



БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ
ТЕХНОЛОГИИ

Михаил Христов Недялков

МОДЕЛИРАНЕ НА КИНЕТИКАТА НА ТОКОВИ
НОСИТЕЛИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВИ ПРИБОРИ

ДИСЕРТАЦИЯ

за присъждане на научна степен *”Доктор на науките”*

Научна специалност: 01.01.13

”Математическо моделиране и приложение на математиката”

София, 2011 г.

На моята дъщеря Бианка

Съдържание

1	Моделиране на полупроводникови прибори	17
1.1	Тенденции в развитието на микроелектрониката	18
1.2	Роля и задачи на моделирането	20
1.3	Моделиране на полупроводникови прибори	21
1.3.1	Основни модули	21
1.3.2	Транспортни модели	22
1.3.3	Аспекти на МПП	25
1.4	Основни понятия от полупроводниковия модел	29
1.4.1	Електрони в кристалната решетка	29
1.4.1.1	Зонна структура	29
1.4.1.2	Динамика на носителите	31
1.4.1.3	Пренос на заряди	32
1.4.2	Нарушения на идеалността на решетката	33
1.4.2.1	Фонони	34
1.4.2.2	Обща характеристика на разсейването от фонони	36
1.5	Класически транспорт - уравнение на Болцман	40
1.5.1	Феноменологичен извод	40
1.5.2	Параметризация на траекториите	42

1.5.2.1	Класическа функция на разпределение	44
1.6	Квантов транспорт - уравнение на Вигнер	46
1.6.1	Операторна механика	47
1.6.2	Квантова механика във фазовото пространство	49
1.6.3	Извод на уравнението на Вигнер	51
1.6.4	Свойства на функцията на Вигнер	53
1.6.4.1	Класическа граница на уравнението	54
1.7	Монте Карло интегриране	56
1.8	Допълнения	59
1.8.1	Правило на съответствие	59
1.8.2	Функция на Вигнер	60
2	Моделиране на класически транспорт	62
2.1	Монте Карло техники	63
2.1.1	Едночастична техника	64
2.1.1.1	Траектория на една частица	65
2.1.1.2	Средна стойност на A	66
2.1.1.3	Саморазсейване	67
2.1.1.4	Гранични условия	67
2.1.2	Ансамблова техника	68
2.1.3	Техники за увеличаване на статистиката	70
2.1.4	Интеграл по траекториите	71
2.1.5	Техника на обратната еволюция	72
2.1.6	Итерационен подход	74
2.1.6.1	Техники с обратна еволюция	74
2.1.6.2	Ансамблов алгоритъм	76

2.2	Алгоритми за анализ на слаб сигнал	79
2.2.1	Традиционни методи	80
2.2.1.1	Стационарни алгоритми	80
2.2.1.2	Времезависими алгоритми	81
2.2.2	Итерационен метод	83
2.2.3	Монте Карло алгоритми	86
2.2.3.1	Представяне с крайни разлики	87
2.2.3.2	Колинеарни пертурбации	88
2.2.4	Симулационни резултати	91
2.2.5	Условия, близки до равновесните	95
2.3	Нехомогенни едночастични алгоритми	100
2.3.1	Стационарни условия	100
2.3.2	Итерационен извод на едночастични алгоритми	103
2.3.2.1	Спрегнатото уравнение	104
2.3.2.2	Гранични условия	105
2.3.3	Нехомогенни едночастични алгоритми и ергодичност	108
2.3.3.1	Усредняване по състоянията преди разсейване	110
2.3.3.2	Ергодичност на системата	112
2.3.3.3	Избор на границата	114
2.3.4	Алгоритъм с разделяне на траекториите от ИП	118
2.3.5	Алгоритъм на обратната еволюция от ИП	119
2.4	Самосъгласувана смесена задача	122
2.4.1	Постановка на задачата	123
2.4.2	Спрегнатото уравнение	124
2.4.3	Принос от началното и граничните условия	130
2.4.3.1	Начално условие	130

2.4.3.2	Гранични условия	131
2.4.4	Ансамблов алгоритъм за моделиране на прибори	133
2.4.5	Модифициране на естествените вероятности	138
2.4.5.1	Модифициране на началното и гранични условия	139
2.4.5.2	Модифициране на еволюционния процес	142
2.4.6	Самосъгласуван модифициран алгоритъм	144
2.4.6.1	Симулационни експерименти	149
3	Моделиране на квантов транспорт	156
3.1	Еволюция в квантова жица	161
3.1.1	Постановка на задачата	161
3.1.2	Обобщено уравнение на Вигнер	163
3.1.3	Уравнение за диагоналните елементи	166
3.1.4	Затваряне на ниво FOD елементи	167
3.1.5	Затваряне на ниво SOD елементи	171
3.1.5.1	Приближение на уравнението за f_{FOD}^+	172
3.1.5.2	Приближение на уравнението за f_{FOD}^-	181
3.1.5.3	Затваряне на получената система	182
3.1.6	Физични аспекти	183
3.1.6.1	Кинетични модели	183
3.1.6.2	Фоонната подсистема	186
3.1.7	Симулационни резултати	189
3.1.8	Интегрален вид	198
3.1.9	Класическа граница на фоонното взаимодействие	200
3.2	Йерархия кинетични уравнения	201
3.2.1	Главен модел за редуцираната функция на Вигнер	203

3.2.2	Основно уравнение за редуцираната функция на Вигнер . .	204
3.2.3	Класическа граница: уравнение на Вигнер-Болцман	206
3.3	Модел на Вигнер-Болцман: Монте Карло подход	208
3.3.1	Формулировка на задачата	212
3.3.1.1	Стационарно уравнение на Вигнер-Болцман	213
3.3.1.2	Интегрален вид	214
3.3.2	Спрегнатото уравнение	215
3.3.3	Итерационно представяне на физичните средни	218
3.3.4	Монте Карло анализ на $\langle A \rangle$	220
3.3.4.1	Инжектиране от границата	220
3.3.4.2	Вероятностна интерпретация на $\tilde{K}$	221
3.3.4.3	Анализ на $\tilde{A}$	223
3.3.5	Стохастични алгоритми: Числени и физични аспекти . . .	224
3.3.5.1	Вериги на Марков: квантови тегла	224
3.3.5.2	Класически транспорт и ергодичност	226
3.3.5.3	Кохерентен транспорт	227
3.3.5.4	Разклонени вериги на Марков: Генерация на час- тици	228
3.3.5.5	Смесен транспорт	230
3.3.5.6	Числени аспекти на модела на генерация	232
3.4	Симулационни резултати	238
4	Авторска справка	248
4.1	Основни приноси	248
4.2	Публикации по дисертационния труд	251
4.3	Цитирани публикации	255

4.4	Благодарности	260
4.5	Декларация	261
4.6	Научна Автобиография	261

Увод

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 мини-тюаризация и интеграция: (i) Достигат се физическите граници на основните технологии. Така дизайнът, архитектурата, функционалността и софтуерът на съвременните чипове стават главно средство за поддържане на конкурентността на производителите. Лабораторни 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 физически 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, за тяхното решаване са развити съответните 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 микрониво. Физичните величини, характеризиращи системата са функционали от неговото решение, наречено функция на разпределение. Еволюционни времена за системата са ограничени отдолу от пикосекундната скала ($10^{-12}s$), която характеризира времето между две взаимодействия на носителите с фонони (вибрации) и други нарушения на периодичността на кристалната решетка.

Дефинираното във фазовото пространство 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 го-

дини, 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. Физични параметри и константи на различните механизми, отговарящи за динамиката на носителите, може да бъдат определени по метода на 'обратно инженерство': избират се тези стойности, които дават най-добро съвпадение между експериментално измерени и симулирани физични величини. Монте Карло симулациите дават възможност да се изследват такива явления, които не подлежат на анализ чрез лабораторни експерименти. Така фразата 'симулационен 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 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) разглеждат се задачи по квантов транспорт, където моделите и кинетичните процеси нямат 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 тунели-

ране, 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 генерации 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.

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 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, използвайки феноменологията на изследваните процеси. Важна задача е развитието на универсален подход, който да обобщи тези алгоритми на базата на формално прилагане на теорията на Монте Карло методите към уравненията управляващи тези процеси. Втора задача е прилагането на този подход, наречен итерационен, за извод на нови алгоритми с подобрени свойства. Оказва се, че в някои случаи изходния 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 модели. Извеждането на такива модели, интерпретацията им в термините на частици и разработването на симулационни алгоритми са най-важните задачи в областта на квантовото моделиране. Накрая, прилагането на изведените и класически, и квантови алгоритми за конкретни симулационни задачи има за цел не само изследване на числените им свойства, а позволява анализ на важни физични процеси, закони и явления.

Организация

Представянето на класическите модели 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 смесен 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 ансамблови и едночастични 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 - едно 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. Веро-

ятностна 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 физическите 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 една интерпретация 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 числения метод, изведен на базата на транспортния модел, служи за интерпретация на модела.

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

интегрални, 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 итерационният 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, 10 теореми, а разработените алгоритми са 8.

Глава 3 е посветена на моделиране 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 аниhilация 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.

Глава 1

Моделиране на полупроводникови прибори

В тази уводна глава съм се постарал да изложа по един съгласуван начин понятията, връзките и физичните закони, които са в основата на специалните части, посветени на моделирането на класическия и квантов транспорт на токови носители в полупроводникови прибори. Значението на моделирането е погледнато в исторически план, който свързва тенденциите в развитието на микроелектрониката с ролята и развитието на Монте Карло алгоритмите за решаване уравненията на Болцман и Вигнер. В рамките на една глава е невъзможно напълно самостоятелно формално изложение на основите на физиката на твърдото тяло, класическата статистическа механика и формулировката на квантовата механика в термините на фазово пространство. Затова се акцентира върху евристичната връзка между предположенията за физичните системи, водещи до ясно формулирани математически модели. В търсене на по-голяма самостоятелност се оказват неизбежни и множество препратки към текст, който е напред в изложението. Това по мое мнение е по-добрата алтернатива от цитирането на множество специализирана литература от споменатите области. Накрая са резюмирани елементите от теорията на Монте Карло методите

върху които е построен итерационният подход за моделиране на прибори на микро- и нано-електрониката.

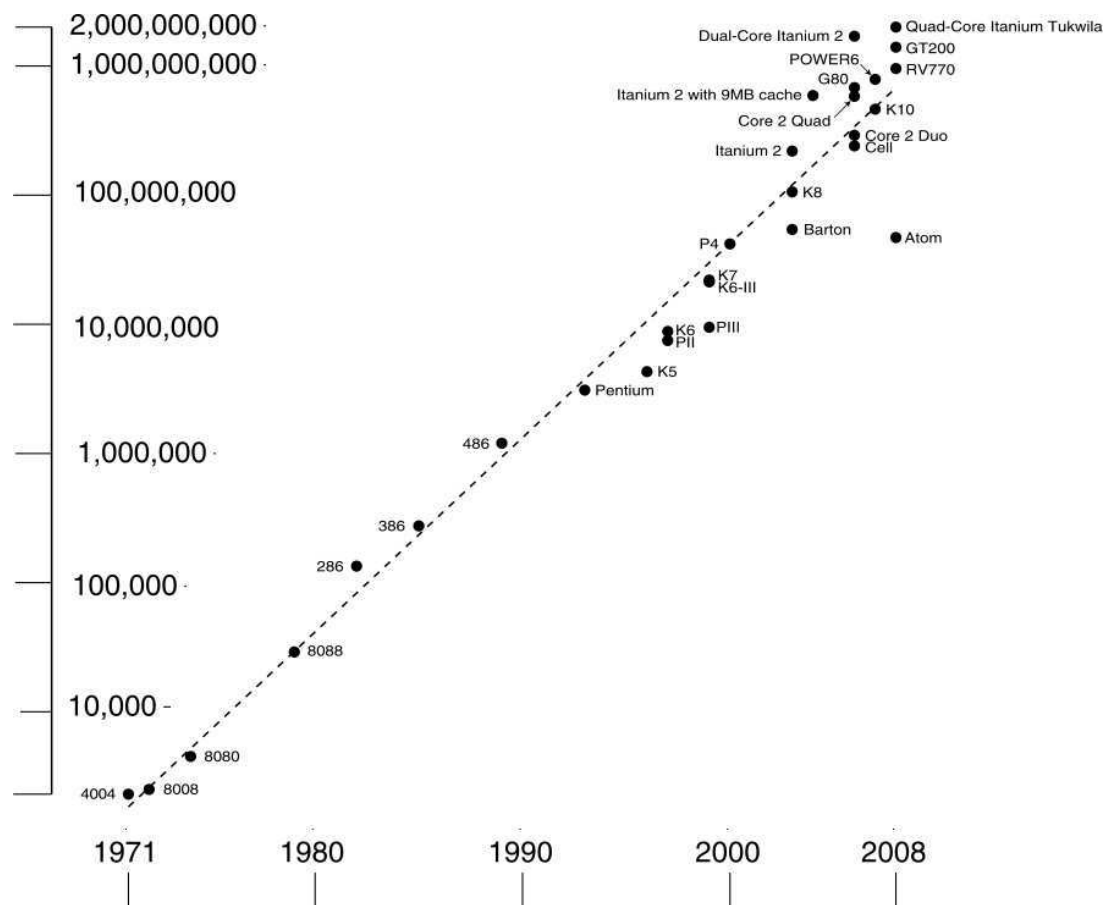
1.1 Тенденции в развитието на микроелектрониката

Развитието на електронната индустрия базирана, на полупроводникови (п/п) прибори, започва през 1947 година с производството на първите биполярни прибори, използващи поликристален германий. Миграцията към монокристални материали и особено силиций, позволява широкото навлизане след 1960 година на MOSFET¹ - транзистори, работещи на принципа на полевия ефект. MOS паметите се появяват след 1968 г., първият микропроцесор през 1971 г., а десет години по-късно вече се произвеждат компютри, базирани на интегрални схеми с висока степен на интеграция. Един основен стимул за развитието на MOSFET приборите е използването на CMOS² цифровата логика, която комбинира два транзистора с различен тип проводимост като основен елемент в схемата. Настоящем MOSFET интегралните схеми с висока степен на интеграция заемат около 90% от пазара на полупроводникови прибори.

Основният фактор, който движи развитието на полупроводниковата индустрия, е непрекъснатият стремеж за намаляване на съотношението цена/функционалност на чип. Това става по три начина: увеличаване диаметъра на пластините за производство на схеми, оптимизиране на разположението на приборите в дадена схема и най-вече намаляване на размерите на отделните прибори. Забележителният прогрес в минитюаризацията се характеризира от закона на Мур [2], Фиг. 1.1 според който на всеки две години плътността на схемите се увеличава два пъти, а ефективността на съответните транзистори се удвоява на всеки 18 месеца.

¹Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor - полеви транзистор на базата на метал-окис-полупроводник конструкция

²Complementary MOS



Фигура 1.1: Закон на Мур. Броят транзистори на процесор се удвоява на всеки 2 години. (Wikipedia)

Така типичните размери на активните области в MOS приборите намаляват от 1 микрон до 45 нанометра за съвременните процесори. Преминаването на границата от 100 нанометра съответства на преход от микро- към нано-технологии. Тези факти показват, че развитието на тази индустрия е по-скоро революционно, благодарение на което днес тя е най-голямата индустрия в света, съответстваща на около 10% от световния брутен продукт [3]. Асоциацията на полупроводниковата индустрия публикува от 1992 година пътна карта за раз-

витие на полупроводниковата технология, [1] която анализира състоянието и очертава конкретните проблеми, които трябва да бъдат преодолени, и за да се следва непрекъснатата тенденция за минитюаризация на приборите. Картата е разделена на глави, посветени на различните аспекти на дейности в тази област, като: дизайн, интеграция на процеси, прибори и структури, литография, нови материали и прибори. Традиционно сред тях е и глава по моделиране и симулация, което говори за важността на тази дейност за развитието на микроелектрониката.

1.2 Роля и задачи на моделирането

Има две причини, които правят необходимими моделирането и симулацията. Циклите на продукция стават все по-кратки с всяка нова генерация интегрални схеми. За да поддържат конкурентност, съвременните компании трябва да преминават от дизайн към продукция за по малко от година и половина. От друга страна, поради сложността на процесите, производство на една пластина със схеми може да отнеме 2-3 месеца. Така експерименталните спецификации трябва да бъдат близки до оптималните за да се намали броят на итерациите през фазата на разработване на даден продукт. Проблемът намира решение с помощта на моделирането, което дава добри начални стойности за експериментите. Втората причина е високата цена на процесите, на които е подложена дадена пластина: това прави немислими експериментите на принципа проба-грешка, както и заделянето на ресурси, които иначе биха произвели готов за продажба продукт.

Моделирането в микроелектрониката условно се разделя на области, съответстващи на стандартните стъпки на реализация на една интегрална схема: (i) симулация на технологичните процеси, водещи до създаването и свързването на отделните прибори върху полупроводниковата пластина; (ii) симулация на поведението на даден тип прибори; (iii) симулация на функционирането на

самата схема, която се състои от огромен брой такива прибори. Ниво (i) третира различни физически процеси като израстване на веществото, окисление, дифузия и йонна имплантация и епитаксия, даващи информация за размери, материална композиция и други физически характеристики (включително и отклонението от идеалните параметри) на приборите от даден тип в схемата. На ниво (ii) се симулира поведението на даден тип прибори и най-вече зависимостта на тока от напрежението. Тази информация е необходима на (iii) за създаване на компактни модели на прибори и групи прибори, използвани от комерсиалните CAD пакети [4] за схемен дизайн.

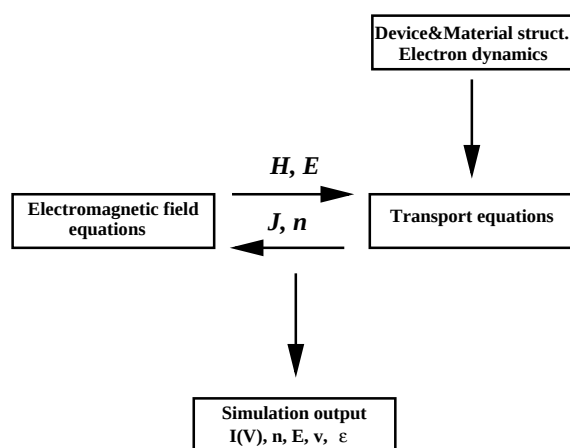
Моделирането на полупроводникови прибори (МПП), (ii), е ядрото на тази йерархия, което се фокусира върху проблема как физичните - материалните и структурни характеристики на даден прибор, определят процесите на транспорт на токови носители в него и по такъв начин електрическото му поведение. Последното на свой ред определя електронните свойства на интегралната схема. МПП обединява математични, физични и електро-инженерни подходи, имащи за цел описание на електричните характеристики на симулираната структура. Освен че дава възможност да се изследват хипотетични структури, които все още не са (или не могат да бъдат) произведени, моделирането на прибори позволява да се наблюдават и анализират явления, които са недостъпни за измервателните методи.

1.3 Моделиране на полупроводникови прибори

1.3.1 Основни модули

Основните компоненти на МПП 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. 1.2. 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 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



Фигура 1.2: Основни МПП модули [5].

величини са волт-амперната характеристика на прибора, както и разпределенията на концентрацията, електричното поле, средната скорост и енергия на зарядите. Схемата на Фиг. 1.2 е актуална за възможните транспортни модели, обединени в йерархичната структура, показана на Фиг. 1.3

1.3.2 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 модели³ на електронен транспорт, които са валидни за големи прибори и ниски честоти, характерни за детството на микроелектрониката. Например първият процесор Intel 4004, произведен през 1971 г., Фиг. 1.1, има 2300 транзистора, базирани на 10 микронна силициева технология, и честота 400kHz. С увеличаване степента на интеграция и респективно с намаляване на големината на транзисторите става актуален дрейф-дифузионният модел, а с увеличаване на честотата - системата хидродинамични уравнения. Тези два модела 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 суб-микронни размери, където неравновесни ефекти като балистичен транспорт и явления, дължащи се на горещи носители, налагат решаването на самото уравнение на Болцман. Уравнението предлага изчерпателно класическо описание на микропроцесите, отговорни за динамиката на токовите носители. Те се ускоряват от електромагнитните полета по траектории, описвани от Нютоновата механика и биват разсейвани от нарушенията в периодичността на кристалната решетка, дължащи се на вибрации, примеси и други заредени частици. Процесите на разсейване се описват от функции, които макар и изчислявани със средствата на квантовата механика, имат вероятностен характер. В резултат самото уравнение е физически много прозрачно и може да бъде изведено от феноменологични съображения. Същото се отнася и за неговите производни, наречени дрейф-дифузионен и хидродинамичен модели благодарение на директната им физична интерпретация.

