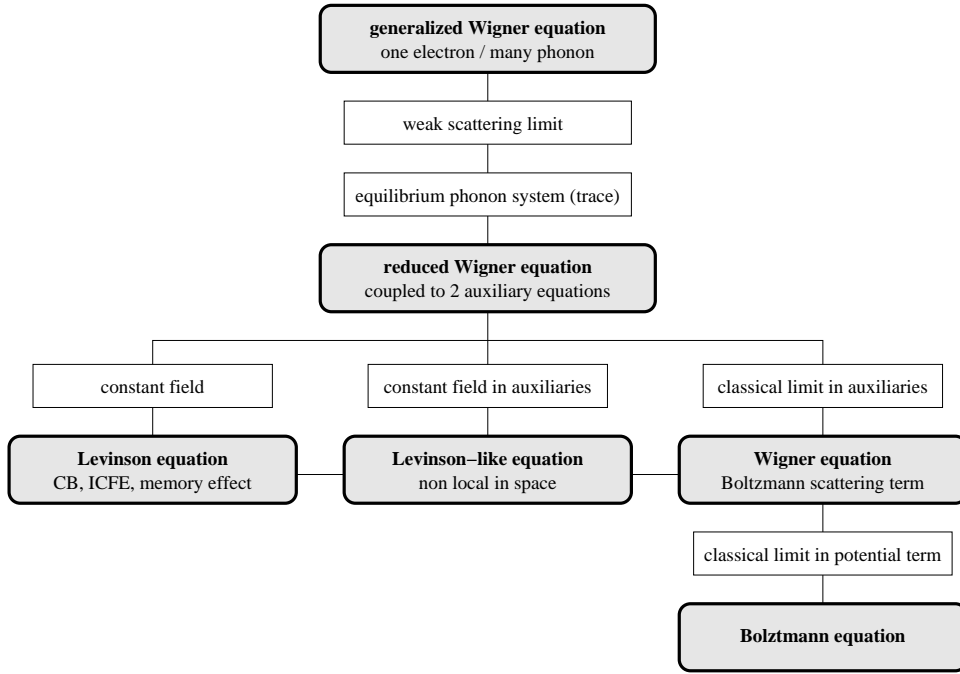
Основно уравнение за редуцираната функция на Вигнер Тази система може да се сведе до уравнение за f_w чрез две възможни приближения в помощните уравнения, позволяващи те да бъдат решени явно. Първият е да се използва класическата граница за ядрата V_W , което води до едно главно уравнение за редуцираната функция на Вигнер, в което взаимодействията на електрона както с електричния потенциал, така и с фононите имат квантов характер. Вторият изцяло пренебрегва V_w в уравненията за допълнителните функции, което води до уравнението на Вигнер-Болцман. В резултат от първия подход се получава:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \right) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int d\mathbf{p}' V'_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t') + \int_0^t dt' \int d\mathbf{p} \left(S(\mathbf{p}', \mathbf{p}, t, t') f_w \left(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t') + \frac{\hbar \mathbf{q}}{2m}(t - t'), \mathbf{p}'(t'), t' \right) - S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', t, t') f_w \left(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t') + \frac{\hbar \mathbf{q}}{2m}(t - t'), \mathbf{p}(t'), t' \right) \right), \quad (1.40)$$

$$S(\mathbf{p}', \mathbf{p}, t, t') = \frac{2VF_{\mathbf{q}}^2}{(2\pi\hbar)^3} (n(\mathbf{q}) \cos(\Omega(\mathbf{p}', \mathbf{p}, t, t')) + (n(\mathbf{q}) + 1) \cos(\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{p}', t, t'))),$$

$$\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{p}', t, t') = \int_{t'}^t d\tau \frac{\epsilon(\mathbf{p}(\tau)) - \epsilon(\mathbf{p}'(\tau)) + \hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\hbar}; \quad \mathbf{p}'(\tau) = \mathbf{p}' - \mathbf{F}(t - \tau); \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar}.$$

Това уравнение обобщава както хомогенното уравнение на Левинсон, така и съответстващото му в квантова жица уравнение (1.37) за шест мерното фазово пространство. При това не са направени никакви апроксимации в кохерентната компонента на транспортния процес: ако взаимодействието с фонони се пренебрегне, уравнението се редуцира до стандартния модел на Вигнер за електрон взаимодействащ с потенциално поле. Отличителната характеристика на (1.40) сега е нелокалността на разсейването в реалното пространство. Това може да се види от сравнението с функцията на разпределение на Болцман, стойността на която в точка \mathbf{r}, \mathbf{p} в момент t се определя от приноси само от точките в реалното пространство, намиращи се в предишните моменти на траекторията β , минаваща през тази точка. Показано е, че поради квантовия характер на взаимодействието с фонони, решението на (1.40) получава приноси и от други точки на фазовото пространство. Законът за запазване на импулса както в Болцмановия случай важи след приключване на взаимодействието. Обаче енергията не се запазва даже и за най-простия хомогенен случай. Делта функцията, представляваща закона за запазване на енергията, се получава в резултат



Фигура 1.13: Йерархия кинетични модели

от граничен преход, при който взаимодействието става моментално. Трябва да се отбележи, че доколкото е известно на автора, все още няма опити за числен подход към изведеното уравнение.

Класическа граница: уравнение на Вигнер-Болцман Към уравнение (1.40) ще бъде приложена границата, известна като класическа, $\hbar \rightarrow 0$. Тя се записва в термините на обобщени функции:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon \tau} \phi(\tau) = \phi(0) \left\{ \pi \delta(\epsilon) + i \mathcal{P} \frac{1}{\epsilon} \right\}.$$

Апроксимира се интегралът с вид: $\int_0^t d\tau e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon \tau} \phi(\tau)$ Получените главни стойности \mathcal{P} удобно се съкращават. Сега вече и законът за запазване на енергията се включва в резултата точно както закона за запазване на импулса. Получава се уравнение, в което Вигнеровият потенциален оператор съжителства с оператора на разсейване на Болцман.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \right) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t') \\ &+ \int d\mathbf{p}' (f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) - f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) S(\mathbf{p}, \mathbf{p}')), \end{aligned} \quad (1.41)$$

Тук S е операторът на разсейване на Болцман, (1.6). Класическата граница в потенциалния член възстановява уравнението на Болцман. С това завършваме получаването на различните модели, обединени в йерархията на Фиг. 1.13.

Модел на Вигнер-Болцман: Монте Карло подход Разглежда се стационарната задача за изчисляване на (f_w, A) :

$$\langle A \rangle = \int_D d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (f_w, A) .$$

където f_w е определеното от гранични условия решение на стационарното уравнение на Вигнер-Болцман в областта D . Алтернативен израз за средната стойност $\langle A \rangle$ се получава с помощта на спрегнатото уравнение. За това е необходимо интегралната форма на уравнението на Вигнер-Болцман, която въвежда някои удобни за Монте Карло анализа величини.

Интегрален вид: Използва се траектория $\mathbf{r}(t') = \mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{p})t'$, $\mathbf{p}(t') = \mathbf{p}$.

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d\mathbf{p}' \int_{t_b^-}^0 f(\mathbf{r}(t'), \mathbf{p}') \Gamma(\mathbf{r}(t'), \mathbf{p}', \mathbf{p}(t')) \exp\left(-\int_{t'}^0 \mu(\mathbf{r}(y), \mathbf{p}(y)) dy\right) + f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) ,$$

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_b(\mathbf{r}(t_b^-), \mathbf{p}(t_b^-)) \exp\left(-\int_{t_b^-}^0 \mu(\mathbf{r}(y), \mathbf{p}(y)) dy\right); \quad t_b^- = t_b^-(\mathbf{p}, \mathbf{r}). \quad (1.42)$$

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}', \mathbf{p}) = V_w^+(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) - V_w^+(\mathbf{r}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') + S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) + \gamma(\mathbf{r})\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') ,$$

$$V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = V_w^+(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - V_w^+(\mathbf{r}, -\mathbf{p}), \quad \gamma(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{p} V_w^+(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad \mu(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \lambda(\mathbf{p}) + \gamma(\mathbf{r}) .$$

Спрегнатото уравнение:

Теорема 1.13 *Спрегнатото на (1.42) 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 траектория, инициализирана от $(\mathbf{r}', \mathbf{p}')$.

Итерационно представяне на физичните средни: Показва се, че търсената стойност $\langle A \rangle$ се представя като интеграл по границата от решението g :

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

Използването на реда на Нойман за g води до итерационно представяне на $\langle A \rangle$:

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

Удобно е да бъде направено прегрупиране на множителите във всеки член на сумата $(b, (I - K)^{-1} A)$. За повтарящ се член в редицата се приема \tilde{K} , който се получава от K чрез приемане на експонентата в ляво и освобождаване на тази в дясно за следващия \tilde{K} . По този начин \tilde{A} се получава като към последния множител, A , се аташира експонентата в ляво. \tilde{K} има вид:

$$\tilde{K}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p}, t) = p_t(t, \mathbf{r}', \mathbf{p}') \theta_D(\mathbf{r}'(t)) \frac{\Gamma(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t), \mathbf{p})}{\mu(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t))}, \quad p_t = \mu(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t)) e^{-\int_0^t \mu(\mathbf{r}'(y), \mathbf{p}'(y)) dy} .$$

Вероятностна интерпретация на \tilde{K} : Първият член p_t е добре познат от Монте Карло метода за моделиране на класически транспорт: той представя вероятността за

дрейф без разсейване при условие, че честотата на разсейване се определя от μ . Нормализацията се проверява чрез директно интегриране в границите $(0, \infty)$. По такъв начин p_t генерира стойност на t , която е времето на дрейф на частица, движеща се по Нютонова траектория между началното състояние $(\mathbf{r}', \mathbf{p}')$ и състоянието точно преди разсейване $(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t))$. Последното се използва в условните вероятностни плътности, образуващи останалия член: $\Gamma(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t), \mathbf{p})/\mu(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t))$ за генериране на стойността на импулса след разсейване \mathbf{p} . Този член има вид:

$$\frac{\Gamma}{\mu} = p_\lambda(\mathbf{r}', \mathbf{p}')p_{ph}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) + p_\gamma(\mathbf{r}', \mathbf{p}') \left(\frac{1}{3}p_w^+(\mathbf{r}', \mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{1}{3}p_w^-(\mathbf{r}', \mathbf{p}' - \mathbf{p}) + \frac{1}{3}p_\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \right) 3$$

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

като $p_w^- = p_w^+$ се въвежда за удобство. p_λ и p_γ са две допълващи се вероятности, които могат да се използват да се избере или p_{ph} , или члена в горните скоби. Така те определят типа на взаимодействие: класическо разсейване с фонони се избира с вероятност p_λ . От допълнителността на последната с p_γ следва, че двата типа взаимодействие - класическо или квантово, могат да бъдат само последователни във времето събития. В случай на реализирана p_λ , следва реализация на p_{ph} за генериране на състоянието след фононно разсейване $(\mathbf{r}', \mathbf{p})$.

Втората възможност - на реализирана p_γ , може да се интерпретира като генерация на състояние след разсейване от потенциала на Вигнер. Вероятността за такава генерация се определя от трите члена в скобите. $p_2 = 1/3$ се въвежда със задачата да избере коя от трите вероятности: p_w^+ , p_w^- или p_δ , да бъде използвана за генерирането на това състояние след разсейване $(\mathbf{r}', \mathbf{p})$. По такъв начин действието на потенциала на Вигнер се интерпретира като разсейване, генерирано от някоя от тези вероятности. Те ще бъдат дискутирани подробно в следващата секция. Тук само заключаваме, че условните вероятности, образуващи \tilde{K} , генерират преходи между $(\mathbf{r}', \mathbf{p}')$ и $(\mathbf{r}'(t), \mathbf{k})$. Това се интерпретира като частица, която следва процеси на дрейф и последващо го разсейване. Това, което остава в \tilde{K} за случайна величина, е членът $w\theta_D = (\pm 3)^i\theta_D$. Степента i зависи от вида на взаимодействие: $i = 0$ и $w = 1$ при разсейване, свързано с фонони; ако обаче потенциалът на Вигнер генерира разсейването, тогава $i = 1$ и $w = (\pm 3)$, като знакът минус е в случая, в който се падне p_w^- . Величината w , която се явява множител след всяка итерация на \tilde{K} , се нарича тегловен фактор. Индикаторът на областта θ_D е единица, ако в края на свободния си полет частицата е вътре в D и е нула в противен случай. По такъв начин \tilde{K} е представен като произведение на случайна величина и условни вероятностни плътности, които се обединяват в преходна плътност, генерираща итеративно събития от еволюцията на една частица:

$$K_e = p_t (p_\lambda p_{ph} + p_\gamma (p_2 p_w^+ - p_2 p_w^- + p_2 p_\delta)),$$

Алгоритъм с вериги на Марков: квантови тегла Числените траектории се строят с помощта на p_b и n последователни итерации на p_t , следвани от останалите идентифицирани в \tilde{K} условни вероятности. Съответната случайна величина ψ_n се получава от

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

Оценката (1.14) за $\langle A \rangle_n$ при реализация върху $l = 1, \dots, N$ траектории е $\langle A \rangle_n \simeq$

$\sum_l^N \psi_{n,l}/N$. В случай, че траекторията напусне симулационната област след $k < n$ итерации, нейният принос към средната стойност е нула: $\psi_n = 0 \forall n > k$. Такива оценки трябва да се направят за всяко n и накрая да бъдат събрани. Така една траектория може да се използва за оценка на всички членове в сумата: траектория, започваща и завършваща на границата на симулационната област, става независима реализация на случайната величина $\psi_{\langle A \rangle}$. Физическата картина съответства на инжектирана от границата частица, която носи информация чрез теглото ψ . Първоначално то има стойност 1 като се променя при актовете на разсейване, но само ако са от квантов тип. Еволюцията на частицата е актуална до момента на напускането ѝ на областта на симулация. Средната стойност на теглата от N такива частици дава оценката за стойността $\langle A \rangle$ на физичната величина A .

По такъв начин се извежда следният алгоритъм:

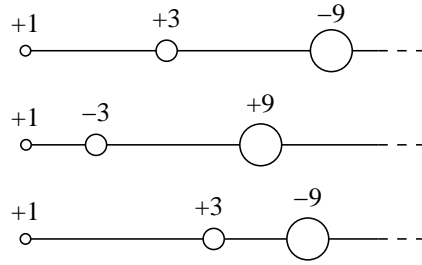
Алгоритъм 1.3.1 :

- 1) Инициализират се стохастичните променливи и величини: ν оценяваща $\langle A \rangle$ се нулира, избира се броят траектории N , в частност върху мрежа във фазовото пространство се изчисляват плътностите $p_t, p_\lambda, p_\gamma, p_\lambda, p_{ph}, p_w^\pm$. За целта от физичната постановка на задачата се определят: квантовите функции V_w^+ и γ , които се пресмятат числено чрез V_w , от електричния потенциал на прибора; аналитично или числено класическите функции за разсейване S и λ .
- 2) Началната точка на всяка траектория l се избира с плътност $p_b(\mathbf{r}_b, \mathbf{p}_b)$ както в класическия случай, теглото W получава стойност 1.
- 3) Времето на свободен полет се определя по класическия начин, но сега p_t зависи и от γ чрез μ . Накрая на всеки свободен полет се пресмята ψ_A , умножава се с W , и резултатът се добавя към ν . Ако траекторията напусне симулационната област: ако $l < N$, l се увеличава с едно и се отива на стъпка 2); ако $l = N$, се отива на стъпка 5).
- 4) С вероятност p_λ се избира разсейване от фонони, в алтернативния случай то е от квантов тип. Състоянието след разсейване се избира според S ; а в алтернативния случай с вероятност $1/3$ от p_w^+, p_δ (W се умножава с 3) или p_w^- (W се умножава с -3). Отива се на стъпка 3).
- 5) Стойността на $\langle A \rangle / \Phi$ се оценява върху N траектории като ν/N .