Симулационните подходи, разработени на базата на уравнението на Болцман, бележат златната ера на МПП. Тези подходи са в основата на разработването на съвременните процесори, отбелязани в горната част на Фиг. 1.1. В срав-

³Трябва да се отбележи, че аналитични модели се използват и сега, но за симулация на схеми с огромен брой прибори: това са т.нар. компактни модели, чиято разработка разчита на резултати от МПП.

нение със своя праотец, процесорите от серията Intel Core2 Duo са базирани на 45 нанометрова технология, използваща напрегнат силиций, съдържат близо милиард транзистора и достигат честота 3GHz. Лабораторно създадени са НЕМТ транзистори от индиев фосфит (InP), които вече надминават честота от 1000GHz.

	MODEL	FEATUERS
QUANTUM	Green's Functions Method	accounts for both spatial and temporal correlations
	Wigner Equation; von-Neumann Equation for the density matrix	quantum-kinetic models of spatial correlations
	Quantum-Hydrodynamic Equations	quantum corrections to the classical hydrodynamics
CLASSICAL	Boltzmann Transport Equation	comprehensive down to <i>nm</i> and/or <i>fs</i> scales
	Hydrodynamic Equations	for local sub- μm and transient effects
	Drift-Diffusion Equation	for devices $\geq 0.5\mu m$
	Compact Models	for circuit design

Фигура 1.3: Транспортни модели.

С навлизането в нанометровата скала и/или при терахерцов режим на работа започва наноерата на полупроводниковата индустрия, през която се достигат физическите граници на основно използваните през последните 40 години материали концепции и технологии, а също така актуални стават нови явления от кинетиката и динамиката на носителите, които са извън областта на валидност на класическия Болцманов модел. Те изискват квантово описание, осигурявано от моделите на транспорт, представени в горната част на Фиг. 1.3. Тези модели се базират на различни формализми на квантовата механика и съответно се развиват от различни школи в областта на МПП. Според пътната карта [1], таблица MS1 'Difficult Challenges', като тежко предизвикателство за МПП се

сочи необходимостта от 'методи, модели и алгоритми за определяне границите CMOS,..., за нови материали и архитектури', както и '...основни, акуратни и числено-ефективни квантови симулатори....'. Квантовите модели трябва да са способни да описват както кохерентни процеси като квантизация и тунелиране, така и процеси на декохеренция, дължащи се например на взаимодействия с фонони

1.3.3 Аспекти на МПП

Тези формулировки в пътната карта илюстрират в частност два аспекта на МПП.

(i) Ясно се подчертава значението на математическите подходи за МПП: прогресът в областта зависи както от това колко комплексен е транспортният модел, така и от прилагането на ефективни числени методи, алгоритми и компютърни технологии. Наистина моделите от Фиг. 1.3 (освен компактните) могат на практика да бъдат решени само числено. Детерминистични подходи - крайни разлики и елементи, биват успешно развити за дрейф-дифузионните и хидродинамични уравнения[6]. Освен това докато транспортът в първите поколения прибори е едномерен (1D), то при следващите генерации основна роля играят двумерни и тримерни процеси, с което решението се търси в тримерни координати. Развиват се и някои комерсиални симулатори [7].

При субмикронните прибори е необходимо решаването на уравнението на Болцман, което се удовлетворява от функцията на разпределение на носителите. Тя се формулира във фазовото пространство на координати и импулси, така че за времезависими процеси проблемът става седеммерен. Намирането на такова решение с детерминистични подходи е невъзможно⁴. Това заедно с вероятностния характер на самото уравнение стимулира развитието на статистически

⁴Обсъждането е в исторически план. Благодарение на развитието на изчислителната техника през последното десетилетие се прилагат детерминистични методи за случаите, когато функцията на разпределение е необходима с голяма точност [8]

методи за решаването му. Именно на възможността на Монте Карло методите да решават ефективно уравнението на Болцман се дължи големият напредък във всички сфери на областта: от анализ на ролята на различни физични явления, през развитие на нови концепции, структури и материали до реализация на все по-съвършени прибори. Успоредно с това вече 40 години се усъвършенстват и самите статистически подходи и се предлагат нови алгоритми, които посрещат предизвикателствата от развитието в областта. Една от целите на този труд е да проследи развитието на метода от първите интуитивни Монте Карло алгоритми, изведени от феноменологични съображения, до формалния итерационен подход, който обобщава съществуващите и е основа за извеждане на нови алгоритми в областта.

(ii) Второ, класическата хармония между теоретико-физичен и числено-математически подходи липсва в горната квантова част на Фиг. 1.3. Причината е, че това относително младо направление в МПП още е в процес на развитие, като до момента липсват както универсален квантов модел за симулацията, така и ефективен числен метод.

Най-комплексен от физична гледна точка е подходът с неравновесни функции на Грийн (NEGF)[9]. При него се отчитат едновременно кохерентни процеси на корелации и в пространството и във времето, както и процеси на декохеренция, дължащи се на нарушения в периодичността на решетката. Най-общо проблемът зависи от две пространствени и две времеви променливи. Разработен е детерминистичен подход, при който се използва рекурсивен алгоритъм, и който дава възможност за симулации на двумерни прибори в случая на балистичен транспорт, като пренебрегва декохерентните процеси [10]. При двумерни прибори числената тежест може да се редуцира допълнително чрез разделяне на надлъжната от напречната компоненти на променливите, за което се предполага хомогенен по отношение на надлъжната променлива напречен потенциал. Успоредно с това се правят сериозни усилия да се включат декохерентни процеси на разсейване от фонони в различна степен на приближение, [11],[12]. Въпреки че се очакваше този подход бързо да постигне ефективността на класи-

ческите симулации, напоследък започва да се налага мнението, че поставените теоретичните и числени предизвикателства не позволяват постигането на степента на развитие, устойчивост и гъвкавост на класическия подход. Например квази-двумерно третиране не винаги е валидно, защото съществуват прибори със стесняваща се канална област. Освен това моделът практически се прилага само в стационарни случаи (една променлива по времето), включването на декохерентни процеси от фонони е нетривиална задача.

На следващото ниво за сметка на корелациите във времето са унитарно еквивалентните формализми, използващи матрица на плътността или функция на Вигнер. В първия случай има две пространствени и една променлива по времето, а при втория двете пространствени координати са заменени с помощта на Фурие трансформация с фазови координати. И двата формализма са удобни за третиране на нестационарни процеси. Има силни аргументи за избор на втория формализъм за нуждите на МПП. Функцията на Вигнер е дефинирана във фазовото пространство като своя класически еквивалент - функцията на разпределение, а формализмът поддържа много съотношения, еквивалентни на тези от класическата механика. Друга аналогия с класическия случай е, че процеси на декохеренция (резултат от взаимодействието носител - нарушения на решетката) може да бъдат отчетени от същия оператор, описващ Болцмановата динамика. Той се добавя към кохерентното уравнение (отчитащо взаимодействието носител-потенциал) първоначално от феноменологични съображения [13], а строгата обосновка на обобщеното уравнение, наречено Вигнер-Болцманов модел, идва по-късно, [14]. По-конкретно е изведена йерархията модели, показани на Фиг 1.4 Тези модели са подредени по различната степен на приближение на процесите на декохеренция, докато кохерентната част на динамиката се разглежда на строго квантово ниво. Едно класическо приближение в кохерентния оператор води до уравнението на Болцман, поставено най-отдолу да покаже откъде започват своето развитие Монте Карло методите за квантов транспорт. Първите опити да се използва Вигнеровия формализъм за МПП са отпреди две десетилетия. Прилагат се детерминистични методи в случая на кохерен-

WF MODEL	SYSTEM DESCRIPTION	PHYSICAL FEATURES	NUMERICAL TREATMENT
Generalized	detailed quantum electron + phonons	pure state for the electron + phonons	not possible
Reduced (electron)	quantum electron, quantum el.-phon. interaction	interference between coherent and phonon processes	not available
Wigner-Boltzmann	quantum electron, Boltzmann el.-phon. interaction	coherent and phase-breaking processes	Monte Carlo 1D
Barker-Ferry or Levinson model	classical electron, quantum el.-phon.	intra-collisional field effect, collisional broadening and retardation effects	Monte Carlo; deterministic; homogeneous or quantum wire
Boltzmann	classical limit for electron and el.-phon interaction	classical transport	Monte Carlo; 3D devices deterministic

Фигура 1.4: Йерархия на модели, използващи Вигнеровото представяне на квантовата механика

тен транспорт. Успешно е симулирано поведението на типично квантов прибор какъвто е резонансно-тунелният диод [13, 15], като са решени проблеми свързани, с граничните условия и неустойчивост по отношение на дискретизационната схема. Няколко години по-късно започва работа по развиването на стохастични методи за решаване на уравнението на Вигнер [16]. Изкушаващо предимство на такива методи е възможността за директно използване на класическите Монте Карло алгоритми за разсейване от решетката. Така основният проблем на един стохастичен подход е решаването на кохерентната част на уравнението. В началото на това десетилетие са предложени два Монте Карло подхода, които в последствие доказват в различна степен своето практическо значение.

Дейността по извеждане на модели и Монте Карло алгоритми протича в сътрудничеството между групи от БАН и Университета в Модена [16, 17, 18]. По-късно в тази дейност се включиха групи от Виенския технически университет и Университета в Аризона [19]. Съществен принос за развитието и приложението на

Монте-Карло подхода дойде в последните години от Университета на Париж - Юг [20].

Една от основните задачи на тази дисертация е да представи както извеждането на Вигнерови квантово-транспортни модели, така и разработването на Монте Карло методи за решаването им. Разработването на такива методи за квантов транспорт се базира на подробен анализ на уравнението на Вигнер с помощта на числената Монте Карло теория. Поради формалната аналогия с класическата механика, много схеми и алгоритми от Болцманов транспорт се използват директно или се обобщават за квантовия случай. Затова изложението следва от близко историческото развитие на проблематиката.

1.4 Основни понятия от полупроводниковия модел

Тук се въвеждат някои понятия и величини, формиращи полупроводниковия модел, който на свой ред е в основата на транспортните модели и предоставя входните параметри на всяка симулация. Негови основни елементи са електронната зонна структура, механизми на разсейване от решетката и едно множество материални параметри. За изложението е предпочетен евристичният подход, за да се подчертае феноменологичната връзка между основни физически предположения и елегантни математически следствия. Формалното въвеждане на понятията може да бъде намерено във всяка книга по физика на твърдото тяло [21].

1.4.1 Електрони в кристалната решетка

1.4.1.1 Зонна структура

Електроните в полупроводниковия кристал се движат в електричен потенциал, дължащ се както на ядрата на подредените в решетката атоми, така и на ос-

таналите електрони. Ситуацията се описва от много сложна многочастична задача, която се свежда до еднелектронно уравнение на Шрьодингер в резултат на допускания и приближения, най-важните от които са, че ядрата са в покой във възлите на решетката, решетката е идеално подредена, а взаимодействието с останалите огромен брой електрони се усреднява до ефективен потенциал, който зависи само от координатите $\mathbf{r}$ на разглеждания единствен електрон. От предполагаемите гранични периодични условия, характеризирани от дължината⁵ на кристала L , се въвежда компонента на вълновия вектор k , съответстваща на дискретна Фурие трансформация със стъпка $\Delta k = 2\pi/L$. Обикновено Δk е много малко в сравнение с размерите на кристала, така че k се разглежда като непрекъснато за трите компоненти на вълновия вектор $\mathbf{k}$. Ефективният потенциал е транслационно-инвариантен [22] и има всички свойства на симетрия на решетката, от което следват много важни свойства на собствените функции $\psi_l(\mathbf{r})$ и стойности ϵ_l на еднелектронното уравнение на Шрьодингер. Първо, освен че се квантуват дискретно: $l = 0, 1, \dots$, те зависят от вълновия вектор $\mathbf{k}$. Второ, поради инвариантността към транслация на елементарен вектор на решетката $\mathbf{a}$, те се оказват периодични спрямо елементарен вектор на обратната решетка $\mathbf{b} = 2\pi/\mathbf{a}$. И така, цялата информация за зонната структура - функцията $\epsilon_l(\mathbf{k})$, се съдържа в интервал от един период, който ако е избран така, че да отразява цялата симетрия на решетката: $-\mathbf{b}/2 \leq \mathbf{k} \leq \mathbf{b}/2$, се нарича зона на Брилуен. За електрон с енергия $\epsilon_l(k)$ казваме, че се намира в зона l в състояние с вълнов вектор k . Състоянията до дадена зона l са запълнени от електрони, а тези в по-горните зони са празни.

Характеристика на всеки полупроводник е че зоната l , наречена валентна, е почти изцяло пълна, следващата проводима зона е почти празна, а между тях има участък енергии - забранена зона, където не може да има електронни състояния. Един от важните параметри в МПП е ширината ϵ_g между минимума на проводимата и максимума на забранената зони. Обикновено електроните се прехвърлят от състояния около максимума на валентната зона в състояния око-

⁵в дадена посока

ло минимума на проводимата в резултат на определени физични процеси. Тези електрони, както и свободните валентни състояния, наречени дупки, създават проводимостта. Ако в забранената зона има примесни състояния (нарушение на идеалността на решетката), те могат да предоставят електрони на проводимата зона (донорни състояния) или да приемат такива от валентната зона (акцептори). Може да се покаже, че $\epsilon_l(\mathbf{k})$ е четна аналитична функция по $\mathbf{k}$, [22]. Тя може да се изчисли с различни методи, обаче пълното познаване на зонната диаграма е необходимо само в случаи на много високи полета. В противен случай е достатъчно познаването на зоната около минимумите/максимумите на проводимата/валентна зони. Най-често използвани са аналитичните модели, които представят зоната около точката на екстремума $\mathbf{k}_0$

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

Както се вижда от сферически-симетричния случай, величината m^* играе ролята на маса а $\hbar \mathbf{k}$ на импулс. Затова m^* се нарича ефективна маса, която в общия случай става тензор. В частност, ако повърхностите на постоянна енергия са елипсоиди, чиито оси съвпадат с главните кристалографски направления, се говори за надлъжна и напречна ефективна маса. С отдалечаване от $\mathbf{k}_0$ започват ефекти на непараболичност, които се отчитат с пертурбационни техники, водещи до добавяне на член $\alpha(\epsilon_g, m^*)\epsilon_l(\mathbf{k})^2$ в лявата страна на (1.1). Ефективната маса на празните електронни състояния във валентната зона е отрицателна, което ще бъде дискутирано по-нататък.

1.4.1.2 Динамика на носителите

Тези разглеждания сочат, че периодичният потенциал в кристала води до ефективна промяна на масата на носителите. Сега предполагаме, че освен периодичния потенциал имаме приложено и електрично поле $\mathbf{E} = -\nabla\phi(\mathbf{r})$, което се мени слабо на разстояния, сравними с константата на кристалната решетка. Според квантовата механика на един движещ се електрон съответства вълнов пакет от

функции Ψ_l . Както ще бъде показано по-нататък, ако потенциалът се изменя линейно в рамките на вълновия пакет асоцииран с електрона, движението му е класическо. Така такова допускане дава възможност да се приложат уравненията на Хамилтон:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \nabla_{\mathbf{p}}\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (1.2)$$

където $\mathbf{p}$ е въведеният в (1.1) импулс на електрона, а $\mathbf{r}$ координатата в реалното пространство. Хамилтонианът $\mathcal{H}$ движещия се в потенциално поле електрон е сумата от неговата кинетична и потенциална енергии: $\mathcal{H} = \epsilon(\mathbf{k}) - e\phi(\mathbf{r})$, където $-e$ е неговият заряд. В случая с помощта на (1.1) получаваме

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E}, \quad \mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k}). \quad (1.3)$$

При сферически-симетрична ефективна маса в частност получаваме стандартната формула $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m^*$. Тя се обобщава от второто уравнение в (1.3), което обобщава нетривиалния случай на тензорна ефективна маса.

Поради еквивалентността между вълнов вектор и импулс $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$ ще бъдат използвани и двете величини, като изборът ще бъде правен според традициите в литературата посветена на съответната тема. Като правило зонната структура и от там функциите на разсейване се пресмятат в $\mathbf{k}$ пространството, докато функциите, описващи динамиката на носителите, са в $\mathbf{p}$ координати.

1.4.1.3 Пренос на заряди

Поради четността на ϵ , скоростта $\mathbf{v}$ е нечетна функция на $\mathbf{k}$. Така оценката за тока в изцяло пълна зона дава нула: $-\sigma_k e\mathbf{v}(\mathbf{k}) = 0$. От това следва, че токът от електрони в една непълна зона е равен на тока от фиктивни положително-заредени частици, заемащи празните състояния:

$$I = \sum_{k1} -e\mathbf{v}(\mathbf{k}_1) = \sum_{k2} +e\mathbf{v}(\mathbf{k}_2),$$

където $\mathbf{k}_1$ ($\mathbf{k}_2$) пробягва заетите (празни) електронни състояния. Нека освен това свободните състояния да са около максимум във валентната зона. За удобство разглеждаме сферически-симетричния случай, като резултатите директно се обобщават за тензорна ефективна маса.

$$\epsilon_l(\mathbf{k}) = \epsilon_l(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} = \epsilon_l(\mathbf{k}_0) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2|m^*|}$$

От тук и (1.3) следва, че:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{|m^*|} \frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = \frac{e}{|m^*|} \mathbf{E}.$$

Полученото уравнение е точно законът за ускорение на положително заредени частици с положителна маса $|m^*|$. Така се въвежда квазичастицата 'дупка'. Формално оста на нарастване на енергията за дупките е 'надолу' в посока отдаляване от максимума, навътре в зоната. Ако една голяма част от тока в един полупроводник се дължи на дупки, се казва, че проводимостта му е от p тип, алтернативно проводимостта е от n тип. Въведената квазичастица е много удобна при моделиране на физичните процеси във валентната зона, защото замества огромния брой заети електронни състояния с малък брой незаети такива.

Дупката е 'физична' квазичастица, защото се въвежда от феноменологични съображения. В този труд ще бъдат въведени и числени квазичастици. Ще бъде показано, че те са необходими не само за нуждите на симулациите, но служат и за интерпретация и обяснение на важни физични процеси.

От алгоритмична гледна точка дупките се третират по същия начин, както електроните. Затова основните резултати в този труд важат и за n , и за p тип полупроводници. Където това не е така, ще бъде указано в текста, а за удобство по-нататък ще използваме термините електрони или носители.

1.4.2 Нарушения на идеалността на решетката

Електроните в идеален периодичен потенциал се държат в присъствието на приложено електрично поле точно като свободни електрони: според (1.3) те 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 около възлите на решетката разсейват електроните от техните траектории и така ограничават нарастването на тока.

Вибрациите на решетката са най-важният процес, отговорен за релаксацията на импулса и енергията на електроните. При дадена температура те са неизбежни, като ако кристалът е достатъчно голям, те са равновесни. Ако даден електрон има ниска енергия, той получава такава от вибрациите. Обратното, ако енергията му е по-голяма, той генерира вибрации които отнемат от енергията му. И в двата случая решетката играе роля на термостат, който стабилизира енергията на електрона около равновесната стойност. Всяко взаимодействие води до промяна на посоката на импулса на електрона, което не позволява възникването на насочено движение при равновесните електрони.

Вибрациите може да бъдат представени удобно в базис от елементарни колективни възбуждания на решетката, наречени фонони. Ще бъде скициран изводът на вероятностната плътност за разсейване от фонони.