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

Теорема 1.14 Средното акумулирано тегло W расте експоненциално с времето, прекарвано от частиците в прибора и големината на γ :

$$W = \exp(2\gamma T) \quad \text{когато} \quad T\gamma \rightarrow \infty. \quad (1.43)$$



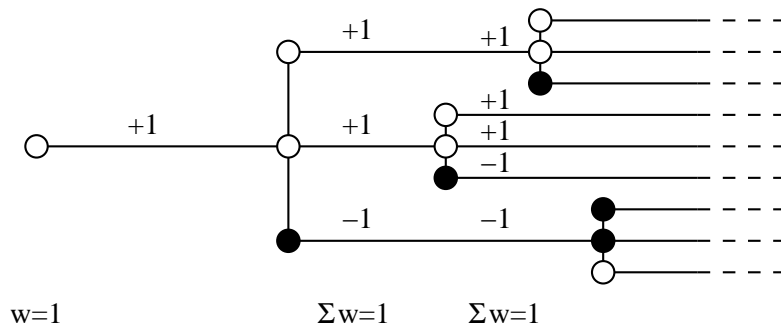
Фигура 1.14: Кохерентен транспорт. На всяка от веригите на Марков съответства частица. Абсолютната стойност на теглото ѝ се увеличава след всеки акт на разсейване, а промяната на знака се осъществява при реализация на отрицателната компонента на ядрото.

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

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

Този резултат е в съгласие с експоненциалния растеж на стандартното отклонение в Монте Карло методи за оценка на интеграла на Файнман [49]. Типични за областта на наноелектрониката размерности са: големината на активната област на прибора над 10 nm, време T по-голямо от пикосекунда, както $\gamma \simeq 10^{15}\text{s}^{-1}$ в случай на потенциални бариери от порядъка на 0.3eV. Тогава $\gamma T = 1000$, което прави невъзможно прилагането на Монте Карло алгоритъма на теглата за реалистични квантови структури. Алгоритъмът може обаче да се приложи успешно към структури с един порядък по-малки потенциални бариери, [50]. Следният алтернативен алгоритъм е предложен за решаване на проблема с акумулираното тегло.

Алгоритъм с разклонени вериги на Марков: Генерация на частици В основата на този алгоритъм е идеята за разделяне на частиците при всяко взаимодействие с потенциала на Вигнер. Сега една частица, която влиза във взаимодействие в точка $Q' = (\mathbf{r}', \mathbf{p}')$ с потенциала на Вигнер, дава началото на три нови частици, инициализирани в точки, определени стохастично от съответните членове в ядрото. След взаимодействието една от новите частици съвпада с началната или еквивалентно началната частица оцелява благодарение на члена с γ в (1.42). Две други частици се генерират от членовете p_w^\pm в състояния $Q^\pm = (\mathbf{r}', \mathbf{p}^\pm)$. Тук трябва да се отбележи, че другите частици винаги се генерират по двойки: $p^\pm(\mathbf{r}', \mathbf{0}) = 0$, понеже V_w е антисиметрична по импулсите функция. Квантовото взаимодействие сега се интерпретира като генерация на частици: траекторията се разклонява, така че теглото запазва абсолютната си стойност 1, като може да смени само знака си. Разделянето на траекторията формално съответства на разделяне на ядрото на три интеграла. Следователно, в следващата итерация всеки един от клоновете продължава със свободен полет и допринася при статистическото усредняване за оценката на физичните

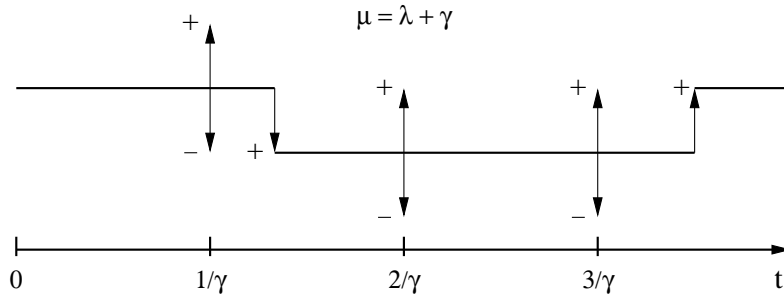


Фигура 1.15: Генерация на частици от квантовото взаимодействие. Всяка частица - генерирана или инжектирана от границата, участва със знака си в статистическата оценка.

величини със съответния си знак, който се променя, ако генерацията е от p_w^- . По такъв начин теглото престава да играе роля, а знакът става атрибут на състоянието на частицата. Получената картина на транспорт е показана на Фиг. 1.15: положителна частица се инжектира от границата. Тя следва постоянна траектория, инициализирана от фазовата точка на инжекцията от границата. През интервали на свободен полет, определени с помощта на p_t , следва взаимодействие с потенциала на Вигнер, при което се раждат две нови частици в състояния, определени от две локални по позиция точки на фазовото пространство, и съответен знак: частицата, генерирана от p_w^+ (p_w^-), има същия (противоположен) знак на взаимодействащата частица. Последната не усеща взаимодействието и продължава еволюцията по първоначалната траектория. Генерираните частици продължават по траектории, инициализирани от началните им точки, като следват същия процес на еволюция, състоящ се от свободни полети и взаимодействия с квантовия потенциал. След всеки акт на взаимодействие, който е мигновен, всяка частица участва в оценката на $\psi_{\langle A \rangle}$ с $+(-)\Phi\psi_A$, което е конкретната за частицата стойност на пресмятаната физична величина, умножена по знака на частиците.

До тук новият алгоритъм не носи особено предимство. От приложна гледна точка вместо теглата сега по същия начин нараства броят на частиците, което е даже по-труден за реализация проблем. Много полезен се оказва обаче фактът, че през една фазова точка минава една и само една траектория. Така две частици върху тази траектория имат еднакво от вероятностна гледна точка еволюционно бъдеще. Ако обаче имат различен знак, те дават обратни приноси към оценката на $\psi_{\langle A \rangle}$, които се канцелират взаимно. Приносът на такива две частици към оценката е нула при положение, че тази оценка е съотношението на две физични величини като например енергия на един електрон или средна скорост, или относителна плътност. Този факт извиква картина на анихиращи частици, която допълва процеса на кохерентен транспорт. Последният се състои от процеси на генерация, еволюция и аниhilация на положителни и отрицателни частици.

Взаимодействието с фононите се наслаждава в тази картина, като повлиява динамиката на частиците. Те не остават върху единствена траектория във фазовото пространс-



Фигура 1.16: Схема на смесената еволюция на една частица във фазовото пространство по генерационния метод. Прекъсванията на главната траектория означават процеси на класическо разсейване, които са с честота λ . Генерацията се осъществява с честота γ .

тво, а се движат по части от траектории, между които биват разсейвани. Явленията на взаимодействие с фонони и с потенциала на Вигнер са допълнителни събития. Действието на последния не променя траекториите, така че преминаването между различни траектории става с честота, определяна единствено от λ , като при това състоянието след разсейване се избира чрез S след реализация на p_{ph} . От тук следва, че частиците имат една и съща Болцманова еволюция и в класическите и квантовите области. Квантовите такива се характеризират с процес на генерация и частици с различен знак. Моделът е илюстриран на Фиг. 1.16.