1.4.2.1 Фонони

Предполага се, че осцилациите на йоните около възлите на решетката имат малка амплитуда. Тогава водещ става квадратичният член от развитието на потенциалната енергия на даден йон по отклонението от равновесие (хармонично приближение). Това 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:

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2V\rho\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^+) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}, \quad (1.4)$$

където V и ρ са обема 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 променливи с

уравнения на движение от вида:

$$\frac{da_{\mathbf{q}}}{dt} = i\omega_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}}, \quad (1.5)$$

което има хармонично-осцилиращо решение. Сумата от кинетичната и потенциалната енергия на йоните определя хамилтониана на колебанията $\mathcal{H}$ като функция на $\mathbf{u}$ и $d\mathbf{u}/dt$. От (1.4) и (1.5) следва че $\mathcal{H}$ е функция на a и a^+ ; нещо повече, може да се покаже, че това са канонични променливи, защото удовлетворяват уравненията на Хамилтон⁶, (1.2) за $\mathcal{H}(a, a^+)$. Както е дискутирано в подсекция 1.8.1, преходът към квантова механика се извършва като на a и спрегнатата променлива a^+ се съпоставят оператори, удовлетворяващи комутационните съотношения

$$\hat{a}_{\mathbf{q}}\hat{a}_{\mathbf{q}'}^+ - \hat{a}_{\mathbf{q}'}^+\hat{a}_{\mathbf{q}} = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} . \quad (1.6)$$

В частност операторът на енергията $\mathcal{H}$ добива компактният вид

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}}^+\hat{a}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right), \quad \hat{a}_{\mathbf{q}}^+\hat{a}_{\mathbf{q}}|n_{\mathbf{q}}\rangle = n_{\mathbf{q}}|n_{\mathbf{q}}\rangle . \quad (1.7)$$

Може да се покаже, че собствените функции на $\mathcal{H}$ са от вида

$$\prod_{\mathbf{q}} |n_{\mathbf{q}}\rangle,$$

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. От тук собствените стойности на енергията са

$$\sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}} + 1/2) .$$

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

$$E(n, \mathbf{q}) = \hbar\omega_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}} + 1/2)$$

⁶с точност до въведен за удобство константен фактор.

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. Така:

$$P(n, \mathbf{q}) = \frac{e^{-E(n, \mathbf{q})/kT}}{\sum_n e^{-E(n, \mathbf{q})/kT}} = \frac{1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{q}}/kT}}{e^{-\hbar\omega_{\mathbf{q}}n/kT}},$$

$$n(\mathbf{q}) = \sum_n nP(n, \mathbf{q}) = \left(e^{\hbar\omega_{\mathbf{q}}/kT} - 1\right)^{-1}. \quad (1.8)$$

$n(\mathbf{q})$ се нарича функция на Бозе-Айнщайн. Освен това важат съотношенията

$$\hat{a}_{\mathbf{q}}|n_{\mathbf{q}}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{q}}}|n_{\mathbf{q}} - 1\rangle, \quad \hat{a}_{\mathbf{q}}^+|n_{\mathbf{q}}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{q}} + 1}|n_{\mathbf{q}} + 1\rangle, \quad (1.9)$$

поради което $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ се наричат оператори на унищожение и на раждане на фонони.

В кристал с един атом в елементарната клетка има три независими вектора на поляризация, които в изотропния случай са два напречни и един надлъжен по отношение на посоката на $\mathbf{q}$. Това са трите вида акустични фонони, за които може да се покаже, че $\omega_{\mathbf{q}} \rightarrow 0$, 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. Може да се разглеждат и екзотични случаи на пиезоелектрични фонони съществуващи в кристали без инверсен център на симетрия.

1.4.2.2 Обща характеристика на разсейването от фонони

Колебанието на тежките йони около възлите на решетката се следва практически моментално от леките електрони. С други думи изменението на енергията на

електроните е моментално и по такъв начин е предизвикано от зависещ от времето адитивен член $\mathcal{H}_{e-ph}$ към Хамилтониана на идеалната решетка. Формално това означава, че потенциалната енергия на електрона в полето на йоните се развива в ред по отклонението им $\mathbf{u}$ от възлите на решетката. Амплитудата на $\mathbf{u}$ е малка, което позволява запазване само на линейния член $\mathcal{H}_{e-ph}$ ⁷.

При прехода към квантово-механично описание този член и в частност $\mathbf{u}$, (1.4) стават оператори. $\mathcal{H}_{e-ph}$ е малък и може да се разглежда като пертурбация, която предизвиква преходи между несмутените (отговарящи на идеален кристал) състояния на електрона. Теорията на пертурбациите изчислява броя преходи за единица време от състояние $|i\rangle$ в състояния df около $|f\rangle$ на системата електрон-фонони като:

$$S(i \rightarrow f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \mathcal{H}_{e-ph} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) df. \quad (1.10)$$

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. При извода на (1.10) се използва следната граница:

$$\delta(\xi) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{[\sin(\xi t)]^2}{\pi \xi^2 t}.$$

Тук $\xi = \Delta E/\hbar$ има измерение на честота, характеризираща скалата енергии на електрон-фононната система, а t е времето, изтекло от началото на взаимодействието, предизвикващо прехода. Така при еволюционни времена много по-големи от времето $1/\xi$, съответстващо на характерната честота на системата, вероятностите за преход стават константи, не зависещи от t , а само от началното и крайно състояние. Еквивалентно може да се каже, че взаимодействието с фонони е мигновено в сравнение с времето на еволюция на системата. Това е основно предположение за класическата картина на Болцманов транспорт⁸.

⁷Така $\mathcal{H}_{e-ph}$ е линейно по $\mathbf{u}$, което на свой ред е линейно по $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$.

⁸В този труд са разгледани и някои модели, в които времетраенето на взаимодействието е крайно и има квантов характер.

Началното и крайното състояние на несмутената система имат вид

$$\Psi_{l'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \prod_{\mathbf{q}', j'} |n'_{\mathbf{q}', j'}\rangle, \quad \Psi_{l''}(\mathbf{k}'', \mathbf{r}) \prod_{\mathbf{q}'', j''} |n''_{\mathbf{q}'', j''}\rangle. \quad (1.11)$$

Матричният елемент в (1.10) може да бъде разделен на електронна част с участието на Ψ и фононна част, която е линейна по операторите $\hat{a}_{\mathbf{q}, j} + \hat{a}_{\mathbf{q}, j}^+$. В резултат на (1.9) 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 унищожава (първи член в скобата), или ражда (втори член в скобата) един (и само един) фонон. Следователно в делта функцията в (1.10) участват началната и крайната енергия на електрона и енергията на фонона $\pm \hbar \omega_{j, \mathbf{q}}$, 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: техният брой е толкова голям или алтернативно действат други процеси, които поддържат равновесните стойности независимо от процесите на раждане и унищожение, причинени от взаимодействието. Усредняването по равновесното разпределение (1.8) 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 (1.4), е закон за запазване на импулса $\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'' \pm \mathbf{q})^9$, 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 функциите Ψ . Ако функциите, зависещи от

⁹с точност до вектор на обратната решетка

$\mathbf{r}$, се изменят слабо в рамките на една елементарна клетка, както е случая с далекодействащите сили на полярни и пиезоелектрични фонони, интегралът не е нула само ако $l' = l''$, понеже функциите Ψ са ортонормирани. Такива са вътрешдолинните преходи. Междудолинни преходи $l' \neq l''$ се получават при взаимодействия, описвани с деформационен потенциал, както и при оптични фонони.

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 $\mathbf{q}, j$:

$$\lambda(\mathbf{k}, l, j) = \int S(\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l') d\mathbf{k}' = \int \sum_{\pm, l'} A(\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l', j) \times \quad (1.12)$$

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

където функцията A се определя от конкретното взаимодействие. Скоростта на разсейване S , както и сумарната скорост λ на разсейване от $\mathbf{k}, l$ са основни понятия в моделите за разсейване на носители както от фонони, така и от други източници на разсейване и за Болцмановата, и за квантовата картина на транспорт. За удобство ще изпусваме индексите на зоните, което не ограничава общността на разглежданията.

1.5 Класически транспорт - уравнение на Болцман

1.5.1 Феноменологичен извод

Феноменологичният извод на уравнението на Болцман за токови носители в полупроводници 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, подсекция 1.4.1.2; Движението по траектории е прекъсвано от актове на разсейване, които са моментални по време и локални в реалното пространство, т.е. променя се само импулса 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: Нека $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)d\mathbf{p}d\mathbf{r}$ е броят¹⁰ електрони, намиращи се във фазов обем $\Omega = d\mathbf{p}d\mathbf{r}$ около $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ в момент от време t . В един следващ момент, $t + dt$, тези електрони се преместват по траекториите в нова точка $\mathbf{p}(t + dt), \mathbf{r}(t + dt)$. Съгласно един от основните резултати на класическата механика, теоремата на Лиувил, фазовият обем е несвиваем, т.е. в момент $t + dt$ обема $\Omega(t + dt)$ остава същият. Така нови електрони не могат да попаднат вътре в този обем по друг начин (например по траектории, идващи от друга част на фазовото пространство) освен благодарение на актовете на разсейване. Балансът за $\mathbf{p}, \mathbf{r}, t$ тогава е:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{p}} f \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \nabla_{\mathbf{r}} f \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}. \quad (1.13)$$

¹⁰или относителният брой, в зависимост от нормировката.

С помощта на (1.3) членовете с ∇ се идентифицират като промяна на f в резултат на потока през границите на фазовия обем: ускорението от полето води до промяна на състоянията в моментното пространство, а транспортът през границите на реалното пространство се контролира от скоростта на електроните. Класическите траектории са характеристики на диференциалната част на уравнението: от феноменологична гледна точка това значи, че при липса на разсейване разпределението на електроните по траекториите се запазва: $f(\mathbf{p}(t), \mathbf{r}(t), t) = f(\mathbf{p}(t + dt), \mathbf{r}(t + dt), t + dt)$. Разсейването води до преразпределение на електроните между разглеждания фазов обем и останалата част от пространството:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = \int d\mathbf{p}' S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) - \lambda(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) . \quad (1.14)$$

Вторият член отчита за всички разсейвания от фазовия обем към околното пространство, като броят им е произведение от скоростта на разсейване и броя на наличните за разсейване електрони. Първият член отговаря за обратния процес: от всяка точка $\mathbf{p}'$ в $\mathbf{p}$ идват електрони, чиито брой е пропорционален на плътността им в локалната точка, от която се осъществява приносът. Уравнение (1.14) съдържа едно важно предположение: финалното състояние след разсейване може да приеме разсейвания електрон. Последният е квантов обект, който въпреки че се разглежда в класическо приближение, трябва да удовлетворява принципа на Паули. Това се отчита от фактор¹¹ $1 - f$ във финалното състояние, които прави уравнението нелинейно. Обикновено е валидно приближението на ниска плътност, при което $f \ll 1$ с което интегро-диференциалната форма на уравнението на Болцман става:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{F}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{p}} + \mathbf{v}(\mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{r}}\right) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p}' S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) - \lambda(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad (1.15)$$

¹¹ f може да се нормира така, че да дава вероятностната плътност за заемане на $\mathbf{p}, \mathbf{r}$, което се и предполага в случая.

където от (1.3) използваме $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$. Това уравнение заедно със съответните начално и/или гранични условия е в основата на класическите транспортни модели. Като правило лявата и дясна части на уравнението описват антагонистични процеси: приложените полета се опитват да създадат насочено движение на електроните, докато актовете на разсейване се опитват да върнат хаоса в системата. С тях е свързана и Н-теоремата на Болцман, според която ако системата се затвори (чрез изключване на външните полета и фактори), ентропията ще нараства до достигане състояние на равновесие. Последното играе основна роля в термодинамичните и статистическите подходи и се дефинира като състояние, при което престават всякакви макропроцеси и макропотоци. Така лявата част на уравнението става нула, което означава, че равновесието се описва от функция f_{MB} която изравнява скоростите на разсейване навън и навътре, (1.14), във всеки фазов обем. Тази функция е единствена в зависимост от статистиката: ако електроните се разглеждат като фермиони, така че факторът, отчитащ принципа на Паули е включен, функцията е на Ферми-Дирак. В приближение на ниска плътност това е функцията на Максвел-Болцман:

$$f_{MB}(\mathbf{p}) = f_{MB}(\epsilon(\mathbf{p})) = e^{-\epsilon/kT}/Z, \quad (1.16)$$

където статистическата сума Z отговаря за нормировката.

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. По тази причина получаването на функцията на разпределение е главна задача за статистическата механика.

1.5.2 Параметризация на траекториите

Класическите траектории се определят еднозначно като решения на уравненията на Нютон (1.3) при задаването на инициализационна точка от фазовото пространство в даден момент време. Пълното означение на траекторията, ини-

циализирана от $t, \mathbf{p}, \mathbf{r}$, е

$$\begin{aligned}\mathbf{P}(t'; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \mathbf{p} - \int_{t'}^t \mathbf{F}(\mathbf{R}(y; t, \mathbf{p}, \mathbf{r})) dy, \\ \mathbf{R}(t'; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \mathbf{r} - \int_{t'}^t \mathbf{v}(\mathbf{P}(y; t, \mathbf{p}, \mathbf{r})) dy .\end{aligned}\quad (1.17)$$

Силата $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ може да зависи явно от времето, което остава имплицитно в означенията. Следните две съществуващи в литературата компактни означения ще бъдат използвани често

$$\mathbf{P}(t'; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{P}(t') = \mathbf{p}(t'), \quad \mathbf{R}(t'; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{R}(t') = \mathbf{r}(t'), \quad (\mathbf{P}(t) = \mathbf{p}, \mathbf{R}(t) = \mathbf{r}) . \quad (1.18)$$

Инициализацията ще бъде обявявана явно на места, където се налага да се избегне двусмисленост. Релациите в скобите в дясно ще бъдат използвани често нататък.

Времето t' параметризира траекторията “обратно” във времето, ако $0 < t' < t$ и ”нормална” или “напред” във времето, ако $t' > t$.

С помощта на (1.3), сегментът от траекторията между времената $t_2 < t_1$ може да се запише като:

$$\begin{aligned}\mathbf{P}(t_e) &= \mathbf{P}(t_2) + \int_{t_2}^{t_e} \mathbf{F}(\mathbf{R}(y)) dy = \mathbf{P}(t_1) - \int_{t_e}^{t_1} \mathbf{F}(\mathbf{R}(y)) dy, \\ \mathbf{R}(t_e) &= \mathbf{R}(t_2) + \int_{t_2}^{t_e} \mathbf{v}(\mathbf{P}(y)) dy = \mathbf{R}(t_1) - \int_{t_e}^{t_1} \mathbf{v}(\mathbf{P}(y)) dy .\end{aligned}\quad (1.19)$$

Поради еднозначността на решението горните релации показват два възможни начина за инициализация: с помощта на $\mathbf{P}(t_2), \mathbf{R}(t_2), t_2, t_e > t_2$ или използвайки $\mathbf{P}(t_1), \mathbf{R}(t_1), t_1, t_e < t_1$. В момент t_e на еволюцията и двата начина на инициализация водят до една и съща точка $\mathbf{P}(t_e), \mathbf{R}(t_e)$ от фазовото пространство. Съответно първият начин се нарича нормална инициализация, а втората обратна инициализация.

Съгласно теоремата на Лиувил траекториите запазват обема на дадена област от фазовото пространство. $d\mathbf{p}d\mathbf{r} = d\mathbf{P}(t')d\mathbf{R}(t')$. В частност е валидно следното

тържество:

$$\int d\mathbf{p}d\mathbf{r}\phi(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \mathbf{P}(t'), \mathbf{R}(t')) = \int d\mathbf{p}'d\mathbf{r}'\phi(\mathbf{P}'(t), \mathbf{R}'(t), \mathbf{p}', \mathbf{r}') . \quad (1.20)$$

Тук ϕ е дадена функция, $\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau)$ е обратна траектория, инициализирана от $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ в момент t , докато $\mathbf{P}'(\tau), \mathbf{R}'(\tau)$ е нормална траектория, инициализирана от $\mathbf{p}' = \mathbf{P}(t'), \mathbf{r}' = \mathbf{R}(t')$. Релацията (1.20) ще бъде използвана често при трансформации по времето, които запазват стойностите на физичните величини.

1.5.2.1 Класическа функция на разпределение

Уравнението на Болцман може алтернативно да бъде получено от принципите на статистическата механика. Изводът дава възможност да се въведе скобката на Поасон, която по-нататък е необходима за постулиране на квантовата механика. В основата е въпросът как се изменят динамичните функции, съответстващи на физичните величини 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 една 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 :

$$\frac{dA}{dt} = [A, \mathcal{H}]_P = \frac{\partial A(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial A(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}}; \quad [\mathbf{r}, \mathbf{p}]_P = 1 \quad (1.21)$$

Скобката на Поасон $[\cdot, \cdot]_P$ въвежда основно съотношение между динамичните функции и Хамилтониана $\mathcal{H}$. Скобката на Поасон води до запазващо алгебричната структура (автоморфизъм) съответствие между множествата такива функции във времето. Алтернативно, във втория случай трябва да се постулира законът за еволюцията на $A(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$. Ако той се избере в съответствие с (1.21), автоморфизмът в съответствие води до запазване на законите на механиката: новата функция в старите координати е старата функция в новите координати

$$A(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))! \quad (1.22)$$

Статистическо описание се въвежда, ако например координатите на електрона не са известни точно, а с някаква вероятност, или ако се разглежда система от електрони. Съгласно основния постулат на класическата статистическа механика състоянието на една система се определя изцяло от една функция $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ със следните свойства:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \geq 0, \quad \int d\mathbf{r}d\mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 1 . \quad (1.23)$$

Стойностите на физичните величини A се получават от интеграли по фазовото пространство:

$$\langle A \rangle(t) = \int d\mathbf{r}d\mathbf{p} A(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) . \quad (1.24)$$

Това уравнение не е удобно, защото налага да се пресмята еволюцията на всяка конкретна физична величина A . Като се използва (1.22) заедно с теоремата на Лиувил се показва, че времето може да бъде асоциирано към функцията на разпределение f :

$$\langle A \rangle(t) = \int d\mathbf{r}d\mathbf{p} A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) . \quad (1.25)$$

Уравнението на Болцман се получава от (1.21) и (1.2) [23]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c . \quad (1.26)$$

Лявата част на (1.26), която е пълна производна по времето, остава константа по траекториите при липса на взаимодействие с околната среда: $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = 0$. Алтернативно частиците се преразпределят между траекториите, като дясната страна на (1.26) дава нетната промяна на плътността във фазовото пространство.

В следващата секция ще бъде изведен квантов аналог на уравнения (1.23), (1.25) както и на Болцмановото уравнение.

1.6 Квантов транспорт - уравнение на Вигнер

Съществуват няколко алтернативни формулировки на квантовата механика, като исторически първите са матричната механика на В. Хайзенберг [24] и вълновата механика на Е. Шрьодингер [25], обобщени от П. Дирак [26] и Дж. фон-Нойман [27] в абстрактния операторен формализъм в термините на Хилбертово пространство. По същото време Е. Вигнер [28] предлага една формулировка на квантовата механика във фазовото пространство. И физическите състояния, и наблюдаемите се представят от функции на фазовите координати. Трансформацията на Вейл [29] 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: (1.23), (1.24). 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 [29], [28], [30]. Така възниква въпросът дали тази теория е автономна, еквивалентна алтернатива на квантовата механика? Какво отличава класическо от квантово поведение във фазовото пространство? Всяка неотрицателна интегрируема и нормирана функция е възможна класическа функция на разпределение. Алтернативно, как в частност как да се определи дали дадена функция в това пространство е възможно квантово състояние?

Обратният подход, а именно да се формулира независимо теорията на Вигнер във фазовото пространство и след това да се изведе операторната механика, се развива значително по-късно [31], [32], за да завърши доказателството на логическата еквивалентност на двете теории. Въвеждат се строги критерии, според

които функциите, дефинирани във фазовото пространство, се разделят на не-квантови, на чисти и на смесени квантови състояния (дискутирани в 1.6.1). Например, за да бъде една такава функция чисто състояние, трябва да бъде реална, квадратично интегрируема и да удовлетворява определено частно диференциално уравнение. Показва се, че квантовата еволюция запазва пространството от такива функции, което е еквивалентно на Хилбертовото пространство на физични състояния от операторната механика.

Нататък ще бъде следван класическият път на извод на Вигнеровото уравнение от операторната формулировка на квантовата механика.

1.6.1 Операторна механика

Резюмирани са основните принципи на операторната квантовата механика, необходими за извеждането на формализма на Вигнер.

Физичните величини са представени от Ермитови оператори $\hat{A}$:

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle, \quad \langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{1}. \quad (1.27)$$

Тези оператори имат реални собствени стойности, съответстващи на възможните стойности, 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 $|\Psi_t\rangle$:

$$\hat{H}|\Psi_t\rangle = i\hbar \frac{\partial|\Psi_t\rangle}{\partial t}, \quad \langle\Psi_t|\Psi_t\rangle = 1, \quad |\Psi_t\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle. \quad (1.28)$$

Познаването на $|\Psi_t\rangle$ дава пълната информация за състоянието на дадена физическа система, като за нея се казва, че е в чисто състояние. Състоянието може да бъде разложено по пълния базис на дадена наблюдаема A . Също може да се

покаже, че по време на еволюцията нормализацията на състоянието се запазва, което често се нарича запазване на вероятността.