Числени аспекти на модела на генерация

Еволюцията на частици може да бъде последователна или в паралелния случай само ограничен брой частици може да бъдат симулирани едновременно. За разлика от класическото разделяне на частици, където еволюцията на създадените нови частици се симулира до границата на една следваща стъпка, последвано от инжекция от границата, в квантовия случай генерираните частици не може да бъдат извадени от симулационната област. Частица, отчитаща граничните условия, се симулира до излизането ѝ обратно през границата, но създава вторични частици. Еволюцията им на свой ред създава третични такива и така нататък. Областта никога не може да бъде освободена с краен брой стъпки от частици, за да последва друга инжекция от границата. Алгоритъм, съответстващ на инжекция и извеждане на генерирани частици от симулационната област, не може да бъде изведен от евристични съображения. Такъв алгоритъм може да бъде получен в резултат от следното представяне на итерационния ред за $\langle A \rangle$ [50]:

Теорема 1.15 *Очакваната стойност $\langle A \rangle$ на физичната величина A може да бъде представена в следния ред:*

$$\langle A \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} (\mathbf{v}_{\perp} f_b, ((I - L)^{-1} M)^k (I - L)^{-1} \tilde{A}), \quad (1.44)$$

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

Наистина тези два оператора представляват декомпозиция на ядрото \tilde{K} : $\tilde{K} = L + M$. Доказва се верността на следното уравнение:

$$(I - \tilde{K})^{-1} = (I - L)^{-1} + (I - \tilde{K})^{-1}M(I - L)^{-1} . \quad (1.45)$$

Това се проверява като (1.45) се умножи с $(I - L)$ от ляво и с $(I - \tilde{K})$ от дясно и за M се използва тъждеството: $M = (I - L) - (I - \tilde{K})$. Решението на (1.45):

$$(I - \tilde{K})^{-1} = (I - L)^{-1} \left(I - M(I - L)^{-1} \right)^{-1} \quad (1.46)$$

се замества в $\langle A \rangle = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - \tilde{K})^{-1} \tilde{A})$, в резултат на което се получава (1.44). Преформулираният итерационен ред (1.44) е значително по-сложен за статистически анализ и търсене на физична интерпретация в термините на еволюиращи частици. Първата стъпка в тази посока е в L да се разпознае еволюционният оператор на Болцман, допълнен от член на саморазсейване. Така първият член $(A)_1 = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1} A)$ в (1.44) може да бъде оценен по класически траектории. Вторият член $(A)_2 = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1} M(I - L)^{-1} \tilde{A})$ не може да бъде интерпретиран директно, а след разпадането му на два члена с помощта на делта функция: $(A)_2 = (P_1, (I - L)^{-1} \tilde{A}), P_1(Q) = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1} M\delta)(Q)$. Показва се, че P_1 , с точност до множител има смисъл на плътност на разпределени в D частици. Итерационният ред $(I - L)^{-1} M\delta$ формално се получава чрез заместване на $\tilde{A} = p_t \psi_A$ в $(I - L)^{-1} \tilde{A}$ с $M\delta$, което значи заместване на ψ_A с $p_\gamma(p_w^+ - p_w^-)\delta$. Това съответства на генериране с вероятност p_λ на двойка частици в точки Q^+ и Q^- . Делта функцията в края съответства на проекция във фазовата точка Q на случайната величина $\psi_\delta = \delta(Q - Q^+) - \delta(Q - Q^-)$, което има смисъл на фиксиране или акумулиране на двете генерирани частици в точките на генерация. Поради това, че останалите части от изразите за $(A)_1$ и P_1 са еднакви, двете величини може да бъдат оценявани едновременно, с помощта на общо множество траектории, генерирани от L . Нещо повече: генерацията на частици за P_1 е с честота γ като на саморазсейването, така че тези процеси се случват в едни и същи моменти. Стойността на $\psi_\delta dQ$ е 1, (-1) , ако частицата е генерирана в точка Q^+ , (Q^-) . Така интерпретираното като разпределение на частици в D P_1 участва в израза за $(A)_2$ по същия начин както граничният член участва в израза за $(A)_1$, останалите части от двата израза са еднакви. Съответно $(A)_2$ може да бъде оценен с минимални модификации в алгоритъма за $(A)_1$: траекториите сега трябва да започват в съответствие с P_1 вътре в D . В този случай алгоритъмът има физическа интерпретация на изпразване на D от акумулираните частици, броят на траекториите, които започват от фазовия обем dQ и техният начален знак е равен на броя и знака на акумулираните там частици. По същите траектории може да бъде оценена и величината $P_2(Q) = (P_1, (I - L)^{-1} M\delta)(Q)$. Същите аргументи, използвани за P_1 , показват, че P_2 има смисъл на плътност на вторично генерирани частици. Получава се итеративен алгоритъм, който оценява последователните членове в реда (1.44) чрез начална инжекция на N_1 частици от границата, следвано от последователни стъпки на изваждане и акумулиране на частици в прибора. Доказан е следният алгоритъм.

Алгоритъм 1.3.2 :

- 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 .

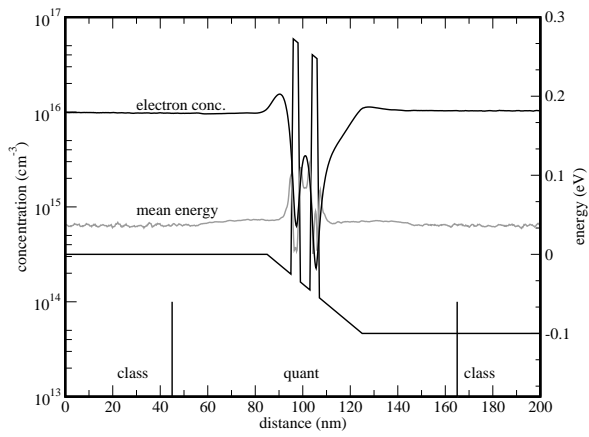
Без ограничаване на общността, за удобство нататък считаме Φ / N_1 за единица. Алгоритъм 1.3.2 може да бъде визуализиран както следва:

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

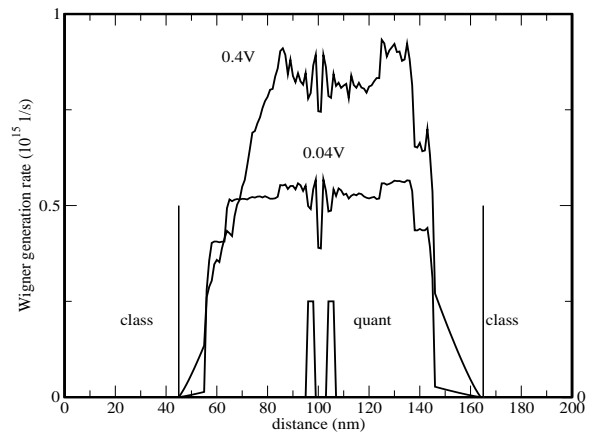
където $b \rightarrow$ означава инжекция от границата, даваща принос w_{p1} във всички скоби, отговарящи на акумулираните частици. Остатъкът от събираеми w_{pi} , $i > 1$ във всяка скоба се получава от предишната стъпка на изпраждане на D , символ на което е стрелката отдолу. След R^{th} -тата поред инжекция броят на акумулираните частици в област dQ около Q се оценява от $\sum_{k=1}^R w_{pk}(Q)dQ$. При следващата стъпка на изпраждане се получава оценка на величината $\sum_{k=1}^{R+1} (A)_k$. Средната на тези оценки взети на стъпки $1, \dots, R$ приближава стойността на $\langle A \rangle$. Понеже функционалът $(A)_k$ се сумира $R - k$ пъти, докато отношението $(R - k)/R$ клони към 1 при R , клонящо към безкрайност, оценката на $\langle A \rangle$ е асимптотично точна.

1.4 Симулационни резултати

Ще бъдат обсъдени някои симулационни резултати, получени с метода на генерация на частици. Като типични представители на прибори със смесен транспорт, чието поведение се определя и от тунелиране, и от разсейване, са симулирани резонансно-тунелни диоди. Резултатите са сравнени с тези, получени от симулатора NEMO-1D, използващ неравновесни функции на Грийн [51]. Използван е един и същ полупроводников модел, като приборът се смята за едномерен. Координатата по позиция се допълва от тримерното пространство на импулсите до четиримерно фазово пространство. Численият модел на функцията на Вигнер се определя от дискретна трансформация на Фурие, дефинирана в интервала $(-L_c/2, L_c/2)$, където L_c се нарича



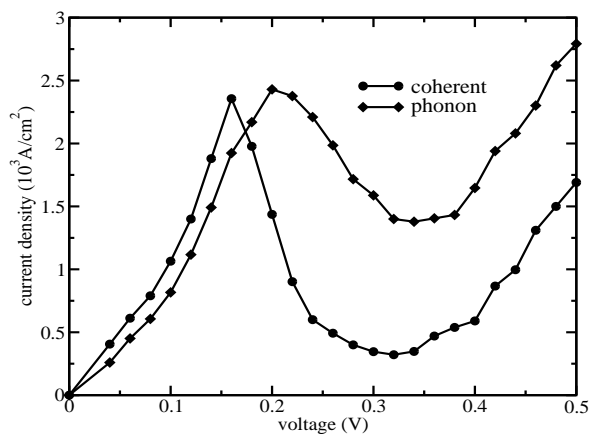
Фигура 1.17: Прибор 1: разпределение на потенциала, концентрация и средна енергия на електрон.



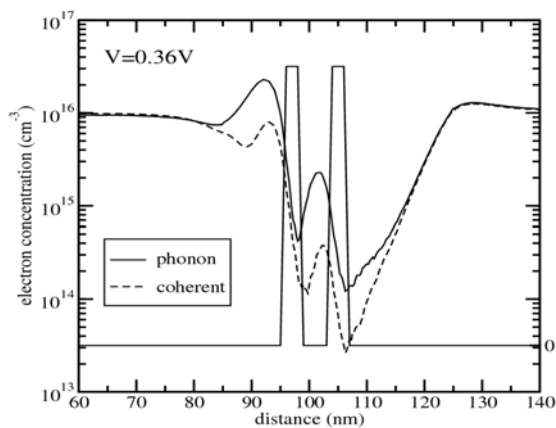
Фигура 1.18: Прибор 1: разпределение на скоростта на генерация $\gamma(x)$ при различни напрежения.

дължина на кохерентност. Стандартният аналитичен модел на зоните по енергия, както и механизмите на разсейване от акустични, полярни и тип деформационен потенциал фонони, използват параметри за галиев арсенид. Въпреки хетеропреходите, ефективната маса е взета независима от позицията и е $0,067m_0$. Структурата на Прибор 1, използвана от Shifren *et al.*, [52] е показана на Фиг. 1.17. Двете бариери са високи 0.3eV и широки 3nm , ширина на ямата е 5nm . Изменението на потенциала от 10nm преди емитера до 19nm след колектора се смята линейно. Примесната концентрация в контактите е 10^{16}cm^{-3} . Дължината на кохерентност е $L_c = 80\text{nm}$. Скоростта на генерация от потенциала на Вигнер γ за такава структура достига високи стойности (Фиг. 1.18) и е критерий за разделяне на прибора на класически и квантови области. Сравняването на тази скорост със скоростта на разсейване от фонони, която е от порядъка на $5 \cdot 10^{12}$, показва, че ефектите на квантова интерференция са доминиращи.

Електронната концентрация и средната енергия, показани на Фиг. 1.17, са почти константа в контактната област и показват плавно преминаване от класическа към квантова област въпреки силното нарастване на γ , Фиг. 1.18. Фононното разсейване има силен ефект върху характеристиките на прибора, Фиг. 1.19. В сравнение с кохерентния случай разсейването води до повишаване на тока в долината и изместване на напрежението на пиковите. Този ефект се дължи на репопулация на електронните състояния в емитера. Разсейването с дисипация, например, намалява енергията на електроните, идващи от левия контакт. Те попадат в състояния по-ниски енергии в потенциалния пад преди левия контакт, Фиг. 1.17, което води до изместване в напрежението. Разликата в стойностите на долинния ток е резултат от промяната на електронната концентрация в не-резонансни условия, Фиг. 1.20. Разсейването с фонони води до значително по-високи концентрации още преди активната област на прибора. В условия на резонанс, където приложеното поле е по-ниско и по-голяма част от електроните, падащи на лявата бариера тунелират, такова натрупване не се

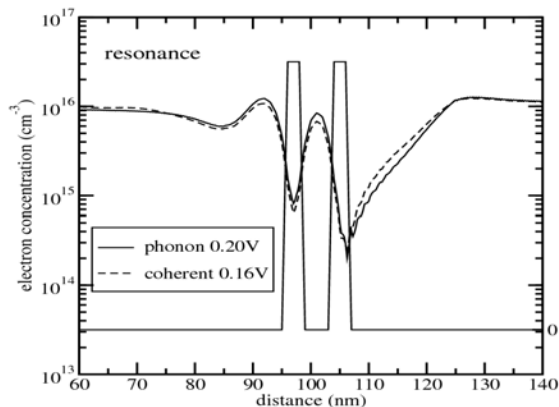


Фигура 1.19: Прибор 1: I-V криви при кохерентен и смесен режим на транспорт.

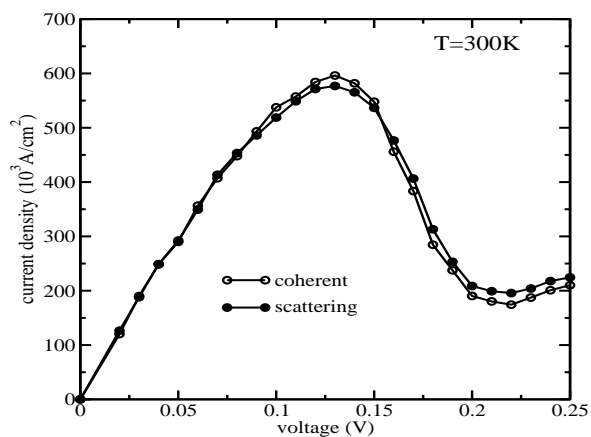


Фигура 1.20: Ефект на разсейването в условия извън резонанс.

забелязва, Фиг. 1.21. Тези ефекти не могат да бъдат отчетени коректно от елемен-



Фигура 1.21: Ефект на разсейването в условия на резонанс.

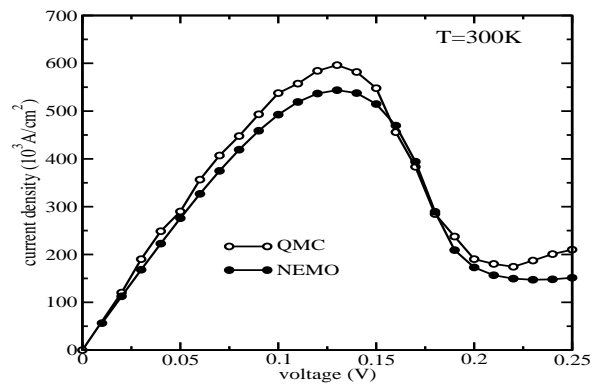


Фигура 1.22: Прибор 2: Волт-амперни характеристики.

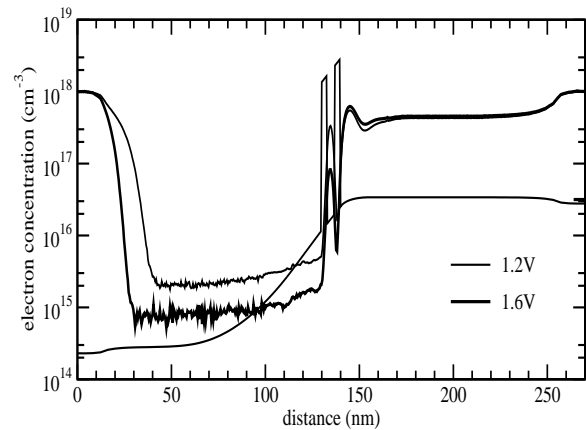
тарните модели на тунелиране, защото при тях състоянията в потенциалния пад в ляво от лявата бариера са в равновесие с десния контакт. В настоящия модел на смесен транспорт дисипацията на енергия от фононите предава контрола на тази зона на левия контакт [18]. От тук в частност следва, че ефектът на фононите трябва да бъде пренебрежим при прибори с плосък потенциал в ляво от лявата бариера. Tsuchiya *et al.*, [53] са изследвали такъв тип прибор, предполагайки линеен пад на потенциала само в централната област: бариерите на Прибор 2 са широки 2.825nm и високи 0.27eV, ширината на ямата е 4.52nm. Концентрацията на примесите в контактите е по-висока: $2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$. Волт-амперните характеристики на този прибор са показани на Фиг. 1.22. Както се очакваше, фононите имат само малък ефект при

такъв прибор.