Как обаче се получават операторите, съответстващи на физичните величини? Като първа стъпка към отговора на този въпрос операторната механика постулира принципа на съответствие, допълнение 1.8.1, според който на класическите позиции и импулс съответстват Ермитовите оператори $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$, които удовлетворяват квантовия аналог на скобката на Поасон - комутатора $[\cdot, \cdot]_-$

$$\mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}, \quad \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}} = [\hat{r}_i, \hat{p}_j]_- = i\hbar\delta_{ij} . \quad (1.29)$$

Тези оператори не комутират, поради което една физична система може да бъде представена от собствените функции само на единия от тях. Едновременното измерване и на координатата, и на импулса е невъзможно: известните съотношения на неопределеност на Хайзенберг следват от (1.29). Така координатата и импулсът на една частица не могат да бъдат използвани, за да дефинират фазово пространство в квантовата механика.

В координатно представяне с помощта на (1.27) и (1.29) се получава:

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle, \quad \int d\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = \hat{1}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}} . \quad (1.30)$$

Средната стойност на всяка физична величина A в даденото състояние се получава от:

$$\langle A \rangle(t) = \langle \Psi_t | \hat{A} | \Psi_t \rangle = \int d\mathbf{r} \langle \Psi_t | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \Psi_t \rangle . \quad (1.31)$$

На пръв поглед изглежда, че може да се използва само 'половината' от фазовото пространство, така че всяка аналогия с класическото правило за получаване на физическите средни изглежда невъзможна. Както ще видим обаче актуалният брой на координатите в (1.31) е два пъти по-голям. Наистина, с помощта на (1.27) и (1.30) се получава:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{A} | \Psi_t \rangle = \int d\mathbf{r}' \sum_n a_n \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \Psi_t \rangle = \int d\mathbf{r}' \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi_t(\mathbf{r}'),$$

където $\Psi_t(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi_t \rangle$. Едно заместване в (1.31) показва явно координатите, участващи в оценка на средната стойност:

$$\langle A \rangle(t) = \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r} \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_t(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \text{Tr}(\hat{\rho}_t \hat{A}) . \quad (1.32)$$

Величината ρ_t ($\hat{\rho}_t$) се нарича матрица (оператор) на плътността.

$$\rho_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Psi_t^*(\mathbf{r}') \Psi_t(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi_t \rangle \langle \Psi_t | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{\rho}_t | \mathbf{r}' \rangle, \quad \hat{\rho}_t = \sum_{m,n} c_m^*(t) c_n(t) |\phi_n\rangle \langle \phi_m| . \quad (1.33)$$

Релацията (1.32) 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 показват, че ако $|\Psi_t\rangle$ е решение на (1.28), следва, че

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_t}{dt} = [\mathcal{H}, \hat{\rho}_t]_-, \quad \text{Tr}(\hat{\rho}_t) = 1 . \quad (1.34)$$

Уравнението на фон-Нойман (1.34) е от фундаментално значение за квантовата статистика. То обобщава случаите, в които информацията за системата не е пълна, а статистически разпределена. Такъв е например случая, 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 $|\Psi_t\rangle$ на (1.28), което да дава описание на системата. За тези случаи се постулира уравнението на фон-Нойман (1.34).

Както в класическия случай и тук се стига до формулировка, при която зависимостта от времето се отчита от оператора на плътността, а не от динамичните оператори.

1.6.2 Квантова механика във фазовото пространство

Уравнение (1.32) има принципната структура на (1.25), особено ако едната от пространствените координати се замени с импулс. От тази аналогия следва съ-

що, че една подходяща трансформация, водеща до такова заместване, би трансформирала матрицата на плътността в квантов аналог на функцията на разпределение. За целта е необходим един принципен анализ на възможностите за съпоставяне между физични величини и оператори. Например $\hat{A}$ може да се получи с помощта на (1.29) от класическата функция $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, съответстваща на A . В частност може да се опита реда на Тейлър

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_{i,j} b_{i,j} \mathbf{r}^i \mathbf{p}^j \quad \rightarrow \quad A(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \sum_{i,j} b_{i,j} \hat{\mathbf{r}}^i \hat{\mathbf{p}}^j$$

за установяване на съответствието. За Хамилтониана на частица в потенциално поле $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ тази процедура дава коректен отговор. Обаче за общия случай процедурата е некоректна, защото операторите $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{r}}$ не комутират. Първо, могат да се появят оператори, които не са Ермитови. Второ, дори за Ермитови оператори има нееднозначност в съответствието. Например следните две еквивалентни изрази за функцията $A(x, p_x)$:

$$A_1 = p_x x^2 p_x = A_2 = \frac{1}{2}(p_x^2 x^2 + x^2 p_x^2)$$

водят до операторите

$$A_1 \rightarrow \hat{A}_1 = \hat{p}_x \hat{x}^2 \hat{p}_x, \quad A_2 \rightarrow \hat{A}_2 = \frac{1}{2}(\hat{p}_x^2 \hat{x}^2 + \hat{x}^2 \hat{p}_x^2),$$

които се различават с $\hbar^2$: $\hat{A}_1 = \hat{A}_2 + \hbar^2$. Различни оператори се съпоставят на една и съща класическа функция, което показва, че (1.29) не е достатъчно за установяване на еднозначно съответствие между A и $\hat{A}$. Трябва някакво правило, което премахва тази нееднозначност. Ще бъде използван фактът, че една функция $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ може да бъде получена от генериращата функция $F(\mathbf{s}, \mathbf{q}) = e^{i(\mathbf{s}\mathbf{r} + \mathbf{q}\mathbf{p})}$ както следва:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f\left(\frac{1}{i}\nabla_{\mathbf{s}}, \frac{1}{i}\nabla_{\mathbf{q}}\right)F(\mathbf{s}, \mathbf{q})_{\mathbf{s}=0, \mathbf{q}=0} = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{s} d\mathbf{q} d\mathbf{l} d\mathbf{m} f(\mathbf{l}, \mathbf{m}) e^{-i(\mathbf{l}\mathbf{s} + \mathbf{m}\mathbf{q})} F(\mathbf{s}, \mathbf{q}).$$

Остава да се разгледат възможни операторни реализации на F , например:

$$\hat{F}_1 = e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}})} e^{i(\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})}; \quad \hat{F}_2 = e^{i(\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})} e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}})}; \quad e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}} + \mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})}$$

представящи стандартното подреждане, където позициите са преди импулсите, анти-стандартното подреждане, където импулсите са преди позициите и подреждането на Вейл. Напълно симетричното подреждане на Вейл има много свойства, които са подобни на тези на характеристичната функция на вероятността [31] и ще бъдат използвани за установяване на съответствието. Изборът на алтернативни подредби води до алтернативни квази-разпределения. Трябва да се отбележи, че един път постулирано, правилото трябва да се прилага последователно: в противен случай може да се променят стойностите на оценяваните физични величини (1.31). Трансформацията на Вейл се дефинира като:

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = W(\hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})) = \frac{\hbar^3}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{s} d\mathbf{q} \text{Tr} \left(\hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}} + \mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})} \right) e^{-i(\mathbf{s}\mathbf{r} + \mathbf{q}\mathbf{p})} . \quad (1.35)$$

Еквивалентно, следва че:

$$\hat{A} = \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \int d\mathbf{s} d\mathbf{q} \beta(\mathbf{s}, \mathbf{q}) e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}} + \mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})} . \quad (1.36)$$

Тук β е спрегнато на A чрез Фурие трансформацията:

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d\mathbf{s} d\mathbf{q} \beta(\mathbf{s}, \mathbf{q}) e^{i(\mathbf{s}\mathbf{r} + \mathbf{q}\mathbf{p})}, \quad \beta(\mathbf{s}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{r} d\mathbf{p} A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-i(\mathbf{s}\mathbf{r} + \mathbf{q}\mathbf{p})} . \quad (1.37)$$

Основните съотношения от операторната механика се формулират във фазовото пространство с помощта на трансформацията на Вейл.

1.6.3 Извод на уравнението на Вигнер

Уравнението на Вигнер се извежда от уравнението на фон-Нойман, записано в явен вид по следния начин:

$$i\hbar \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)}{\partial t} = \langle \mathbf{r} | [\hat{H}, \hat{\rho}_t] | \mathbf{r}' \rangle = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} \right) + (V(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}')) \right\} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \quad (1.38)$$

Една смяна на променливите въвеждаща център на масите и относителна координата $\mathbf{r}_1 = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ води до:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2, t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_1 \partial \mathbf{r}_2} + (V(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2) - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2)) \right\} \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2, t) . \quad (1.39)$$

Както се показва в 1.8.2, Функцията на Вигнер се дефинира като Фурие трансформация по отношение на $\mathbf{r}_2$:

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

Трябва да се отбележи че координатата $\mathbf{r}_1$ и импулса $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{p}$ са независими променливи, със съответно комутиращи оператори ¹². Така $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{p}$ са едновременно наблюдаеми и могат да дефинират фазово пространство.

След прилагане на Фурие трансформацията върху дясната част на (1.39) се получават два члена които се записват с помощта на съкращението $\rho(+, -, t)$ за $\rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2, t)$ както следва

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

където интегрирането по части използва факта че системата е крайна: $\rho \rightarrow 0$ if $\mathbf{r}_2 \rightarrow \pm\infty$.

$$\begin{aligned} II &= \frac{1}{i\hbar(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{p}/\hbar} (V(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2) - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2)) \rho(+, -, t) = \\ &= \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{p}/\hbar} (V(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2) - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2)) \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}'/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'/2, t) . \end{aligned}$$

Делта функцията може да се замени от интеграла:

$$\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}' e^{i(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{p}'/\hbar} . \quad (1.40)$$

¹²Спрегнатата на $\mathbf{p}$ по отношение на релацията на Хайзенберг променилва е $\mathbf{r}_2$.

$$\begin{aligned}
II &= \frac{1}{i\hbar(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}_2 e^{i\mathbf{r}_2 \cdot (\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar} (V(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2) - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2/2)) \times \\
&\quad \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{r}' \cdot \mathbf{p}'/\hbar} \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}'/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'/2, t) = \\
&\quad \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}', t)
\end{aligned}$$

В резултат се получава уравнението на Вигнер:

$$\frac{\partial f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{r}} = \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) . \quad (1.41)$$

където V_w е потенциала на Вигнер:

$$V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\hbar(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{r}' \cdot \mathbf{p}/\hbar} (V(\mathbf{r} - \mathbf{r}'/2) - V(\mathbf{r} + \mathbf{r}'/2)) . \quad (1.42)$$

1.6.4 Свойства на функцията на Вигнер

В случая на чисто състояние уравненията на Вигнер и Шрьодингер са еквивалентни. Наистина съгласно изводите по-горе от Ψ_t може да се получи ρ и така f_w . Обратното е също вярно: може да се покаже че от f_w може да се получи Ψ_t с точност до фазов фактор [31].

Едно сравнение с (1.26) дава възможност да се разпознае в лявата част на уравнението на Вигнер оператора на Лиувил в случая на нулево поле.

Вигнеровия потенциал е реална величина. $V_w = V_w^*$. От тук следва че и f_w е реална величина. Директно се показва и закона за запазването на вероятността:

$$\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_2 \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}_2/2, \mathbf{r} - \mathbf{r}_2/2, t) \delta(\mathbf{r}_2) = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \hat{\rho}_t | \mathbf{r} \rangle = 1 . \quad (1.43)$$

Подобно може да се покаже че вероятността за разпределение в пространството и по импулс се получава след интегриране по алтернативната променлива, съответно по $\mathbf{p}$ и $\mathbf{r}$:

$$\int d\mathbf{p} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = |\Psi_t(\mathbf{r})|^2, \quad \int d\mathbf{r} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = |\Psi_t(\mathbf{p})|^2 . \quad (1.44)$$

Най-важното свойство на функцията на Вигнер е че средната стойност $\langle A \rangle(t)$ на една физична величина се получава от

$$\langle A \rangle(t) = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) A(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (1.45)$$

където, както е показано в 1.8.2 $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ е класическата функция (1.37).

С това целта поставена в началото на тази секция е постигната до голяма степен.

Уравнение (1.43) съответства на второто уравнение (1.23) и функцията на Вигнер е реална. Уравнение (1.45) е еквивалентно на (1.25). Лявите страни на квантовото и класическото транспортни уравнения се дават от оператора на Лиувил. Класическата и квантовата картина стават много близки. Независимо от това има основни разлики. Функцията на Вигнер може да става отрицателна и по такъв начин не може да бъде плътност на вероятността нито може да бъде интерпретирана като съвместно разпределение на позицията и импулса. Всъщност тя може да заема ненулеви стойности в области където плътността на частицата е нула. Както следва от (1.44) една физична интерпретация е възможна само след интегриране.

В специалната част на тази дисертация ще бъде показано че двете картини могат да бъдат приближени още, като е възможна една интерпретация на квантовия транспорт в термините на движение, раждане и унищожение на частици.

1.6.4.1 Класическа граница на уравнението

Важна за изложението по-нататък е класическата граница на (1.41). Ако потенциала V е линейна или квадратична функция на позицията следва

$$V(\mathbf{r} \pm \frac{\mathbf{r}'}{2}) = V(\mathbf{r}) \pm \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}'}{2} + \dots = V(\mathbf{r}) \mp \mathbf{F}(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{r}'}{2} + \dots,$$

където точките означават квадратичния член. Силата $\mathbf{F}$ може да бъде линейна функция на позицията. Тъй като четните членове на V се унищожават в (1.42),

потенциала на Вигнер става:

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

Дясната страна на уравнение (1.41) се трансформира както следва:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) &= \frac{-i}{\hbar(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{r}'(\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \mathbf{r}' f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) = \\ &= \frac{-\mathbf{F}(\mathbf{r})}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{r}'(\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) = -\mathbf{F}(\mathbf{r}) \frac{f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}}, \end{aligned} \quad (1.46)$$

където е използвано равенството

$$\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{r}'(\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} e^{-i\mathbf{r}'(\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar} .$$

Получава се уравнението на Болцман в отсъствие на разсейване:

$$\frac{\partial f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}) \frac{\partial f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (1.47)$$

Нека сега разгледаме за начално условие един вълнов пакет с минимална неопределеност. Функцията на Вигнер за такъв пакет има Гаусово разпределение по позиции и импулс [15]. Последният може да бъде еднакво добре интерпретиран и като начално разпределение на класически електрони. Така ако силата е най-много линейна функция на позицията квантовата еволюция съгласно (1.47) съответства на класическата еволюция. Независимо от разширението във фазовото пространство формата на пакета се запазва и f_w остава положителна функция по време на еволюцията.

Обратното, бързи изменения на потенциала водят до ефекти на интерференция: в близост до потенциални стени пакета бързо губи формата си, появяват се отрицателни стойности и бързи осцилации в стойностите на f_w .

По-нататък ще бъде показано че в присъствието на фонони класическата граница в уравнението на Вигнер води до уравнението на Болцман.

1.7 Монте Карло интегриране

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

Очакваната стойност E_ψ на една 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 една N мерна статистическа извадка за ψ . Средната стойност η на извадката оценява математическото очакване E_ψ

$$E_\psi \simeq \eta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi(Q_i), \quad \mathcal{P}\{|E_\psi - \eta| \leq \frac{3\sigma_\psi}{\sqrt{N}}\} \simeq 0.997 \quad (1.48)$$

с точност която зависи от броя независими реализации N и стандартното отклонение σ_ψ на случайната величина. Съгласно 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:

$$I = \int f(Q) dy = \int p(Q) \frac{f(Q)}{p(Q)}, \quad p(Q) \geq 0, \quad \int p(Q) dy = 1 \quad (1.49)$$

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:

$$f(Q) = \int dQ' f(Q') K(Q', Q) + f_0(Q) = \int dQ' K'(Q, Q') f(Q') + f_0(Q) . \quad (1.50)$$

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 (1.49) и може да бъде оценен с Монте Карло метод.

$$f_2(Q) = \int dQ_1 dQ_2 P(Q, Q_1) P(Q_1, Q_2) \frac{K'(Q, Q_1)}{P(Q, Q_1)} \frac{K'(Q_1, Q_2)}{P(Q_1, Q_2)} . \quad (1.51)$$

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 :

$$\langle A \rangle = (A, f) = \int dQ A(Q) f(Q) . \quad (1.52)$$

В този случай може да се разгледа едно уравнение спрегнато на (1.50):

$$g(Q') = \int dQ K(Q', Q) g(Q) + A(Q') . \quad (1.53)$$

Ако (1.50) се умножи с g , (1.53) се умножи с f , и получените уравнения се интегрират и сравнят, се получава равенството $(A, f) = (f_0, g)$:

$$\langle A \rangle = \int dQ' A(Q') f(Q') = \int dQ f_0(Q) g(Q) = \sum_i \langle A \rangle_i . \quad (1.54)$$

Последният член се получава с помощта на реда на Нойман на (1.53).

$$g(Q') = A(Q') + \sum_{n=1}^{\infty} \int dQ K^n(Q', Q) A(Q); \quad K^n(Q', Q) = \int dQ_1 K(Q', Q_1) K^{n-1}(Q_1, Q) . \quad (1.55)$$

които водят до представянето $\langle A \rangle = \sum_i \langle A \rangle_i$. Например подинтегралната величина за $\langle A \rangle_2$ е произведение от f_0 с две итерации на ядрото:

$$\langle A \rangle_2 = \int dQ' dQ_1 dQ_2 P_0(Q') P(Q', Q_1) P(Q_1, Q_2) \frac{f_0(Q') K(Q', Q_1) K(Q_1, Q_2) A(Q_2)}{P_0(Q') P(Q', Q_1) P(Q_1, Q_2)} . \quad (1.56)$$

В този вид (1.56) е увеличен с помощта на две вероятностни плътности P_0 и P аналогично на (1.49) и (1.51). Съответните плътности се използват за построяване на числени траектории: (i) $P_0(Q')$ избира началната точка за траекторията Q' . P_0 се предполага допустима за f_0 ; (ii) Преходната плътност $P(Q', Q)$ използва стойността на избраната на предишната стъпка точка Q' за да генерира следващата точка от траекторията Q . P удовлетворява условието $\int dQ P(Q', Q) = 1 \forall Q'$ и е различна от нула там където K е различна от нула. Случайната величина в $\langle A \rangle_2$ е произведение от множители $\frac{f_0}{P_0}$, $\frac{K}{P}$ оценявани във всяка избрана точка на редицата $Q_0 \rightarrow Q_1 \rightarrow Q_2$ получена чрез използване на $P_0 \rightarrow P \rightarrow P$. Средната стойност на N реализации на тази случайна величина изчислявани върху траекториите $(Q' \rightarrow Q_1 \rightarrow Q_2)_i$, $i = 1, \dots, N$, дава оценка за $\langle A \rangle_2$. Итеративният характер на многомерния интеграл (1.56) позволява една итеративна процедура за построяване на траекторията която може да бъде продължена чрез последователни апликации на P . По такъв начин една траектория се използва за едновременно оценка на последователните членове на (1.54), т.е. да оценява директно $\langle A \rangle$.

Условията за сходимост на реда на Нойман, както и условия и оценка на грешката при прекъсване на траекториите са коментирани в [33].

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.

1.8 Допълнения

1.8.1 Правило на съответствие

Уравненията на Хамилтон (1.2) не са запазени само за реалната координата $\mathbf{r}$ и импулс $\mathbf{p}$. Съществуват трансформации наречени канонични, които водят до нови променливи които също са свързани чрез релациите (1.2). В случая a и $\hat{a}^+$ са такива канонични променливи.

При преход към квантова механика се постулира правилото на съответствие което съпоставя на $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ съответните оператори (1.29). Последните могат да бъдат използвани за получаване на операторите съответстващи на физичните величини и в частност на a и $\hat{a}^+$. Алтернативно, на каноничните променливи могат да се съпоставят оператори съгласно (1.6), а чрез тях да се получат съответстващите оператори на физичните величини и в частност на $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$. Може да се покаже че двата начина са еквивалентни.