Кохерентните волт-амперни характеристики, получени с Монте Карло метода (QMC) и симулатора NEMO, са показани на Фиг. 1.23. В сравнение с NEMO, малко по-висок пиков ток се получава с метода на частиците. Резултатите показват добро съответствие. Фиг. 1.24 показва концентрацията на електрони за различни стойности на нап-



Фигура 1.23: I-V криви, получени с квантови частици (QMC) и симулатора NEMO.



Фигура 1.24: Прибор 3: концентрация на електроните в и извън резонанс.

режението в Прибор 3. Той има 4nm яма, заобиколена от 3nm бариери, с височина 0.49eV. Симулационната област е 300nm, квантовата област е 120nm, което съответства на $L_c = 60\text{nm}$. 1200 точки се използват за дискретизацията на x компонентата на импулса, $\Delta x = 0.5\text{nm}$. Напрежението на резонанс е 1.2V, при което концентрацията в ямата е значително по-висока от тази извън резонанс, при 1.6V. Съответната крива е поучителен пример, показващ числения шум в областта, където концентрацията пада повече от три порядъка. Този шум е резултат от дисперсията на метода, която поставя естествена граница в резолюцията на симулираните величини. Методът на квантовите частици не може да бъде прилаган при физични условия, където величините варират няколко порядъка.

Може да се заключи, че методът на квантовите частици може успешно да се прилага при умерени физични условия в областта между класически и кохерентен транспорт. Ефекти на тунелиране и де-кохеренция от разсейване се отчитат в еднаква степен, като симулационните резултати са в съгласие с други симулационни подходи.

Глава 4: Авторска справка

Основни приноси Основните научни и научно-приложни приноси може да бъдат резюмирани в следните точки:

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.

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.

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.

Публикации по дисертационния труд

1. M. Nedjalkov, "Wigner transport in presence of phonons: Particle models of the electron kinetics," in *From Nanostructures to Nanosensing Applications, Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi'* (A. Paoletti, A. D'Amico, G. Ballestrino, ed.), vol. 160, (Amsterdam), pp. 55–103, IOS Press, 2005. BOOK CHAPTER.
2. F. Rossi, C. Jacoboni, and M. Nedjalkov, "A Monte Carlo Solution of the Wigner Transport Equation," *Semiconductor Sci. Technology*, vol. 9, pp. 934–936, 1994. IMPACT FACTOR 1.2
3. M. Nedjalkov, I. Dimov, F. Rossi, and C. Jacoboni, "Convergency of the Monte Carlo Algorithm for the Wigner Quantum Transport Equation," *Journal of Mathematical and Computer Modelling*, vol. 23, no. 8/9, pp. 159–166, 1996. IMPACT FACTOR 1.1
4. M. Nedjalkov, I. Dimov, P. Bordone, R. Brunetti, and C. Jacoboni, "Using the Wigner Function for Quantum Transport in Device Simulation," *Journal of Mathematical and Computer Modelling*, vol. 25, no. 12, pp. 33–53, 1997. IMPACT FACTOR 1.1
5. M. Nedjalkov, D. Vasileska, D. Ferry, C. Jacoboni, C. Ringhofer, I. Dimov, and V. Palankovski, "Wigner transport models of the electron-phonon kinetics in quantum wires," *Physical Review B*, vol. 74, pp. 035311–1–035311–18, July 2006. IMPACT FACTOR 3.4
6. M. Nedjalkov, H. Kosina, and S. Selberherr, "Monte Carlo Algorithms for Stationary Device Simulation," *Mathematics and Computers in Simulation*, vol. 62, no. 3-6, pp. 453–461, 2003. IMPACT FACTOR 1.0
7. M. Nedjalkov, T. Grasser, H. Kosina, and S. Selberherr, "Boundary Condition Models for Terminal Current Fluctuations," in *Proc. Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, (Athens, Greece), pp. 152–155, Springer Verlag, Sept. 2001.

8. M. Nedjalkov, T. Grasser, H. Kosina, and S. Selberherr, "A Transient Model for Terminal Current Noise," *Appl.Phys.Lett.*, vol. 80, no. 4, pp. 607–609, 2002. IMPACT FACTOR 3.7
9. M.Nedjalkov and I.Dimov, "Convergency of the Monte Carlo Algorithms for Linear transport Modeling," *Mathematics and Computers in Simulations*, vol. 47, pp. 383–390, 1998. IMPACT FACTOR 1.0
10. M. Nedjalkov, H. Kosina, and S. Selberherr, "Monte-Carlo Method for Direct Computation of the Small Signal Kinetic Coefficients," in *Proc. Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, (Kyoto, Japan), pp. 155–158, Sept. 1999.
11. H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, "A Monte Carlo Method for Small Signal Analysis of the Boltzmann Equation," *J.Appl.Phys.*, vol. 87, no. 9, pp. 4308–4314, 2000. IMPACT FACTOR 2.2
12. H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, "Theory of the Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation," *IEEE Trans.Electron Devices*, vol. 47, no. 10, pp. 1898–1908, 2000. IMPACT FACTOR 1.9
13. H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, "Monte Carlo Analysis of the Small-Signal Response of Charge Carriers," in *Large-Scale Scientific Computing* (S. Margenov, J. Wasniewski, and P. Yalamov, eds.), pp. 175–182, Berlin Heidelberg: Springer, 2001.
14. S. Smirnov, H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, "Monte Carlo Method for Modelling of Small Signal Response Including the Pauli Exclusion Principle," *J.Appl.Phys.*, vol. 94, pp. 5791–5799, Nov. 2003. IMPACT FACTOR 2.2
15. H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, "A Stable Backward Monte Carlo Method for the Solution of the Boltzmann Equation," in *Large Scale Scientific Computations 2003* (I. Lirkov, S. Margenov, and P. Yalamov, eds.), LNCS 2907, (Berlin, Heidelberg), pp. 170–177, Springer Verlag, 2004.
16. M. Nedjalkov, D. Vasileska, I. Dimov, and G. Arsov, "Mixed Initial-Boundary Value Problem in Particle Modeling of Microelectronic Devices," *Monte Carlo Methods and Applications*, vol. 13, no. 4, pp. 299–331, 2007.
17. M. Nedjalkov, H. Kosina, and S. Selberherr, "The Stationary Monte Carlo Method for Device Simulation - Part II: Event Biasing and Variance Estimation," *J.Appl.Phys.*, vol. 93, no. 6, pp. 3564–3571, 2003. IMPACT FACTOR 2.2
18. M. Nedjalkov, S. Ahmed, and D. Vasileska, "A Self-Consistent Event Biasing Scheme for Statistical Enhancement," *Journal of Computational Electronics*, vol. 3, no. 3-4, pp. 305–309, 2004.

19. M. Nedjalkov and H. Kosina, “Variance of the Ensemble Monte Carlo Algorithm for Semiconductor Transport Modeling,” *Mathematics and Computers in Simulations*, vol. 55, no. 1-3, pp. 191–198, 2001. IMPACT FACTOR 1.0
20. M. Nedjalkov and I. Dimov, “Statistical Modelling of Pulse Excited Electron Quantum Kinetics in One Band Semiconductor,” *Mathematics and Computers in Simulations*, vol. 47, pp. 391–402, 1998. IMPACT FACTOR 1.0
21. M. Nedjalkov, H. Kosina, R. Kosik, and S. Selberherr, “A Space Dependent Wigner Equation Including Phonon Interaction,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 1, no. 1-2, pp. 27–33, 2002.
22. C. Ringhofer, M. Nedjalkov, H. Kosina, and S. Selberherr, “Semi-Classical Approximation of Electron-Phonon Scattering beyond Fermi’s Golden Rule,” *SIAM Journal of Applied Mathematics*, vol. 64, pp. 1933–1953, 2004. IMPACT FACTOR 0.6
23. M. Nedjalkov, R. Kosik, H. Kosina, and S. Selberherr, “A Wigner Equation with Quantum Electron-Phonon Interaction,” *Microelectronic Engineering*, vol. 63, no. 1-3, pp. 199–203, 2002. IMPACT FACTOR 1.4
24. M. Nedjalkov, I. Dimov, and H. Haug, “Numerical Studies of the Markovian Limit of the Quantum Kinetics with Phonon Scattering,” *Phys.stat.sol.(b)*, vol. 209, pp. 109–121, 1998. IMPACT FACTOR 1.1
25. M. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, and I. Dimov, “A Backward Monte Carlo Method for Simulation of the Electron Quantum Kinetics in Semiconductors,” *VLSI Design*, vol. 13, no. 1-4, pp. 405–411, 2001.
26. M. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, C. Ringhofer, and D. Ferry, “Unified particle approach to Wigner-Boltzmann transport in small semiconductor devices,” *Physical Review B*, vol. 70, pp. 115319–115335, Sept. 2004. IMPACT FACTOR 3.4
27. M. Nedjalkov, H. Kosina, and S. Selberherr, “A Weight Decomposition Approach to the Sign Problem in Wigner Transport Simulations,” in *Large Scale Scientific Computations 2003* (I. Lirkov and et al., eds.), LNCS 2907, (Berlin Heidelberg), pp. 178–184, Springer Verlag, 2004.
28. M. Nedjalkov, H. Kosina, E. Ungersboeck, and S. Selberherr, “A quasi-particle model of the electron-Wigner potential interaction,” *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 19, pp. S226–S228, 2004. IMPACT FACTOR 1.2
29. H. Kosina and M. Nedjalkov, “Review Chapter: Wigner Function Based Device Modeling,” in *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology* (M. Rieth and W. Schommers, eds.), ISBN: 1-58883-042-X, (Los Angeles), pp. 731–763, American Scientific Publishers, 2006. BOOK CHAPTER

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. Стойностите на импакт фактора са ориентировъчни, защото са за най-близката до датата на публикация година, или усреднени за последните 5 години в зависимост от намерената информация. Почти всички публикации са в съавторство. Това е неизбежно в тази интердисциплинарна област, в която трябва да се покриват математически, физични и електро-инженерни критерии. Участието на съавторите е равностойно, като всеки е допринасял от аспекта, характерен за специалността му. Най-много съвместни публикации имам с Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.¹ Hans Kosina, от Института по микроелектроника, TU-Vienna, на които съм много благодарен за плодотворната съвместната работа. Също така и на творческия ентузиазъм на Fausto Rossi, Robert Kosik, Sergei Smirnov, Enzo Ungersboeck и Shaikh Ahmed, аспиранти по това време.

Апробация на резултатите: Представените в дисертацията резултати са представени от мен или моите съавтори на повече от 30 международни конференции в Европа, Азия и Америка.

Цитирани публикации Публикациите по настоящата дисертация са цитирани 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.

Благодарности Изразявам своята признателност към проф. Петко Витанов, научен ръководител на моята дипломна работа и докторска дисертация в областта на физика на микроелектрониката. За някои физици казват, че са неуспели математици. Изразявам дълбоката си признателност и благодарност към проф. Иван Димов, който ми даде втори шанс, като насочи интересите ми към теоретичните и числени аспекти на Монте Карло методите, и като учен и приятел стимулира изследователската ми дейност почти двадесет години. Изключително съм благодарен на O.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Dr.h.c. Siegfried Selberherr за научните дискусии, съвети и за постоянната подкрепа, която превърна Института по микроелектроника към TU-Vienna в мой втори научен дом.

¹В Австрия научните степени и звания са неделима част от името.

Библиография

- [1] “International Technology Roadmap for Semiconductors,” (2706 Montopolis Drive, Austin, Texas 78741, USA), Semiconductor Industry Association, 2007. <http://www.itrs.net/Links/2007ITRS/Home2007.htm>.
- [2] G. K. D. Vasileska, S. Goodnick, *Computational Electronics*. CRC Press, 2010.
- [3] R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Wiley and Sons, 1975.
- [4] P. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*. Clarendon Press, Oxford, 1930.
- [5] E. Wigner, “On the quantum corrections for thermodynamic equilibrium,” *Physical Review*, vol. 40, pp. 749–759, 1932.
- [6] H. Weyl, “Quantenmechanik und Gruppentheorie,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 46, pp. 1–46, 1927.
- [7] M. Nedjalkov and P. Vitanov, “Iteration Approach for Solving the Boltzmann Equation with the Monte Carlo Method,” *Solid-State Electron.*, vol. 32, no. 10, pp. 893–896, 1989.
- [8] M. Nedjalkov and P. Vitanov, “Application of the Iteration Approach to the Ensemble Monte Carlo Technique,” *Solid-State Electron.*, vol. 33, no. 4, pp. 407–410, 1990.
- [9] M. Nedjalkov and I. Dimov, “Convergency of the Monte Carlo Algorithms for Linear transport Modeling,” *Mathematics and Computers in Simulations*, vol. 47, pp. 383–390, 1998.
- [10] J. Vaissiere, J. Nougier, L. Varrani, P. Houlet, L. Hlou, E. Starikov, P. Shiktorov, and L. Reggiani, “Small Signal Analysis of the Boltzmann Equation from Harmonic- and Impulse Response Methods,” *Physical Review B*, vol. 49, no. 16, pp. 11144–11152, 1994.
- [11] M. Nedjalkov, H. Kosina, and S. Selberherr, “Monte-Carlo Method for Direct Computation of the Small Signal Kinetic Coefficients,” in *Proc. Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, (Kyoto, Japan), pp. 155–158, Sept. 1999.

- [12] H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, “A Monte Carlo Method for Small Signal Analysis of the Boltzmann Equation,” *J.Appl.Phys.*, vol. 87, no. 9, pp. 4308–4314, 2000.
- [13] Y. Pozhela, E. Starikov, and P. Shiktorov, “Dynamic NDM at Transit Time Resonance in n-InP,” *Semicond.Sci.Technol.*, vol. 7, pp. B386–B389, 1992.
- [14] R. Chau, B. Boyanov, B. Doyle, M. Doczy, S. Datta, S. Hareland, B. Jin, J. Kavalieros, and M. Metz, “Silicon nano-transistors for logic applications,” *Physica E, Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 19, no. 1-2, pp. 1–5, 2003.
- [15] U. Ravaiolli, M. A. Osman, W. Poetz, N. C. Kluksdahl, and D. K. Ferry, “Investigation of Ballistic Transport through Resonant-tunneling quantum wells using Wigner function approach,” *Physica B+C*, vol. 134, pp. 36–40, 1985.
- [16] N. C. Kluksdahl, A. M. Kriman, D. K. Ferry, and C. Ringhofer, “Self-consistent study of resonant-tunneling diode,” *Physical Review B*, vol. 39, pp. 7720–7734, 1989.
- [17] W. Frensley, “Wigner-Function Model of Resonant-Tunneling Semiconductor Device,” *Physical Review B*, vol. 36, no. 3, pp. 1570–1580, 1987.
- [18] W. Frensley, “Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 62, no. 3, pp. 745–789, 1990.
- [19] N. C. Kluksdahl, W. Poetz, U. Ravaiolli, and D. K. Ferry, “Wigner Function Study of a Double Quantum Well Resonant-tunneling diode,” *Superlattices & Microstructures*, vol. 3, pp. 41–45, 1987.
- [20] B. Biegel and J. Plummer, “Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation,” *Physical Review B*, vol. 54, pp. 8070–8082, 1996.
- [21] K. Gullapalli, D. Miller, and D. Neikirk, “Simulation of quantum transport in memory-switching double-barrier quantum-well diodes,” *Physical Review B*, vol. 49, pp. 2622–2628, 1994.
- [22] F. A. Buot and K. L. Jensen, “Lattice Weil-Wigner Formulation of Exact-Many Body Quantum-Transport Theory and Applications to Novel Solid-State Quantum-Based Devices,” *Physical Review B*, vol. 42, no. 15, pp. 9429–9457, 1990.
- [23] R. K. Mains and G. I. Haddad, “Wigner function modeling of resonant tunneling diodes with high peak-to-valley ratios,” *Journal of Applied Physics*, vol. 64, pp. 5041–5044, 1988.
- [24] J. Schilp, T. Kuhn, and G. Mahler, “Electron-phonon quantum kinetics in pulse-excited semiconductors: Memory and renormalization effects,” *Physical Review B*, vol. 50, no. 8, pp. 5435–5447, 1994.