На всяка физична величина съответства оператор който е Ермитов. Неговите собствени стойности и собствени функции дават очакваната стойност на физичната величина в дадено състояние, както е показано в (1.57). Удобно е да се използват бра и кет векторите на Дирак за означаване на функциите от пространството на даден оператор и техните спрегнати. Така матричният елемент на оператор O между състояния на ермитов оператор M с квантови числа m и n е $\langle m|O|n\rangle$. Ако O е ермитов, то $\langle n|O|n\rangle$ е очакваната стойност на физичната величина асоциирана с O в състояние n . Ако o са собствени стойности на O , може да се използва пълнотата на базиса за да се покажат равенствата:

$$1 = \sum_o |o\rangle\langle o| \quad \langle n|O|n\rangle = \sum_o o |\langle o|n\rangle|^2 . \quad (1.57)$$

1.8.2 Функция на Вигнер

Следва се идеята да се преформулира (1.32) във форма, която възстановява класическото интегриране по фазово пространство. Ако това е възможно, подинтегралният множител на $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ би дефинирал квантовия аналог (в смисъл на 1.6.2) на класическата функция на разпределение. В частност по такъв начин се дефинира функцията на Вигнер. Тук се доказва важното съотношение (1.45). Съгласно с постулираната трансформация на Вейл:

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

Замествайки в

$$Tr(\hat{\rho}_t \hat{A}) = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_t \hat{A} | \mathbf{r}' \rangle$$

се получава:

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{p} A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \int \frac{d\mathbf{s} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i(\mathbf{r}\mathbf{s} + \mathbf{p}\mathbf{q})} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}' | e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}} + \mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})} \hat{\rho}_t(t) | \mathbf{r}' \rangle .$$

Средната стойност $\langle \hat{A} \rangle(t)$ се получава в търсената форма на интеграл по фазовото пространство от класическата функция $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Остава да се покаже, че членът I след A е функцията на Вигнер f_w , използвана в (1.6.3). За целта се използват следните равенства [31]:

$$e^{i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}} + \mathbf{q}\hat{\mathbf{p}})} = e^{-i\mathbf{s}\mathbf{q}\hbar/2} e^{i\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}}} e^{i\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}}} \quad e^{i\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}}} | \mathbf{r} \rangle = | \mathbf{r} - \mathbf{q}\hbar \rangle .$$

Изчисленията са дълги, но директни:

$$\begin{aligned} I &= \int \frac{d\mathbf{s} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i(\mathbf{r}\mathbf{s} + \mathbf{p}\mathbf{q})} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \langle \mathbf{r}' | e^{-i\mathbf{s}\mathbf{q}\hbar/2} e^{i\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}}} e^{i\mathbf{s}\hat{\mathbf{r}}} | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \hat{\rho}_t(t) | \mathbf{r}' \rangle = \\ &= \int \frac{d\mathbf{s} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i(\mathbf{r}\mathbf{s} + \mathbf{p}\mathbf{q})} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' e^{-i\mathbf{s}\mathbf{q}\hbar/2} \langle \mathbf{r}' | e^{i\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}}} | \mathbf{r}'' \rangle e^{i\mathbf{s}\mathbf{r}''} \langle \mathbf{r}'' | \hat{\rho}_t(t) | \mathbf{r}' \rangle = \\ &= \int \frac{d\mathbf{s} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i(\mathbf{r}\mathbf{s} + \mathbf{p}\mathbf{q})} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' e^{-i\mathbf{s}\mathbf{q}\hbar/2} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'' + \mathbf{q}\hbar) e^{i\mathbf{s}\mathbf{r}''} \rho(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t) = \end{aligned}$$

$$\int \frac{ds d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i(\mathbf{r}\mathbf{s}+\mathbf{p}\mathbf{q})} \int d\mathbf{r}' e^{-is\mathbf{q}\hbar/2} e^{is(\mathbf{r}'+\mathbf{q}\hbar)} \rho(\mathbf{r}' + \mathbf{q}\hbar, \mathbf{r}', t)$$

Използва се смяната: $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_1 - \mathbf{q}\hbar/2$

$$I = \int \frac{ds d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i(\mathbf{r}\mathbf{s}+\mathbf{p}\mathbf{q})} \int d\mathbf{r}_1 e^{-is\mathbf{q}\hbar/2} e^{is(\mathbf{r}_1+\mathbf{q}\hbar/2)} \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{q}\hbar/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{q}\hbar/2, t) =$$

$$\int \frac{ds d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{q}} \int d\mathbf{r}_1 e^{is(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})} \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{q}\hbar/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{q}\hbar/2, t) =$$

$$\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{q}} \int d\mathbf{r}_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}_1 + \mathbf{q}\hbar/2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{q}\hbar/2, t) .$$

Накрая с помощта на смяната $\mathbf{q} = \mathbf{r}'/\hbar$ се получава дефиницията на функцията на Вигнер:

$$I = \int \frac{d\mathbf{r}'}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}'/\hbar} \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}'/2, \mathbf{r} - \mathbf{r}'/2, t) = f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) .$$

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 (1.15). 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.

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, подхода 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. Доказана 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 проблема за самосъгласуването на тези алгоритми с решението на уравнението на Поасон.

2.1 Монте Карло техники

Една хомогенна симулационна задача се дефинира в пространството на импулсите и има за цел да изчисли разпределението на физическите величини в това пространство или техните стойности като функция на енергията или приложението поле. От особено значение са подвижността и дифузията (които в анизотропния случай са тензори), необходими за феноменологичните симулационни модели като входни макропараметри. В стационарния случай импулсът остава единствена променлива за функцията на разпределение и за физическите величини, както и в съотношенията, въведени в секция 1.5.

За основоположник на прилагането на Монте Карло методите в областта се смята Т. Kurosawa, който през 1966 година на Осмата международна конференция по физиката на полупроводниците предлага едночастичния Монте Карло под-

ход за симулация на ефекти на горещи носители [34].

2.1.1 Едночастична техника

Този алгоритъм се основава на хипотезата за ергодичност на една стационарна система, която позволява да се замени усредняването по ансамбъла частици с усредняването по време на еволюцията само на една от тях. Еволюцията следва процесите на дрейф и разсейване, описани в секция 1.5.1. Вероятностите за разсейване се получават от скоростите на разсейване S , (1.12), като ако се използва индекса j за означение на алтернативните механизми на разсейване¹, то тоталната вероятност за разсейване от $\mathbf{p}$ в $\mathbf{p}'$ е

$$\frac{S(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\lambda(\mathbf{p})} = \frac{\sum_j S_j(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\sum_j \lambda_j(\mathbf{p})} . \quad (2.1)$$

Вероятността

$$w(t) = \exp\left[-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(\tau))d\tau\right]$$

за дрейф без разсейване за време t по (импулсната част на) траекторията (1.17) се получава директно от факта, че за време dt се разсейват $\lambda(\mathbf{p})dt$ част от носителите, намиращи се в $\mathbf{p}$ в момент 0. Така, при условие че електронът се намира в $\mathbf{p}$ в момент t_0 , вероятността да се разсее в едно следващо време t е

$$w(t) = \lambda(\mathbf{P}(t))e^{-\int_{t_0}^t \lambda(\mathbf{P}(\tau))d\tau}, \quad W(t) = \int_{t_0}^t w(t')dt', \quad W(\infty) = 1 . \quad (2.2)$$

В този случай еволюцията по траекторията е напред във времето. Едно обръщане посоката на времето t в (2.2) ($-\infty < t < t_0$) води до обратна параметризация на траекториите (1.17) и така до алтернативната формулировка

$$w_-(t) = \lambda(\mathbf{P}(t))e^{-\int_t^{t_0} \lambda(\mathbf{P}(\tau))d\tau}, \quad W_-(t) = \int_t^{t_0} w_-(t')dt', \quad W_-(-\infty) = 1 . \quad (2.3)$$

¹включително междוזонните механизми l , както и емисия и абсорбция на фонони

Едночастичната траектория се строи с помощта на тези две условни вероятности от дадено начално състояние. Нататък с r се означава равномерно разпределено случайно число в интервала $(0, 1)$.

2.1.1.1 Траектория на една частица

- 1 Инициализират се случайни величини, отговарящи на състоянието (импулса) на електрона $\mathbf{p}$ с начална стойност $\mathbf{p}_0$, времена t_0 , t и кумулативно време T с начална стойност 0, на физична величина A , чиято средна стойност търсим в дадена област Ω .
- 2 Генерира се r и се решава уравнението $W(t) = r$, определящо момента на разсейване $t = t(r)$.
- 3 Намира се състоянието преди разсейване $\mathbf{P}(t)$ по траекторията (1.17), инициализирана от $\mathbf{p}_0$, t_0 и се актуализират стойностите

$$T = T + t - t_0, \quad t_0 = t, \quad \mathbf{p} = \mathbf{P}(t) .$$

- 4 Пресмята се приносът на тази част от траекторията към средната стойност $\langle A \rangle_\Omega$, както е дискутирано по-долу.
- 5 С помощта на (2.1) се намира се състоянието след разсейване $\mathbf{p}'$. За целта се генерира r и се решава за k уравнението

$$\sum_j^k \lambda_j(\mathbf{p}) \leq \lambda(\mathbf{p})r < \sum_j^{k+1} \lambda_j(\mathbf{p}),$$

което определя механизма на разсейване. Състоянието $\mathbf{p}'$ се получава от δ фумкциите в (1.12): като правило първо се изчислява $|\mathbf{p}'|$ закона за запазване на енергията, а след това законът за запазване на импулса дава разпределението на полярните ъгли спрямо направлението на $\mathbf{p}$, които се избират стохастично.

6 $\mathbf{p}$ се актуализира на $\mathbf{p}'$ и цикъла се повтаря от стъпка 2.

Симулираната траектория може да е в областта $d\mathbf{p}$ около $\mathbf{p}$ в момент t след $0, \dots, N$ разсейвания с вероятност

$$Pr_0(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}, t), \quad \dots, \quad Pr_N(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}, t) .$$

Алтернативно казано, една траектория $\mathbf{p}(t)$, състояща се от сегменти $\mathbf{P}(t)$, е конкретна реализация на тези вероятности. И така функцията на разпределение в точка $\mathbf{p}$ е пропорционална на времето, прекарано от симулираната траектория в околността и $d\mathbf{p}$, което води до следната оценка:

$$f(\mathbf{p})d\mathbf{p} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{n=0} Pr_n(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}, t) dt \simeq \frac{1}{T} \int_0^T \theta_{d\mathbf{p}}(\mathbf{p}(t)) dt, \quad (2.4)$$

където ако Ω е дадена област, нейният индикатор $\theta_\Omega(\mathbf{p})$ е равен на 1 ако $\mathbf{p} \in \Omega$ и е нула извън областта. В границата $N \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow \infty$) престава да зависи от избора на началното състояние $\mathbf{p}_0$. В следващите оценки тази граница се предполага имплицитно.

2.1.1.2 Средна стойност на A

Средната стойност $\langle A \rangle_\Omega$ на произволна физична величина в областта Ω се дава от интеграла (1.25) по тази област.

$$\langle A \rangle_\Omega = \int d\mathbf{p} A(\mathbf{p}) \theta_\Omega(\mathbf{p}) = \frac{1}{T} \int_0^T A(\mathbf{p}(t)) \theta_\Omega(\mathbf{p}(t)) dt . \quad (2.5)$$

Пресмятането на интеграла (2.5) за времето си е била трудоемка задача. Един алтернативен начин за оценка на $\langle A \rangle_\Omega$ е предложен от Р. Price [35]. След детайлни феноменологични разсъждения може да се покаже, че

$$\langle A \rangle_\Omega = \frac{\sum_i \lambda^{-1}(\mathbf{p}_{bi}) A(\mathbf{p}_{bi}) \theta_\Omega(\mathbf{p}_{bi})}{\sum_i \lambda^{-1}(\mathbf{p}_{bi})}; \quad p_{bi} = \mathbf{P}(t_i), \quad (2.6)$$

където t_i са моментите, в които настъпва разсейване, а p_{bi} са стойностите на импулса точно преди разсейване. За тази схема е достатъчно пресмятането на A в края на всеки дрейф и на съответната стойност на λ^{-1} , която и без това е необходима за избора на състоянието след разсейване.

2.1.1.3 Саморазсейване

Друга оптимизация на пресмятанията е направена при решаването на уравнението от стъпка 2: $W(t) = r$. Ако λ в интеграла (2.2) е константа решението е тривиално. Rees [36] използва този факт, за да въведе процеса на саморазсейване, като добавя към $\lambda(\mathbf{p})$ съответстващо на физичните процеси функцията $\lambda_{self}(\mathbf{p})$, такава че

$$\lambda(\mathbf{p}) + \lambda_{self}(\mathbf{p}) = const .$$

Саморазсейването е фиктивен процес, при които състоянието на електрона остава непроменено. Този алгоритъм е едно феноменологично преоткриване на техниката Монте Карло с отхвърляне, която се използва още от фон-Нойман и може да се проследи до зараждането на метода свързан с иглата на Бюфон [33].

2.1.1.4 Гранични условия

Следващата стъпка при развитието на метода е обобщаването му за нехомогенен транспорт на електроните. Въвеждането на пространствени координати поставя въпроса и за границите на областта на симулация. Полупроводниковите прибори се характеризират от смесен тип гранични условия. Вътре в прибора носителите се отразяват от границите, така че потока през тях е нула. В зависимост от повърхностите се прилагат огледален и дифузен тип модели на отражение. Целият ток тече през силно легираните контакти, които съдържат голямо количество носители, чието разпределение по импулси остава близко до равновесното. Характерно е, че граничните условия при контактите се моде-

лират индиректно, в смисъл че не се задават условия по границата, а заедно с прибора се симулират и областите на контактите, където физичните условия водят до състояние на равновесие (термализация) на симулирания носител. След термализацията носителът се инжектира обратно в областта на прибора. Един известен нехомогенен симулатор, използващ едночастична Монте Карло техника, разработен през осемдесетте години от Sangiorgi et al., е MOS2 [37]. Формален извод на условията, които позволяват директно третиране на граничните условия и спестяват симулацията в контактите, е предложен по-късно от Nedjalkov и Kosina [38].

В случая на симулация на шума на терминалния ток стандартният физичен модел на граничните условия има алтернативен модел, който позволява да се разглеждат много малки прибори без да настъпва корелация в шума между прибора и контакта, Nedjalkov et al. [39, 40]

2.1.2 Ансамблова техника

Ансамбловото описание на кинетиката на електроните е неизбежно при преходни процеси, свързани с определено начално условие, но може еднакво добре да се използва за стационарен транспорт, определен от гранични условия. В последния случай разликата с едночастичната техника е в необходимостта от симулация на един начален преходен период, в които процесите в системата да станат стационарни. Това описание се доближава максимално до феноменологията на класическия транспорт, като на ансамбъла симулирани частици съответства ансамбъл от реални електрони. Приложена за първи път от Phillips и Price [41], тази техника е най-популярна и в момента заради възможността за съгласувано решаване заедно с уравнението на Поасон, както и прилагане на модели на електрон-електронно разсейване.

В хомогенния случай на еволюция на едно начално условие електричното поле в уравнението за импулса в (1.17) вече може да зависи от времето. Алгори-

тъмът започва с едно начално разполагане на симулираните частици съгласно даденото начално условие f_0 .

- 1 Инициализират се случайни величини, отговарящи на състоянията (импулсите) на N електрона с начално разпределение $f_0(\mathbf{p}_0)$ в момент 0, на физичната величина A , чиято средна стойност търсим в дадена област Ω в момент T , както и стъпка по време Δt .
- 2 Ансамбълът частици се придвижва във времето на Δt . Построяването на траекторията става както в едночастичния случай, като дадена частица може да се разсее 0, 1, ... пъти. Последният дрейф се прекъсва в нужния момент, като оставащото време за свободен полет или се съхранява към електронното състояние, или при подновяване на еволюцията във следващата стъпка Δt се избира време за нов дрейф.
- 3 При достигане на момента T се изчислява

$$\langle A \rangle_{\Omega} = \frac{1}{N} \sum_n^N A(\mathbf{p}_n) \theta_{\Omega}(\mathbf{p}_n) dt . \quad (2.7)$$

В този случай синхронното придвижване на целия ансамбъл на стъпки Δt изглежда излишно, но това е основно изискване към техниката при самосъгласуване с уравнението на Поасон. Тогава се налага критерий за големината на Δt , която освен това трябва да е достатъчно малка, за да се смята полето константа в този интервал.

В термините на вероятностите $\{Pr_n\}$ функцията на разпределение може да се запише по следния начин:

$$f(\mathbf{p})d\mathbf{p} = \lim_{T \rightarrow \infty} \int f_0(\mathbf{p}_0) \sum_{n=0} Pr_n(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}_0 . \quad (2.8)$$

2.1.3 Техники за увеличаване на статистиката

В края на първото десетилетие на натрупване на опит в симулирането се установява необходимостта от техники, които увеличават статистиката в рядко посещаваните от траекторията области. Ако разделим условно фазовото пространство на две области R, S , то симулираната частица ще прекарва пропорционално повече време в тази, в която $\langle f \rangle_{R,S}$ има по-голяма стойност.

Идеята на Phillips и Price [42] е да се раздели една навлизаща в рядко посещаваната област R траектория на N части, всяка една участваща с тегло $1/N$ в процедурата на усредняване. По този начин статистиката в тази област се увеличава за сметка на ненужно дългите симулации в стандартната такава S . Тази техника бива усъвършенствана по-късно от Nedjalkov и Vitanov [43]. Те коригират една слабост на техниката, а именно че щастливото събитие на попадане в S , да не бъде очаквано да се случи по време на симулацията. За целта е показано, че е достатъчно познаването на функцията на разпределение по границата между R и S в област, която е по-голяма от най-голямата енергия, отдавана или отнемана от електрона при процесите на разсейване. От тази област започват траектории, които или попадат в S като увеличават статистиката там, или симулацията им бива спирана при навлизане в R . По такъв начин информацията за функцията на разпределение в R се увеличава на стъпки, като се избягва престоя в S .

В друга работа Nedjalkov и Vitanov [44] изследват възможността за преформулиране на едночастичната техника за случаите, когато една смяна на променливите може да доведе до опростяване на задачата и така до подобряване на симулационните времена.

Създаването на едночастичната и ансамбловата техники и дискутираните подобрения в техните алгоритми са най-доброто, до което може да достигне с феноменологични разсъждения.

Развитието на един по-формален подход започва с въпроса за математическата

връзка между горните техники и уравнението на Болцман. Търсенето на такава връзка върви успоредно с развитието на самите методи. Fawcett et al. [45] показват, че за да е валидно уравнението (2.4), необходимо условие е $\{Pr_n\}$ да удовлетворяват рекурсивната релация

$$Pr_n(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}, t) = \int_0^t e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(\tau)) d\tau} \int S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) Pr_{n-1}(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}', t') d\mathbf{p}' dt' . \quad (2.9)$$

На тази основа по-късно Vassarani et al. [46] показват, че едночастичната техника намира функцията на разпределение в нехомогенния случай. Reklaitis [47] показва, че ансамбловата техника води до решението на времезависимото уравнение на Болцман 'дори при наличие на саморазсейване', както пише в самия абстракт.

Алтернативният подход, при който първо се формулира уравнението на Болцман в една или друга форма и после се извеждат техники за решаването му, започва през 1985 година, когато Socha and Krumhansl [48] предлагат техниката интеграл по траекториите.

2.1.4 Интеграл по траекториите

Техниката се основава на формулировката на Чамберс [49] на хомогенното нестационарно уравнение на Болцман:

$$f(\mathbf{p}, t) = \int_{-\infty}^t \left\{ \lambda(\mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(\tau)) d\tau} \right\} \left\{ \int \frac{S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'))}{\lambda'(\mathbf{P}(t'))} \right\} \frac{\lambda'(\mathbf{P}(t'))}{\lambda(\mathbf{P}(t'))} f(\mathbf{p}', t') d\mathbf{p}' dt' , \quad (2.10)$$

където $\lambda'(\mathbf{p}') = \int S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') d\mathbf{p}$ и (2.10) е допълнен в съответствие с (1.49). Изводът на това уравнение ще бъде дискутиран малко по-нататък.

Съгласно (2.3) членът в първите скоби е вероятност за дрейф назад по траекторията, инициализирана от $\mathbf{p}, t$ до момент t' , с импулс $\mathbf{P}(t')$: по-нататък едно сравнение с (2.1) показва израза във вторите скоби като условна вероятност за разсейване от $\mathbf{P}(t')$ в $\mathbf{p}'$ в посока обратна на тази на физическите проце-

си. За правилната нормализация отговаря величината λ' , която се появява и в числителя на израза за случайната величина.