- [25] C. Fuerst, A. Leitenstorfer, A. Laubereau, and R. Zimmermann, “Quantum Kinetic Electron-Phonon Interaction in GaAs: Energy Nonconserving Scattering Events and Memory Effects,” *Physical Review Letters*, vol. 78, pp. 3733–3736, 1997.
- [26] F. Rossi and T. Kuhn, “Theory of Ultrafast Phenomena in Photoexcited Semiconductors,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, pp. 895–950, July 2002.
- [27] M. Nedjalkov and I. Dimov, “Statistical Modelling of Pulse Excited Electron Quantum Kinetics in One Band Semiconductor,” *Mathematics and Computers in Simulations*, vol. 47, pp. 391–402, 1998.
- [28] K. Thornber, “High-field electronic conduction in insulators,” *Solid-State Electron.*, vol. 21, pp. 259–266, 1978.
- [29] J. Barker and D. Ferry, “On the Physics and Modeling of Small Semiconductor Devices-I,” *Solid-State Electron.*, vol. 23, pp. 519–530, 1980.
- [30] M. V. Fischetti, “Monte Carlo Solution to the Problem of High-Field Electron Heating in SiO_2 ,” *Physical Review Letters*, vol. 53, no. 3, p. 1755, 1984.
- [31] M. Nedjalkov, “Wigner transport in presence of phonons: Particle models of the electron kinetics,” in *From Nanostructures to Nanosensing Applications, Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi'* (A. P. A. D’Amico, G. Ballestrino, ed.), vol. 160, (Amsterdam), pp. 55–103, IOS Press, 2005.
- [32] M. Herbst, M. Glanemann, V. Axt, and T. Kuhn, “Electron-phonon quantum kinetics for spatially inhomogeneous excitations,” *Physical Review B*, vol. 67, pp. 195305–1–195305–18, 2003.
- [33] H. Haug and S. W. Koch in *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors (3rd ed.)*, Singapore: World Scientific, 1994.
- [34] I. Levinson, “Translational invariance in uniform fields and the equation for the density matrix in the Wigner representation,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 30, no. 2, pp. 362–367, 1970.
- [35] J. Barker and D. Ferry, “Self-Scattering Path-Variable Formulation of High-Field, Time-Dependent, Quantum Kinetic Equations for Semiconductor Transport in the Finite-Collision-Duration Regime,” *Physical Review Letters*, vol. 42, no. 26, pp. 1779–1781, 1979.
- [36] R. Brunetti, C. Jacoboni, and F. Rossi, “Quantum theory of transient transport in semiconductors: A Monte Carlo approach,” *Physical Review B*, vol. 39, pp. 10781–10790, May 1989.
- [37] M. Nedjalkov, H. Kosina, R. Kosik, and S. Selberherr, “A Space Dependent Wigner Equation Including Phonon Interaction,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 1, no. 1-2, pp. 27–33, 2002.

- [38] C. Ringhofer, M. Nedjalkov, H. Kosina, and S. Selberherr, “Semi-Classical Approximation of Electron-Phonon Scattering beyond Fermi’s Golden Rule,” *SIAM Journal of Applied Mathematics*, vol. 64, pp. 1933–1953, 2004.
- [39] P. Lipavski, F. Khan, F. Abdolsalami, and J. Wilkins, “High-Field Transport in Semiconductors. I. Absence of the Intra-Collisional Field Effect,” *Physical Review B*, vol. 43, no. 6, pp. 4885–4896, 1991.
- [40] D. Querlioz, H. N. Nguyen, J. Saint-Martin, A. Bournel, S. Galdin-Retailleau, and P. Dollfus, “Wigner-Boltzmann Monte Carlo approach to nanodevice simulation: from quantum to semiclassical transport,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 8, pp. 324–335, 2009.
- [41] D. Querlioz and P. Dollfus, *The Wigner Monte Carlo Method for Nanoelectronic Devices - A particle description of quantum transport and decoherence*. ISTE-Wiley, 2010.
- [42] F. Rossi, C. Jacoboni, and M. Nedjalkov, “A Monte Carlo Solution of the Wigner Transport Equation,” *Semiconductor Sci. Technology*, vol. 9, pp. 934–936, 1994.
- [43] M. Nedjalkov, R. Kosik, H. Kosina, and S. Selberherr, “A Wigner Equation with Quantum Electron-Phonon Interaction,” *Microelectronic Engineering*, vol. 63, no. 1-3, pp. 199–203, 2002.
- [44] M. Nedjalkov, D. Vasileska, D. Ferry, C. Jacoboni, C. Ringhofer, I. Dimov, and V. Palankovski, “Wigner transport models of the electron-phonon kinetics in quantum wires,” *Physical Review B*, vol. 74, pp. 035311–1–035311–18, July 2006.
- [45] P. Bordone, M. Pascoli, R. Brunetti, A. Bertoni, and C. Jacoboni, “Quantum transport of electrons in open nanostructures with the Wigner-function formalism,” *Physical Review B*, vol. 59, no. 4, pp. 3060–3069, 1999.
- [46] C. Jacoboni, A. Bertoni, P. Bordone, and R. Brunetti, “Wigner-function Formulation for Quantum Transport in Semiconductors: Theory and Monte Carlo Approach,” *Mathematics and Computers in Simulations*, vol. 55, no. 1-3, pp. 67–78, 2001.
- [47] P. Bordone, A. Bertoni, R. Brunetti, and C. Jacoboni, “Monte Carlo simulation of quantum electron transport based on Wigner paths,” *Mathematics and Computers in Simulation*, vol. 62, p. 307, 2003.
- [48] T. Kuhn and F. Rossi, “Monte Carlo Simulation of Ultrafast Processes in Photoexcited Semiconductors: Coherent and Incoherent Dynamics,” *Physical Review B*, vol. 46, pp. 7496–7514, 1992.
- [49] T. Schmidt and K. Moehring, “Stochastic Path-Integral Simulation of Quantum Scattering,” *Physical Review A*, vol. 48, no. 5, pp. R3418–R3420, 1993.

- [50] M. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, C. Ringhofer, and D. Ferry, “Unified particle approach to Wigner-Boltzmann transport in small semiconductor devices,” *Physical Review B*, vol. 70, pp. 115319–115335, Sept. 2004.
- [51] H. Kosina and M. Nedjalkov, “Review Chapter: Wigner Function Based Device Modeling,” in *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology* (M. Rieth and W. Schommers, eds.), ISBN: 1-58883-042-X, (Los Angeles), pp. 731–763, American Scientific Publishers, 2006.
- [52] L. Shifren and D. Ferry, “Wigner function Monte Carlo,” *Physica B*, vol. 314, pp. 72–75, 2002.
- [53] H. Tsuchiya, M. Ogawa, and T. Miyoshi, “Simulation of Quantum Transport in Quantum Devices with Spatially Varying Effective Mass,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 38, no. 6, pp. 1246–1252, 1991.