Съответната техника е в духа на Монте Карло метода за решаване на интеграл: интегралът (2.10) се решава като се избират N реализации, $t'_n, \mathbf{p}'_n$, даващи оценката:

$$f(\mathbf{p}, t) \simeq \frac{1}{N} \sum_n^N \frac{\lambda'(\mathbf{P}(t_n))}{\lambda(\mathbf{P}(t_n))} f(\mathbf{p}_n, t_n) .$$

Така тази техника изисква информация за решението в цялото пространство, във всички предишни моменти на еволюцията. Независимо от това Socha и Krumhansl правят първата стъпка в една нова посока, която въвежда формално числените методи в областта. Наистина предложената техника е в духа на Монте Карло метода за решаване на интеграл (1.49). За първи път се симулира директно функцията на разпределение, а не функционал от нея, като статистиката се контролира директно при симулацията.

Две години по-късно Nedjalkov и Vitanov [50] показват, че и двете феноменологични техники могат да се интерпретират от гледна точка на Монте Карло метода за решаване на интеграл. В основата е рекурсивната релация (2.9) и представянията (2.8) и (2.4). В частност едночастичната техника реализира случайната величина 'времето прекарано в обем от фазовото пространство', докато ансамбловата - 'точка от фазовото пространство, достигната в момент t' '.

2.1.5 Техника на обратната еволюция

Jacoboni et al. [51] разработват техниката на обратната еволюция, започвайки от уравнение (1.15), формулирано за еволюция на едно начално условие f_0 . След интегриране по времето в интервала $0, t$ по траектория, инициализирана от $\mathbf{p}, t$, се получава:

$$f(\mathbf{p}, t) = \int_0^t \left[\int d\mathbf{p}' S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) f(\mathbf{p}', t') - \lambda(\mathbf{P}(t')) f(\mathbf{P}(t'), t') \right] dt' + f_0(\mathbf{p}(0)) . \quad (2.11)$$

Итеративното заместване на уравнението в себе си води до представянето $f = \sum_k f^k$, където всеки член f_k представлява многомерен интеграл от вида:

$$\int_0^t dt_1 \int d\mathbf{p}_1 S(\mathbf{p}_1, \mathbf{P}(t_1)) \int_0^{t_1} dt_2 \int d\mathbf{p}_2 S(\mathbf{p}_2, \mathbf{P}_1(t_2)) \int_0^{t_2} dt_3 \lambda(\mathbf{P}_2(t_3)) \dots f_0(\mathbf{P}_k(0)) . \quad (2.12)$$

Подинтегралната функция в (2.12) въвежда последователност от точки, които може да се асоциират с последователност от събития както следва: $\mathbf{p}, t$ инициализира траектория, върху която назад във времето с помощта на плътността w_- се намира точката $\mathbf{P}(t_1)$, от която става обратно разсейване в точка $\mathbf{p}_1$. Последната заедно с t_1 инициализират траектория $\mathbf{P}_1(t_2)$ и т.н. Така $t \geq t_1 \geq \dots \geq 0$, като траекториите $\mathbf{P}_j$ се инициализират от $\mathbf{p}_j, t_j$ и тези събития могат да бъдат свързани с последователност от условни вероятности, предполагащи последователното прилагане на техниката интеграл по траектории. На пръв поглед за тази цел липсва вероятностна плътност за избор на времето, която трябва да се въведе допълнително и да се включи и към случайната величина. Авторите обаче забелязват, че сумата за f може да се преподреди, така че между два последователни члена S с времена t_j и t_l се появява сума от степени на λ , която възстановява експоненциалната функция: $\exp[-\int_{t_j}^{t_l} \lambda(\mathbf{P}_j(\tau) d\tau)]$. Тази функция може да се използва за избор на времето точно както при (2.10). Накрая за избор на оценявания член може да се използва Монте Карло метод за оценка на суми, за което $f = \sum_k f^k$ трябва да се прекъсне до краен брой членове. Остава отворен въпросът за избора на оптимални вероятности за селекция на отделните членове.

Техниката на обратната еволюция е сериозна стъпка напред, защото сега е достатъчно познаването на функцията на разпределение само в началния момент. Освен това вниманието се насочва към итеративното представяне на решението, което логично довежда до един подход, който постепенно обединява и обобщава съществуващите в областта алгоритми.

2.1.6 Итерационен подход

През 1988г. 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 [52] първо обобщават техниките за обратна еволюция и интеграл по траекториите, а след това в [53] и алгоритъма на ансамбловата техника. Систематичен представяне на тези техники и анализ на сходимостта е направено от Nedjalkov и Dimov в [54].

2.1.6.1 Техники с обратна еволюция

Техниките с обратна еволюция се получават като се подхожда с Монте Карло метода за решаване на интегрални уравнения (1.51) към едно представяне на уравнението на Болцман, използвано в детерминистичен подход [55]:

$$f(\mathbf{p}, t) = \int_0^t dt' \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} + f_0(\mathbf{P}(0)) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy}, \quad (2.13)$$

където траекторията е инициализирана от аргументите на функцията на разпределение в ляво: $P(t') = p - \int_{t'}^t \mathbf{F}(\tau) d\tau$. Интегралното представяне (2.13) ще бъде изведено в следващата секция за общия случай на нехомогенен транспорт. Веднага се вижда, че уравнението (2.10) се получава, ако началният момент се измести в $-\infty$, при което свободният член с началното условие отпада. Така ядрото на (2.13) може да се изрази чрез вероятностни плътности както в (2.10), които по-нататък да се използват за построяване на преходната плътност P :

$$P(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t') = \lambda(\mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(\tau)) d\tau} \frac{S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'))}{\lambda'(\mathbf{P}(t'))} + e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(\tau)) d\tau} \delta(t') \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{P}(0)). \quad (2.14)$$

Необходимата нормировка се проверява чрез директно интегриране по $\mathbf{p}'$ и по t' в интервала $t, 0$. Последователното прилагане на първата плътност $w_- S/\lambda'$

води до траектория, по която се оценява някой от членовете от техниката на обратната еволюция. Съгласно (2.12) и оптимизацията, дискутирана по-долу, този член завършва с експонента, асоциирана с втората плътност в (2.14), умножена с началното условие. Така прилагането на втората плътност бележи края на тази траектория и определя кой член от реда на Нойман се оценява. Как обаче да се избира едната от двете алтернативи в (2.14)? Отговор на този въпрос дава релацията

$$e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(\tau))d\tau} = \int_{-\infty}^0 \lambda(\mathbf{P}(t'))e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(\tau))d\tau} dt',$$

която удобно разделя събитията в интервала $t, -\infty$ на разсейване в положителни или отрицателни времена. В първия случай се избира първата вероятност и следва разсейване, а вторият гарантира свободен полет назад във времето до момент 0, с което симулирането на траекторията приключва. По принцип итеративното реализиране на преходната плътност дава оценка на последователните членове в реда на Нойман и така на f . Една особеност в случая е, че всяка реализирана траектория оценява един и само един член от реда на Нойман, изборът на който става с вероятност, която е елемент на ядрото на (2.13).

Стъпките на получения алгоритъм са както следва:

- 1 Инициализират се началните стойности на $\mathbf{p}$ и t , в които се оценява функцията на разпределение, броят на траекториите N и случайните величини $\mu = 0, \nu = 1$;
- 2 С помощта на вероятностната плътност w_- се генерира моментът на разсейване t' ;
- 3 ако $t' > 0$, се изчислява $\mathbf{P}(t')$, инициализирана от $\mathbf{p}, t$. С помощта на $S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'))/\lambda'(Pv(t'))$ се избира $\mathbf{p}'$. Умножава се ν с $\lambda'(Pv(t'))/\lambda(Pv(t'))$. Стойностите на $\mathbf{p}$ и t се актуализират на $(Pv(t')), t'$;
- 4 ако $t' \leq 0$, се изчислява $\mathbf{P}(0)$, инициализирана от $\mathbf{p}, t$, ν се умножава с $f_0(\mathbf{P}(0))$ и се прибавя към μ . $\mathbf{p}$ и t получават началните си стойности;

5 ако броят на траекториите е по малък от N , се отива на стъпка 2, иначе оценката за f се получава от μ/N .

2.1.6.2 Ансамблов алгоритъм

Извеждането на алгоритъма на ансамбловата техника описан в подсекция 2.1.2 започва от по-общата задача (1.54), която в конкретния случай се формулира като намиране средния брой електрони в една област Ω в даден момент време:

$$\langle f \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} f(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = \int_0^t dt' \int d\mathbf{p} f_0(\mathbf{p}_0) e^{-\int_0^{t'} \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} g(\mathbf{P}(t'), t'), \quad (2.15)$$

където $\mathbf{P}(\tau)$ е инициализирана от $\mathbf{p}_0, 0$, а във второто равенство може да се разпознае свободният член на (2.13).

Съответстващото на спрегнато (1.53) уравнение е

$$g(\mathbf{p}', t') = \int_{t'}^t d\tau \int d\mathbf{p} S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) e^{-\int_{t'}^{\tau} \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} g(\mathbf{P}(\tau), \tau) + \delta(t - t') \theta_{\Omega}(\mathbf{p}'), \quad (2.16)$$

където параметризацията на инициализираната от $\mathbf{p}, t'$ траектория $\mathbf{P}(\tau)$ е нормална, $\tau > t'$. Получаването на (2.16) и второто равенство в (2.15) ще бъде дискутирано за общия случай на нехомогенен транспорт по-нататък в тази глава.

Уравнението (2.16) може да се запише в разширен вид като се въведе фактор $\theta(t - \tau)$, а времето се продължи до ∞ . Една нормализация на компонентите на ядрото, отговарящи за дрейфа и разсейването, би довела на пръв поглед до един допълнителен фактор $(\lambda(\mathbf{p}')/\lambda(\mathbf{P}(\tau)))$. Този фактор обаче се съкращава на всяка следваща итерация, както се вижда например от израза за $\langle f \rangle_{\Omega,2}$, който може да се запише като:

$$\langle f \rangle_{\Omega,2}(t) = \int_0^{\infty} dt_0 \int_{t_0}^{\infty} dt_1 \int_{t_1}^{\infty} dt_2 \int d\mathbf{p}_0 \int d\mathbf{p}_1 \int d\mathbf{p}_2 \{f_0(\mathbf{p}_0)\}$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ e^{-\int_0^{t_0} \lambda(\mathbf{P}_0(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}_0(t_0)) \frac{S(\mathbf{P}_0(t_0), \mathbf{p}_1)}{\lambda(\mathbf{P}_0(t_0))} \right\} \\
& \left\{ e^{-\int_{t_0}^{t_1} \lambda(\mathbf{P}_1(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}_1(t_1)) \frac{S(\mathbf{P}_1(t_1), \mathbf{p}_2)}{\lambda(\mathbf{P}_1(t_1))} \right\} \\
& \left\{ e^{-\int_{t_1}^{t_2} \lambda(\mathbf{P}_2(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}_2(t_2)) \right\} \theta(t - t_1) \theta_\Omega(\mathbf{P}_2(t)) \theta(t_2 - t) . \quad (2.17)
\end{aligned}$$

Едно сравнение с (1.56) дава възможност да се идентифицират началната плътност като пропорционална на f_0 и преходната плътност като итеративния член във фигурните скоби, отговарящ на дрейф до момент t_{i-1} , последван от разсейване в ново състояние $\mathbf{p}_i$; $\mathbf{p}_i, t_{i-1}$ инициализират траекторията $\mathbf{P}_i(t_i)$ за следващия дрейф, като $i = 0, 1, 2$ и $t_{-1} = 0$. Последният член във фигурните скоби има същият вид, но е използвана нормировката

$$\int d\mathbf{p}_3 S(\mathbf{P}_2(t_2), \mathbf{p}_3) \lambda^{-1}(\mathbf{P}_2(t_2)) = 1$$

и това, че случайната величина не зависи от $\mathbf{p}_3$. Това е една демонстрация на принципа на причинност, тъй като моментът t_2 е по-късен от момента, в който се оценява $\langle f \rangle_{\Omega, 2}$. Наистина двете функции на Хевисайд в случайната величина в (2.17) подреждат времената $t_1 < t < t_2$, така че последното (второ) разсейване е преди времето t , а моментът на следващото разсейване (трето) е по-късен. Така може да се покаже, че една траектория оценява реда на Нойман за $\langle f \rangle_\Omega$, като дава принос от един и само един член. Ако началното условие f_0 отговаря на N електрона и се изберат N траектории, то една симулация, състояща се от избор с началната плътност и последователното прилагане на преходната плътност имитира физическата еволюция до момента t . Индикаторът θ_Ω е единица, ако симулираната траектория е в Ω в този момент и нула в противния случай. По такъв начин алгоритъмът, преброява електроните, които са в желаната област.

Избраните плътности напълно възстановяват ансамбловия алгоритъм, поради което се наричат естествени. Избор на алтернативни плътности би модифицирал случайната величина, чиито стойности няма да бъдат повече 1 или 0, а умножени по фактор наречен тегло, който се обновява на всяка итерация. Ансамблов алгоритъм с тегла е алтернативно предложен от Rota и Jacoboni [56] по същото време, по което и горният подход. Алтернативните плътности водят до модификация на естествения физически ход на явленията и така може да бъдат използвани за подобряване на статистиката, както се показва по-нататък.

Целта на тази секция беше да стигне по един естествен начин до идеята на итерационния подход, а именно да се намери интегралната форма на транспортното уравнение или неговото спрегнато, което после да бъде атакувано с методите изложени в подсекция 1.7. Преглед на дискутираните техники от гледна точка на итерационния подход е направен от Kosina и Nedjalkov [57]. В рамките на тази глава ще бъдат разгледани три следващи приложения на подхода: анализ на слаб сигнал, формален извод на едночастичната техника за задачи, определени от гранични условия, и обобщаване на нехомогенния ансамбловия алгоритъм с тегла за самосъгласувано решаване с уравнението на Поасон.

2.2 Алгоритми за анализ на слаб сигнал

Анализът на отклика на системата носители в един полупроводник към слаби промени в приложеното поле е една важна задача, която осигурява информация за параметри, необходими за моделиране на функционирането на приборите в дадена интегрална схема. Една 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 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 $A(\mathbf{p})$ ⁽²⁾, които ще осцилират със същата честота ω . Комплексната амплитуда $\langle A \rangle_1$ на осилациите около стационарната средна стойност $\langle A \rangle_s$ е линейна по $\mathbf{E}_1$:

$$\langle A \rangle_1(\omega) = K_A(\omega) \mathbf{E}_1 .$$

В съответствие, диференциалната функция на отклик K_A е градиентът на отклика $\langle A \rangle_1$ по отношение на $\mathbf{E}_1$. От конкретен интерес е тензорът на диференциалната подвижност $K_v = \mu(\omega)$ на отклика на скоростта

$$\langle \mathbf{v} \rangle_1(\omega) = \mu(\omega) \mathbf{E}_1 .$$

Анализът в термините на честоти може еквивалентно да се преформулира с помощта на Фурие трансформация в термините на време. Освен това 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 $\langle A \rangle_{im}(t)$ на един импулс във времето, както е доказано в Твърдение 2.2.1. Така намирането на отклика на системата носители към един импулс в електричното поле е основна задача на анализа

²такива като средната скорост или енергия

на параметрите на малък сигнал. Монте Карло симулации за такъв анализ са използвани още преди три десетилетия от Price [58]. 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.

2.2.1 Традиционни методи

2.2.1.1 Стационарни алгоритми

Стационарните алгоритми са изведени в рамките на теорията на корелационните функции от Reggiani et al [59]. Функциите на отклик се симулират директно по стационарни траектории. Тук ще бъдат представени два такива алгоритъма. (I) Едночастичен алгоритъм е предложен от Gruzinskis et al [60] при предположението, че $\mathbf{E}_s$ и $\mathbf{E}_1$ са колинеарни. Функцията на отклик се получава от разликата на средните по състояния преди и след разсейване по едночастичната траектория:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_1(t) &= K_A(t) E_1 \\ &= \frac{|\mathbf{E}_1|}{|\mathbf{E}_s|} \left(\frac{1}{T-t} \int_t^T \lambda(\mathbf{p}(t'-t)) A(\mathbf{p}(t')) dt' - \frac{1}{\tau M} \sum_{i=1}^M A(\mathbf{p}(t_i + t)) \right); \end{aligned} \quad (2.18)$$

T е времето на симулация, τ е средното време между две разсейвания, M е броят на събитията на разсейване, а t_i е времето на i -тото разсейване след момента t , и $\mathbf{p}(t')$ е импулсът в момент t' . Например ако $A = v_{E_1}$ е компонентата на скоростта, успоредна на $\mathbf{E}_1$, тогава $K_A(t) = \mu_{E_1}(t)$ е надлъжната диференциална подвижност. Очевидно случаят на нулево поле $\mathbf{E}_s = 0$ не може да се разглежда с (2.18).

За общ тъгъл между двете полета функцията на отклик се получава от директна симулация на градиента на функцията на разпределение по едночастичната траектория [61].

(II) Алгоритъмът, предложен от Price [58], е също стационарен, но многочастичен. Той позволява произволна ориентация на двете полета при изчисляването на тензора на диференциална подвижност. Ансамбъл от $2N$ частици се симулира до достигане на стационарното състояние. Тогава той се разделя на 2 еднакви части, наричани P (плюс) и M (минус) подансамбли. Компонентите на импулса на множеството P се преместват на Δp_α в посока на α оста, а тези от M - на $-\Delta p_\alpha$. Отчитането на времето се рестартира и симулацията продължава. Тензорът на диференциалната подвижност се получава от разликата на средните по двата подансамбъла.

$$\mu_{\beta\alpha}(t) = \frac{-q}{2\Delta p_\alpha} (\langle v_\beta \rangle_P(t) - \langle v_\beta \rangle_M(t)), \quad (2.19)$$

където v_β е компонентата на скоростта по ос β .

2.2.1.2 Времевазисими алгоритми

Прилагането на ансамблов подход е възможно благодарение на следната постановка. Първоначално системата носители е в стационарно състояние. След това в момент 0 към стационарното поле се прилага $\mathbf{E}_1$ и сумарното поле $\mathbf{E}$ става времевазисимо. Валидни са релациите:

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_s + \mathbf{E}_1(t), \quad f(\mathbf{p}, t) = f_s(\mathbf{p}) + f_1(\mathbf{p}, t), \quad (2.20)$$

които предполагат следното представяне на средната стойност на една физическа величина:

$$\langle A \rangle(t) = \langle A \rangle_s + \langle A \rangle_1(t) = \int A(\mathbf{p}) f_s(\mathbf{p}) d\mathbf{p} + \int A(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p}. \quad (2.21)$$

Стационарната функция на разпределение f_s се предполага нормализирана на 1: $\langle f_s \rangle = 1$. За да е валидно уравнението (2.21), е необходимо функцията на разпределение

$$\langle f \rangle = \langle (f_s + f_1) \rangle = 1 \quad (2.22)$$

да остава нормирана след прилагане на сигнала.

Такъв феноменологичен подход не може да реши директно проблема за случая, когато $\mathbf{E}_1(t)$ съответства на импулс във времето. Вместо това се разглежда стъпка във времето, давана от функция на Хевисайд: $\mathbf{E}_1(t) = \mathbf{E}_{\text{step}}\theta(t)$. Откликът към един импулс $\langle A \rangle_{\text{imp}}(t)$ се получава от производната по времето на $\langle A \rangle_{\text{step}}(t)$. Така случаят става физически прозрачен и може да се използва ансамбловият метод. Носителите се симулират под въздействието на полето $\mathbf{E}_s$ до достигане на стационарно състояние. След това полето внезапно се променя на $\mathbf{E}_s + \mathbf{E}_{\text{step}}$ и отчитането на времето се рестартира от момент 0. Функцията на отклик $\langle A \rangle_{\text{step}}(t)$ се получава от временната еволюция на средната по ансамбъл стойност на A . В този случай проверката на условието (2.22) е тривиална, защото основно свойство на хомогенното уравнение на Болцман е че броят на носителите не се променя при еволюцията.

Неудобно в този случаи е това, че при много малка стойност на $\mathbf{E}_{\text{step}}$ се получават големи статистически флуктуации в резултатите, а също така и необходимостта от изчисляване на производната по времето от тях [62].

Този проблем се избягва от разработеният от Vassiere [63] детерминистичен метод за решаване на линеаризираното транспортно уравнение за f_1 . Уравнението се получава от релациите (2.20) при предположението, че членовете с индекс 1 са много малки. След заместване в (1.15) се получават приближения, като това от нулев порядък е стационарното хомогенно уравнение на Болцман за членовете с индекс s . Ако се запазят пертурбационните членове от първи порядък, се получава линейно по отношение на $\mathbf{E}_1$ уравнение, което съдържа f_s от дясната страна.

$$\frac{\partial f_1(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + q\mathbf{E}_s \cdot \nabla f_1(\mathbf{p}, t) = \int S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f_1(\mathbf{p}') d\mathbf{p} - \lambda(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p}) - q\mathbf{E}_1(t) \cdot \nabla f_s(\mathbf{p}) . \quad (2.23)$$

Детерминистичният метод е разработен за физическия процес на еволюция след пертурбация - стъпка във времето. Понеже (2.23) е приближено уравнение, остава отворен въпросът за условието (2.22). Ще бъде показано, че прилагането

на итерационния подход към уравнение (2.23), позволява да се третира директно случаят на импулс във времето и в частност да се докаже (2.22) и да се изведат стационарните алгоритми I и II.

2.2.2 Итерационен метод

Теорема 2.2.1 *Решението на (2.23) 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 (2.22) се удовлетворява във всеки момент на еволюцията.

Доказателство: Наличието на δ -функция във времето в дясната част на (2.23) 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

$$\mathbf{P}(t') = \mathbf{p} - q\mathbf{E}_s(t - t')$$

с помощта на която лявата част на (2.23) може да се представи като пълен диференциал и уравнението добива вид, както и формално решение:

$$\left(\frac{d}{dt} + \lambda(t)\right)f(t) = g(t); \quad f(t) = \int_{t_0}^t g(t') e^{-\int_{t'}^t \lambda(y)dy} dt' + f(t_0) e^{-\int_{t_0}^t \lambda(y)dy}, \quad (2.24)$$

където $f(t_0)$ е началното условие в момент t_0 . В конкретния случай може да се използва факта, че при отрицателни времена условията са стационарни, $f_1 = 0$,

и да се избере $t_0 = 0$ -. В резултат се получава следното интегрално уравнение:

$$f_{\text{im}}(\mathbf{p}, t) = \int_0^t dt' \int d\mathbf{p}' f_{\text{im}}(\mathbf{p}', t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} + G(\mathbf{P}(0)) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy}; \quad (2.25)$$

където

$$G(\mathbf{p}) = -q\mathbf{E}_{\text{im}} \cdot \nabla f_s(\mathbf{p}). \quad (2.26)$$

Уравнение (2.25) формално прилича на (2.13) 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

$$f_{\text{im}}^{\pm}(\mathbf{p}, t) = \int_0^t dt' \int d\mathbf{p}' f_{\text{im}}^{\pm}(\mathbf{p}', t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} + G^{\pm}(\mathbf{P}(0)) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} \quad (2.27)$$

на Болцман с начални условия

$$f_{\text{im}}^{\pm}(\mathbf{p}, 0) = G^{\pm}(\mathbf{p}) \geq 0 \quad \text{като} \quad f_{\text{im}}(\mathbf{p}, t) = f_{\text{im}}^+(\mathbf{p}, t) - f_{\text{im}}^-(\mathbf{p}, t). \quad (2.28)$$

Функцията f_{im} има следните свойства: от (2.26) и теоремата на Гаус следва

$$\int G(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 0,$$

така че двете функции $f_{\text{im}}^{\pm}$ имат еднакви норми в началния момент $t = 0$. Тъй като уравнението на Болцман запазва нормировката,

$$\int f_{\text{im}}(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = 0 \quad \forall \quad t,$$

следва (2.22). ■

Представянето на $G = G^+ - G^-$ не е единствено, но при конкретния избор може да се постави допълнително условието за минимизиране на нормата на $f_{\text{im}}^{\pm}$ или да се изходи от други съображения за оптимизация.

Двете уравнения (2.27) са линейни по отношение на амплитудата на $\mathbf{E}_{\text{im}}$ и същото важи за функцията на отклик $\langle A \rangle_{\text{im}}(t)$. Поради линейността реакцията към произволно зависещо от времето поле може да се получи от тази за импулс чрез конволюция.

Тези резултати водят до следния физически модел [64, 65]. 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:

$$\langle A \rangle_{\text{im}}(t) = \langle A \rangle_P(t) - \langle A \rangle_M(t) . \quad (2.29)$$

За големи еволюционни времена двата ансамбъла релаксират към едно и също стационарно състояние, характеризирано от функцията на разпределение f_s ,

$$f_{\text{im}}^{\pm}(\mathbf{p}, t \rightarrow \infty) = C f_s(\mathbf{p}), \quad C = \int G^{\pm}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} . \quad (2.30)$$

Като следствие реакцията към импулса в полето клони към 0 за големи времена:

$$\langle A \rangle_{\text{im}}(t \rightarrow \infty) = 0.$$

За пълнота се доказва следното твърдение:

Твърдение 2.2.1 *Функцията f_1 , съответстваща на произволен времезависещ сигнал $\phi(t)$ модулиращ електричното поле, се получава като конволюция от f_{im} :*

$$f_1(\mathbf{p}, t) = \int_0^t dt_i \phi(t_i) f_{\text{im}}(\mathbf{p}, t - t_i) . \quad (2.31)$$

Разглежда се времезависим сигнал от вида

$$\mathbf{E}_1(t) = \mathbf{E}_1 \phi(t) \quad (2.32)$$

и реакцията в момент t , причинена от един импулс в момент t_i . Функцията f_{im} зависи от разликата във времето $t - t_i$: $f_{im}(\mathbf{p}, t - t_i)$. Уравнение (2.25) добива вид:

$$f_{im}(\mathbf{p}, t - t_i) = \int_{t_i}^t dt' \int d\mathbf{p}' f_{im}(\mathbf{p}', t' - t_i) S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} + (-q\mathbf{E}_1 \nabla f_s(\mathbf{P}(t_i)) e^{-\int_{t_i}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy}.$$

Следва умножение на $\phi(t_i)$, интегриране по t_i в интервала $(0, t)$ и въвеждане на функцията f_1 , определена от уравнение (2.31). След смяна на реда на интегриране по времето се получава:

$$f_1(\mathbf{p}, t) = \int_0^t dt' \int d\mathbf{p}' \left(\int_0^{t'} dt_i \phi(t_i) f_{im}(\mathbf{p}', t' - t_i) \theta(t' - t_i) \right) S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy} + \int_0^t dt_i - q\mathbf{E}_1(t_i) \cdot \nabla f_s(\mathbf{P}(t_i)) e^{-\int_{t_i}^t \lambda(\mathbf{P}(y)) dy}. \quad (2.33)$$

Съгласно (2.31), интегралът в скобите е $f_1(\mathbf{p}', t')$. Диференцирането по t възстановява уравнение (2.23). Следва, че ако се знае f_{im} , то решението f_1 на (2.23) в случай на сигнал от общ вид се дава от интеграла (2.31).

За да се обобщи случаят в който сигналът не остава успореден на себе си във времето, е достатъчно да се разгледат компонентите му по трите оси, които са от вида (2.32), и да се използва линейността на (2.33). ■

2.2.3 Монте Карло алгоритми

В зависимост от начина на представяне и на избора на декомпозиция на G може да бъдат изведени множество Монте Карло алгоритми. След формулирането на началните условия $G^\pm$, релаксационният процес може да бъде симулиран с помощта на ансамбловия метод.

2.2.3.1 Представяне с крайни разлики

Първата възможност е директно да се представи ∇f_s с помощта на крайни разлики, например централна разлика:

$$G(\mathbf{p}) \simeq -q|\mathbf{E}_{\text{im}}| \left(\frac{f_s(\mathbf{p} + \Delta\mathbf{p}_1) - f_s(\mathbf{p} - \Delta\mathbf{p}_1)}{2|\Delta\mathbf{p}_1|} \right). \quad (2.34)$$

Векторът $\Delta\mathbf{p}_1$ е колинеарен с $\mathbf{E}_{\text{im}}$, докато $\mathbf{E}_{\text{im}}$ и $\mathbf{E}_s$ могат да са произволно разположени. Двата члена в скобата се интерпретират като началните функции на разпределение $G^\pm$ на ансамблите P и M .

При това представяне изборът на $\Delta\mathbf{p}_1$ е деликатна задача. Малките стойности осигуряват линейност на проблема, но могат да доведат до прекалено близки стойности за разпределенията $G^\pm$ и съответно до висока статистическа грешка на разликата близки величини.

Алгоритъм 2.2.1 *Първата задача на симулацията е да определи едно множество от N стойности на $\mathbf{p}$, разпределени съгласно с $f_s(\mathbf{p})$. Това може да се постигне с ансамбловия метод, при който се симулира достигането на стационарно състояние на ансамбъл от N частици. След това изместването на състоянията $\mathbf{p}$ на $\Delta\mathbf{p}_1$ (на $-\Delta\mathbf{p}_1$) дава началните точки за траекториите на P (на M) частиците в $t = 0$. Функцията на отклик на величина A се дава от (2.29), умножена с $-q|\mathbf{E}_{\text{im}}|/(2|\Delta\mathbf{p}_1|)$. Този алгоритъм обобщава подхода на Price [58] формулиран в стационарен алгоритъм II от подсекция 2.2.1.1 за случая на произволни физични величини A .*

Алгоритъм 2.2.2 *Този алгоритъм използва факта, че стойностите на импулса $\mathbf{p}_j = \mathbf{P}(t_j)$, оценявани на равни интервали време $t_j = j\Delta t$ по траекторията на една частица $\mathbf{P}(t)$, движеща се в постоянно поле, имат разпределение f_s . Това следва от еквивалентността между средните по време и по ансамбъл в стационарно състояние. Благодарение на това симулацията може да бъде извършена в рамките на едночастичен метод. В момент t_j еволюцията на*

едночастичната траектория се прекъсва. Моментното състояние $\mathbf{p}$ определя началната точка на една P траектория като $\mathbf{p} + \Delta\mathbf{p}_1$ и на една M траектория като $\mathbf{p} - \Delta\mathbf{p}_1$. P и M траекториите се симулират за интервал от време T и като се отразява техния принос към функцията на отклик. След това едночастичната траектория се продължава за следващия интервал Δt и процедурата се повтаря. Основните стъпки са:

- 1) Симулира се главната траектория в интервал Δt , за да се определи състоянието $\mathbf{p}$ в края на интервала;
- 2) Инициализират се траектории $\mathbf{P}^+(t)$ с $\mathbf{p} + \Delta\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{P}^-(t)$ с $\mathbf{p} - \Delta\mathbf{p}_1$;
- 3) Двете траектории се симулират за време T . През равни интервали време t_i се прибавя $A(\mathbf{P}^+(t_i))$ към величината ν_i^+ и $A(\mathbf{P}^-(t_i))$ към величината ν_i^- ;
- 4) Продължава се от стъпка 1 до генериране на N броя точки $\mathbf{p}$;
- 5) Функцията на отклик се получава в дискретни по време стойности като:

$$\langle A \rangle_{\text{im}}(t_i) = \frac{-q|\mathbf{E}_{\text{im}}|}{2N|\Delta\mathbf{p}_1|}(\nu_i^+ - \nu_i^-).$$

2.2.3.2 Колинеарни пертурбации

В случаите, когато полетата $\mathbf{E}_s$ и $\mathbf{E}_{\text{im}}$ са успоредни, може да се използва стационарното уравнение на Болцман, за да се изрази градиентът на функцията на разпределение чрез дясната част на уравнението, което води до едно естествено разделяне на G на две положителни функции

$$G(\mathbf{p}) = \frac{E_{\text{im}}}{E_s} \left(\lambda(\mathbf{p}) f_s(\mathbf{p}) - \int f_s(\mathbf{p}') S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) d\mathbf{p}' \right). \quad (2.35)$$

Алгоритъм 2.2.3 Съгласно (2.35) началните разпределения се избират като:

$$G^+(\mathbf{p}) = \frac{E_{\text{im}}}{E_s} \lambda(\mathbf{p}) \{f_s(\mathbf{p})\}; \quad G^-(\mathbf{p}') = \frac{E_{\text{im}}}{E_s} \int \{f_s(\mathbf{p})\} \left\{ \frac{S(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\lambda(\mathbf{p})} \right\} \lambda(\mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (2.36)$$

Двата члена съдържат f_s като вероятностна плътност, така че състоянието $\mathbf{p}$ могат да бъдат генерирани както в Алгоритъм 2.2.2. Освен това в G^- се появява плътността $\lambda^{-1}S$ за избиране на състоянието след разсейване $\mathbf{p}'$ по зададено състояние преди разсейване $\mathbf{p}$. Това води до следния алгоритъм:

- 1) Симулира се основната траектория за интервал Δt . Определя се състоянието $\mathbf{p}$ в края на този интервал, както и теглото $\lambda(\mathbf{p})$;
- 2) Реализира се разсейване от $\mathbf{p}$ в $\mathbf{p}'$;
- 3) Симулира се време T една траектория $\mathbf{P}^+(t)$, започваща от $\mathbf{p}$ (която може да съвпада с главната траектория и това се използва за оптимизация) и друга траектория $\mathbf{P}^-(t)$, започваща от $\mathbf{k}'$;
- 3) През равни интервали време t_i се прибавя $\lambda(\mathbf{p})A(\mathbf{P}^+(t_i))$ към величината ν_i^+ и $\lambda(\mathbf{p})A(\mathbf{P}^-(t_i))$ към величината ν_i^- ;
- 4) Продължава се от стъпка 1 до генериране на N броя точки $\mathbf{p}$;
- 5) Функцията на отклик се получава в дискретни по време стойности като:

$$\langle A \rangle_{\text{im}}(t_i) = \frac{E_{\text{im}}}{NE_s} (\nu_i^+ - \nu_i^-).$$

Алгоритъм 2.2.4 Началните разпределения се преформулират както следва:

$$G^+(\mathbf{k}) = \frac{E_{\text{im}}}{E_s} \langle \lambda \rangle_s \left\{ \frac{\lambda(\mathbf{k}) f_s(\mathbf{k})}{\langle \lambda \rangle_s} \right\}, \quad (2.37)$$

$$G^-(\mathbf{k}') = \frac{E_{\text{im}}}{E_s} \langle \lambda \rangle_s \int \left\{ \frac{\lambda(\mathbf{k}) f_s(\mathbf{k})}{\langle \lambda \rangle_s} \right\} \left\{ \frac{S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\lambda(\mathbf{k})} \right\} d\mathbf{k},$$

където членът

$$\langle \lambda \rangle_s = \int f_s(\mathbf{k}) \lambda(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$$

в знаменателите осигурява нормализацията. С помощта на техниката за усредняване по състоянията преди разсейване (2.6) може да се покаже, че $\langle \lambda \rangle_s$ е обратно на средното време на свободен полет. Вероятностната плътност $\lambda f_s / \langle \lambda \rangle_s$ е нормираната плътност на състоянията преди разсейване. Следователно произведението от двете плътности във втория член на (2.37) е нормираната функция на разпределение на състоянията след разсейване. Това води до следния алгоритъм:

- 1) Главната траектория се симулира до намирането на състоянието преди разсейване $\mathbf{p}_b$, от което след разсейване се получава и състоянието $\mathbf{p}_a$;
- 2) За интервал време T се симулират траекторията $\mathbf{P}^+(t)$, започваща от $\mathbf{p}_b$, и траекторията $\mathbf{P}^-(t)$, започваща от $\mathbf{p}_a$;
- 3) През равни интервали време t_i се прибавя $A(\mathbf{P}^+(t_i))$ към величината ν_i^+ и $A(\mathbf{P}^-(t_i))$ към величината ν_i^- ;
- 4) Продължава се от стъпка 1 до генериране на N броя точки $\mathbf{p}$;
- 5) Функцията на отклик се получава в дискретни по време стойности като:

$$\langle A \rangle_{\text{im}}(t_i) = \frac{E_{\text{im}} \langle \lambda \rangle_s}{N E_s} (\nu_i^+ - \nu_i^-) .$$

Средното време на свободен полет трябва да се изчислява допълнително по време на симулацията.

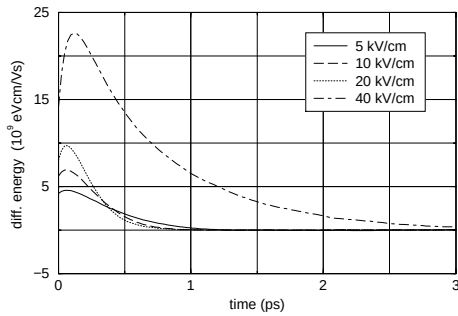
Този алгоритъм демонстрира по прозрачен начин еволюцията на ансамблите $\mathbf{P}$ и $\mathbf{M}$, както и генерацията на техните начални състояния.

Алгоритми 3 и 4 могат да бъдат комбинирани, за да се получи едночастичен еквивалент на алгоритъма II. Наистина, първо се вижда, че траекториите $\mathbf{P}^-$

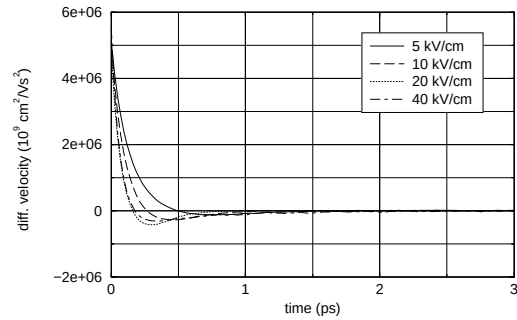
могат да се проектират върху главната траектория и не е необходимо да бъдат симуирани самостоятелно. Този факт води до втория член в дясно на (2.18). Пак там интегралът по време е еквивалентен на усредняването по ансамбъла P в алгоритъм 3. Настоящият подход показва, че интервалът на усредняване $(T - t)$ в (2.18) трябва да бъде заместен с константа, T' , чиято стойност е достатъчно голяма да хване целия процес на релаксация.

2.2.4 Симулационни резултати

Ще бъдат показани някои симулационни резултати, получени с помощта на Алгоритъм 4. Детайли за физичните модели са коментирани в съответните публикации и няма да бъдат излагани тук. Само ще бъде илюстрирано как симулациите дават стойности на важни физични параметри, а също и позволяват анализ на интересни физични явления.



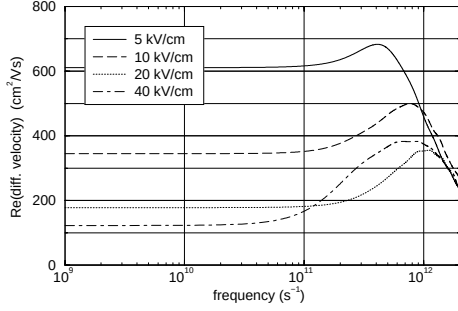
Фигура 2.1: Диференциална енергия



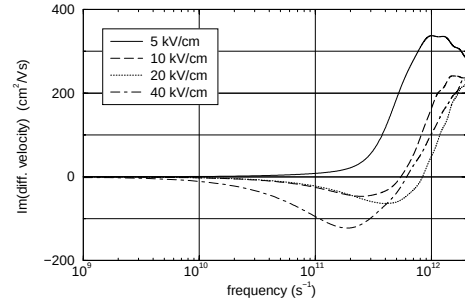
Фигура 2.2: диференциална скорост

Фигури (2.1) и (2.2) показват като функция на времето на диференциалната енергия $\partial\langle\epsilon\rangle_{\text{im}}/\partial E_{\text{im}}$ и надлъжната диференциална скорост $\partial\langle v\rangle_{\text{im}}/\partial E_{\text{im}}$ за различни стойности на стационарното поле в силиций при температура $T = 300K$. В съгласие с дискутираните свойства на модела, (2.29), характеристиките на отклик клонят към нула, когато двата ансамбъла релаксират към стационарното състояние. Характеристичното време, свързано с релаксационния процес,

а именно това на импулса τ_m , определено намалява с нарастването на полето, Фиг. (2.2). Това поведение е в съответствие с наблюдаваното намаляване на подвижността на електроните $\mu = e\tau_m/m^*$ с увеличаването на полето.



Фигура 2.3: Реална част на диференциалната скорост

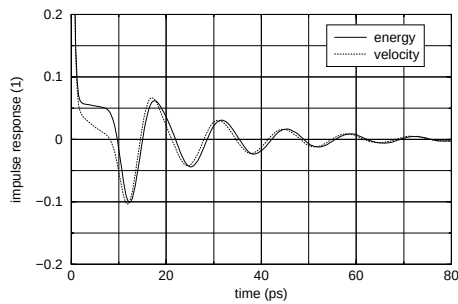


Фигура 2.4: Имагинерна част на диференциалната скорост

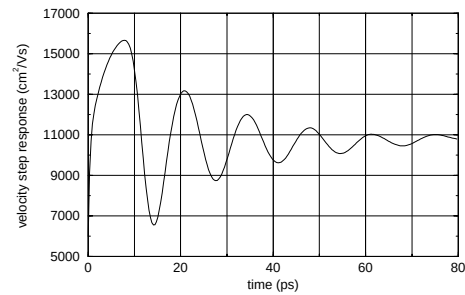
Фигури (2.3) и (2.4) показват честотната зависимост на диференциалната скорост чрез Фурие трансформация. Имагинерната част клони към нула при ниски честоти, което показва, че времето за симулация T е достатъчно голямо, за да хване процеса на релаксация, докато реалната част клони към съответните стационарни стойности на диференциалната подвижност $\partial\langle v \rangle_s / \partial E_s$.

Интересно явление може да се наблюдава при избор на ниски температури и полета в галиев арсенид.

Фигура (2.5) показва диференциалните скорост и енергия, нормализирани на съответните начални стойности при $T = 10K$ и $E_s = 120V/cm$. Характерните бавнозатихващи осцилации се запазват и след интегриране по времето: Фиг. (2.6) показва функцията на чувствителност на диференциалната скорост към пертурбация, дължаща се на стъпка в полето. Демонстрираната независимост на осцилационната картина от конкретната физична величина води до заключението, че явлението е свързано с динамиката на носителите и се появява в средните величини чрез функцията на разпределение. Явлението се



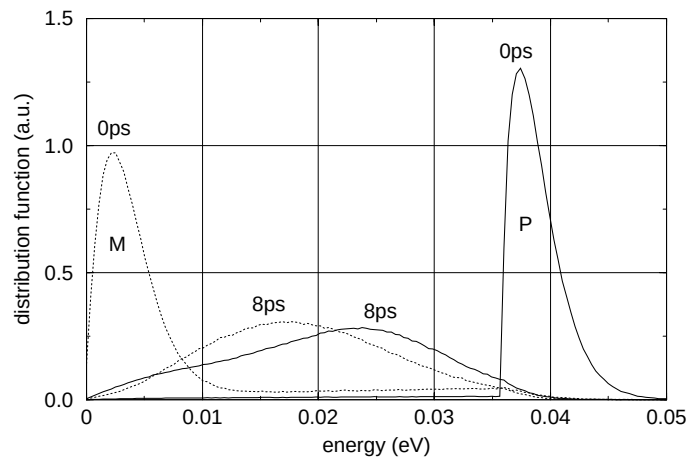
Фигура 2.5: TTR ефект - импулс в полето



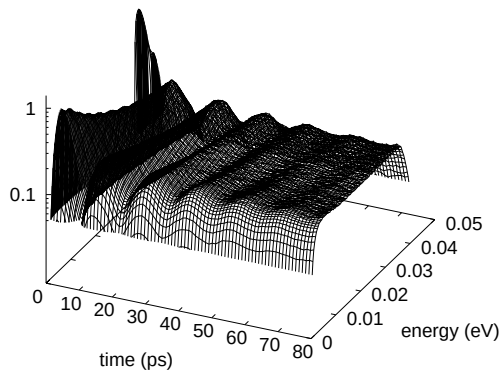
Фигура 2.6: TTR ефект - стъпка в полето

нарича TTR ³ ефект [66] 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 енергийния 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. Симулациите ясно илюстрират това явление, ако се разгледа разпределението по енергии на носителите: Фигура (2.7) показва началните пикове на М и Р ансамблите. Еволюцията на М ансамбъла, който първоначално е образуван от електрони с ниска енергия, се характеризира от ускоряване от електричното поле в посока на фононния енергиен праг. Р ансамбълът, който в $t = 0$ е над фононния праг от 0.036 eV, бързо, за около 2 пикосекунди се прехвърля в областта на ниски енергии в резултат на емисията на полярни оптични фонони. Фигури (2.8) и (2.9) показват индивидуалната еволюция на двата ансамбъла. Първоначалните пикове се разширяват, като стационарно състояние се достига след около 80 пикосекунди. Двата ансамбъла имат еднаква еволюция, само че с известно закъснение един спрямо друг. Това се вижда от Фиг. (2.7), където двете функции

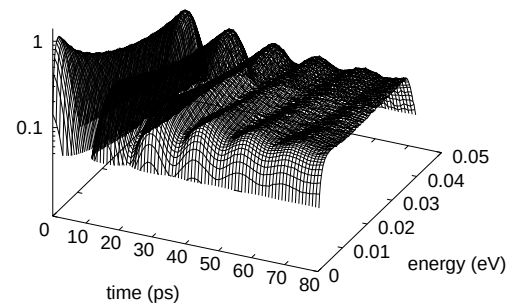
³Transit Time Resonance



Фигура 2.7: Разпределение по енергии на двата ансамбъла при 0 и 8 пикосекунди



Фигура 2.8: Еволюция на Р ансамбъла



Фигура 2.9: Еволюция на М ансамбъла

на разпределение са показани след 8 пикосекунди еволюция. Точно това закъснение причинява осцилациите на физичните величини $\langle A \rangle_{\text{im}}(t)$. Симулационни експерименти показват, че ако двете разпределения се синхронизират в даден момент, то в по нататъшни времена осцилации във физическите средни не се

наблюдават.

2.2.5 Условия, близки до равновесните

Тук са представени две обобщения на подхода за важния за практиката случай на транспорт в условия, близки до равновесните, при които полета и макропотоци клонят към нула. Тъй като се следват вече изложените по-горе принципи тези обобщения са само резюмирани, като детайлите може да бъдат намерени в цитираната литература.

Подвижността на носителите в условия на клонящо към нула стационарно поле е важен параметър, характеризиращ линейния режим на транспорт, описван от закона на Ом: в хомогенен случай това определя коефициента на пропорционалност между полето и тока. В този случай подвижността не може да бъде определена от средната скорост, която също клони към нула. Префакторът в изразите (2.36) и (2.37) също стават сингулярен при $\mathbf{E}_s \rightarrow 0$ което прави невъзможно директното им прилагане. Един алгоритъм за този случай е изведен от Kosina и Nedjalkov [67] които използват факта че равновесната функция на разпределение (1.16) е позната аналитично и може да се използва в (2.26):

$$G(\mathbf{p}) = \frac{q\mathbf{E}_{\text{im}} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{p})}{k_B T} f_{MB}(\mathbf{p}) = \frac{q\mathbf{E}_{\text{im}} \langle \lambda \rangle_s}{k_B T} \cdot \frac{\mathbf{v}(\mathbf{p})}{\lambda(\mathbf{p})} \frac{\lambda(\mathbf{p}) f_{MB}(\mathbf{p})}{\langle \lambda \rangle_s}. \quad (2.38)$$

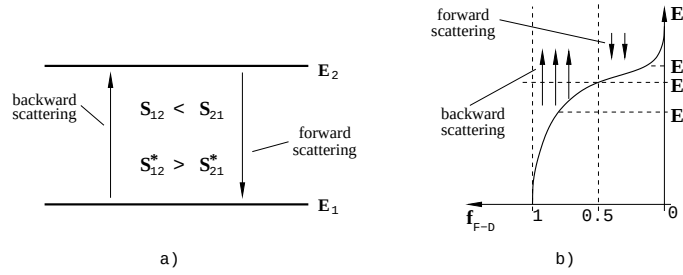
Алгоритъм 2.2.5 За определяне отклика на една физична величина A :

- 1) Симулира се главната траектория, за да се определи състоянието $\mathbf{p}$ точно преди разсейване;
- 2) Изчислява се теглото $w = \frac{v_{\text{im}}(\mathbf{p})}{\lambda(\mathbf{p})}$, където v_{im} е компонентата на скоростта по $\mathbf{E}_{\text{im}}$;
- 3) Друга траектория, започваща от $\mathbf{p}$ се симулира за време T . През равни интервали време t_i се прибавя $wA(\mathbf{P}(t_i))$ към величината v_i ;

- 4) Продължава се от стъпка 1 до генериране на N броя точки $\mathbf{p}$;
- 5) Функцията на отклик се получава в дискретни по време стойности като:

$$\langle A \rangle_{\text{im}}(t_i) = \frac{q|\mathbf{E}_{\text{im}}|}{k_B T} \frac{\nu_i}{N}.$$

В частност се получава алгоритъм за пресмятане на тензора на подвижност на равновесни носители, който е обобщен от алгоритъм (2.2.6) по-долу. При слаби полета един от доминиращите механизми на разсейване, който определя подвижността, е този от легиращи примеси. Алгоритъмът е приложен за получаване на зависимостта на подвижността от концентрацията на такива примеси. Тази зависимост служи за калибрация на модела на Ridley за подвижността, използван в симулатора MINIMOS [67].



Фигура 2.10: При високи енергии $f_{FD} \simeq f_{MB}$ и преобладава разсейване $2 \rightarrow 1$. Алтернативно състоянието 1 е заето от електрони и принципът на Паули разрешава само обратно разсейване.

Високата степен на легиране води до такива концентрации на носителите, че става необходимо да се отчита фермионният характер на електроните формулиран от принципа на Паули. Уравнението на Болцман става нелинейно, а равновесната функция на разпределение - тази на Ферми-Дирак $f_{FD}(\epsilon)$. Задачата за обобщаване на подхода в този случай е решена от Smirnov et al [68]. Изведено е съответстващо на (2.25) уравнение, в което S и λ в ядрото се модифицират

от стационарната функция на разпределение както следва:

$$\tilde{S}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = (1 - f_s(\mathbf{p}'))S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') + f_s(\mathbf{p}')S(\mathbf{p}', \mathbf{p}), \quad \tilde{\lambda}(\mathbf{p}) = \int \tilde{S}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')d\mathbf{p}' . \quad (2.39)$$

При слаби полета $f_s = f_{FD}$, като може да се покаже, че

$$\tilde{\lambda}(\mathbf{p}) = (1 - f_{FD}(\epsilon_f))\lambda(\mathbf{p}) + f_{FD}(\epsilon_f)\lambda'(\mathbf{p}), \quad (2.40)$$

където λ' е сумарната вероятност за обратно разсейване, въведена в (2.10), а ϵ_f е енергията на крайното състояние. Следва, че за ниски концентрации на носителите:

$$f_{FD} \simeq 0; \quad \tilde{\lambda}(\mathbf{p}) = \lambda(\mathbf{p})$$

и разсейването следва стандартния ход, докато при изроден полупроводник,

$$f_{FD} \simeq 1; \quad \tilde{\lambda}(\mathbf{p}) = \lambda(\mathbf{p})' .$$

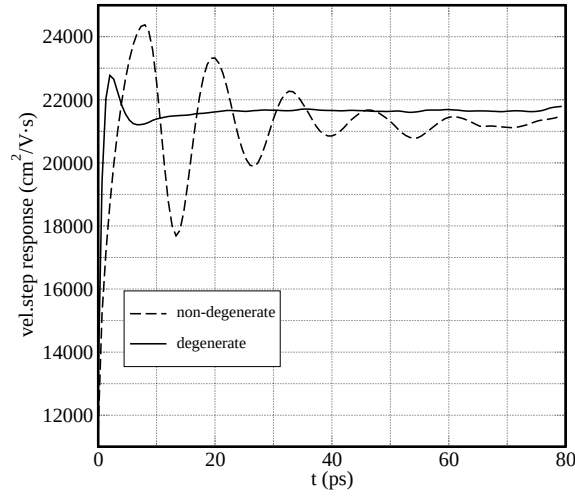
и разсейването е в обратна посока. Така, ако стандартното разсейване е от по-високи към по-ниски енергии, при изроден полупроводник разсейването е в обратна посока. За Фиг. (2.10) важат следните условия

$$f_{FD}(\epsilon_1) \simeq 1; \quad f_{FD}(\epsilon_1) \gg f_{FD}(\epsilon_2) \simeq 0$$

Така състоянието 1 е заето от електрони, което според принципа на Паули блокира появяването на нов електрон там. Остава възможно само разсейването от 1 към незаетото състояние 2, което има по-малка вероятност $S_{1 \rightarrow 2}$.

Извежда се алгоритъм, чиито основни стъпки изглеждат като в неизродения случай, с изключение на това, че цялата кинетика сега се управлява от $\tilde{S}$ и $\tilde{\lambda}$ вместо S и λ . Освен това се използва факта, че в равновесие състоянията преди и след разсейване са еднакво разпределени, така че изборът между тях е случаен. По такъв начин вторичната траектория може да се проектира върху главната траектория.

Алгоритъм 2.2.6 *Основните стъпки за изчисляване на тензора на подвижност за произволно изроден полупроводник са:*



Фигура 2.11: TTR ефект с включване и изключване на принципа на Паули.

- 1) Инициализират се две величини $\nu = 0$, $w = 0$;
- 2) Началното състояние за траекторията $\mathbf{p}$ се избира случайно между състоянията преди или след разсейване;
- 3) Акумулира се теглото

$$w = w + (1 - f_{FD}(\epsilon(\mathbf{p}))) \frac{v_j(\mathbf{p})}{\tilde{\lambda}(\mathbf{p})};$$

- 4) Избира се време на свободен полет $\tilde{t} = -\ln(r)/\tilde{\lambda}(\mathbf{p})$ и величината ν се актуализира: $\nu = \nu + w\nu_i\tilde{t}$;
- 5) Осъществява се разсейване. Ако механизмът е изотропен, се полага $w = 0$;
- 6) Продължава се от стъпка 1 до генериране на N броя точки $\mathbf{p}$;
- 7) Компонентата на тензора на подвижност при нулево поле се получава от:

$$\mu_{ij} = \frac{q\langle\tilde{\lambda}\rangle_{FD}\nu}{k_B T N}.$$

Фигура (2.11) показва колко значителна може да е ролята на принципа на Паули. Физичните условия са както следва: $T = 25K$ и $E_s = 120V/cm$, $n = 10^{18}cm^{-3}$. В изродения полупроводник TTR ефектът практически отсъства. Може да се покаже че това е в резултат на блокирането на нивата с ниски енергии, функциите на разпределение на Р и М ансамблите стават много близки след първите няколко пикосекунди на еволюцията.

2.3 Нехомогенни едночастични алгоритми

Основните алгоритми на едночастичната техника и в частност двата метода за намиране на средни стойности (2.5) и (2.6) ще бъдат теоретично обосновани с помощта на итерационния подход.

Разглеждаме задачата за намиране на функционал от решението на стационарното нехомогенно уравнение на Болцман

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{p}_1 S(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}, \mathbf{r}) f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}) - \lambda(\mathbf{p}, \mathbf{r}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) . \quad (2.41)$$

Решението се определя от условия, по границата на областта, която за разглеждания общ 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.

2.3.1 Стационарни условия

От стационарността на условията следват важни свойства както на траекториите, така и на самото уравнение, които ще бъдат формулирани в следните две твърдения.

Твърдение 2.3.1 *Стационарните траектории са инвариантни по отношение на смяна на началото на отчитане на времето:*

$$\mathbf{P}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{P}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \quad \mathbf{R}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{R}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) . \quad (2.42)$$

Отместването на началото на времето с τ се записва с помощта на (1.17) както следва:

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{P}}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \mathbf{p} - \int_{t_1 + \tau}^{t + \tau} \mathbf{F}(\widehat{\mathbf{R}}(y; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) dy, \\ \widehat{\mathbf{R}}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \mathbf{r} - \int_{t_1 + \tau}^{t + \tau} \mathbf{v}(\widehat{\mathbf{P}}(y; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) dy.\end{aligned}$$

Смяна на променливите съгласно с $y_1 = y - \tau$ води до:

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{P}}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \mathbf{p} - \int_{t_1}^t \mathbf{F}(\widehat{\mathbf{R}}(y_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) dy_1, \\ \widehat{\mathbf{R}}(t_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \mathbf{r} - \int_{t_1}^t \mathbf{v}(\widehat{\mathbf{P}}(y_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) dy_1.\end{aligned}$$

Функциите $\widehat{\mathbf{P}}$ и $\widehat{\mathbf{R}}$ удовлетворяват уравнения на Нютон

$$\frac{d\widehat{\mathbf{P}}(t_1)}{dt_1} = \mathbf{F}(\widehat{\mathbf{R}}(t_1)), \quad \frac{d\widehat{\mathbf{R}}(t_1)}{dt_1} = \mathbf{v}(\widehat{\mathbf{P}}(t_1)).$$

които имат еднаква инициализация: $\widehat{\mathbf{P}}(t) = \mathbf{p}$, $\widehat{\mathbf{R}}(t) = \mathbf{r}$ с решенията на (1.17). Поради единствеността на решенията на уравнения на Нютон следва (2.42). Трябва да се отбележи, че съществен за доказателството е фактът че силата не зависи явно от времето. ■

Твърдение 2.3.2 *Стационарното уравнение на Болцман е инвариантно по отношение избора на началото на отчитане на времето.*

Избира се точка $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ от симулационната област и произволен момент t , които се използват за обратна инициализация на дадена траектория във фазовото пространство. Подходът, използван за представянето (2.24), директно се обобщава за нехомогенната формулировка на задачата. В случая обаче избираме за долна граница на интегриране не фиксирано време t_0 , а времето $t_b(t, \mathbf{p}, \mathbf{r})$, в което

траекторията пресича границата на областта. Всеки момент t' , $t > t' > t_b$, определя една единствена точка по траекторията, за която времето на пресичане на границата на областта е t_b . Интегралната форма на уравнението може да се запише за тези точки по общ начин:

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{P}(t'; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{R}(t'; t, \mathbf{p}, \mathbf{r})) &= \int_{t_b(t, \mathbf{p}, \mathbf{r})}^t dt_1 \int d\mathbf{p}' \\
 &\quad f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r})) S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) \mathbf{R}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r})) e^{-\int_{t_1}^{t'} dy \lambda(\mathbf{R}(y; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(y; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}))} + \\
 &\quad + e^{-\int_{t_b}^{t'} dy \lambda(\mathbf{R}(y; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(y; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}))} f_b(\mathbf{R}(t_b; t, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(t_b; t, \mathbf{p}, \mathbf{r})), \quad (2.43)
 \end{aligned}$$

като f_b е функцията на разпределение в граничната точка, за която се предполага че е известна.

Алтернативно, диференцирането на уравнението по t' , полагането $t = t'$ и използването на релациите (1.18) води до интегро-диференциалната формулировка (2.41).

Сега предполагаваме отместване на началото на отчитане на времето с τ . Уравнение (2.43), записано за $t' = t$ в новото време, изглежда така:

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \int_{t_b(t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})}^{t+\tau} dt_1 \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t_1; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) \\
 &\quad \times S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t_1; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) \mathbf{R}(t_1; t, \mathbf{p}, \mathbf{r})) e^{-\int_{t_1}^{t+\tau} dy \lambda(\mathbf{R}(y; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(y; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}))} \\
 &\quad + e^{-\int_{t_b(t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})}^{t+\tau} dy \lambda(\mathbf{R}(y; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(y; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}))} f_b(\mathbf{R}(t_b; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(t_b; t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})).
 \end{aligned}$$

От (2.42) следва

$$t_b(t+\tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = t_b(t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) + \tau.$$

Смяната $t'_1 = t_1 - \tau$ води до:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \int_{t_b(t, \mathbf{p}, \mathbf{r})}^t dt'_1 \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t'_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) \times \\ \times \exp \left(- \int_{t'_1 + \tau}^{t + \tau} dy \lambda(\mathbf{R}(y; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(y; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) \right) \\ \times S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{R}(t'_1 + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) \exp \left(- \int_{t_b + \tau}^{t + \tau} dy \lambda(\mathbf{R}(y; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(y; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) \right) \\ \times f_b(\mathbf{R}(t_b + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r}), \mathbf{P}(t_b + \tau; t + \tau, \mathbf{p}, \mathbf{r})) .$$

Сега интегралите в експонентите имат подходящи за смяната $y' = y - \tau$ граници. След нейното извършване временните аргументи на всички траектории се оказват увеличени с τ . С помощта на (2.42) се възстановява (2.43) при условие $t' = t$. ■

Удобно е времето за инициализацията на всички траектории да се приеме за 0:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \int_{t_b(\mathbf{p}, \mathbf{r})}^0 dt_1 \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t_1)) S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t_1), \mathbf{R}(t_1)) \exp \left(- \int_{t_1}^0 dy \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) \right) \\ + \exp \left(- \int_{t_b(\mathbf{p}, \mathbf{r})}^0 dy \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) \right) f_b(\mathbf{P}(t_b(\mathbf{p}, \mathbf{r})), \mathbf{R}(t_b(\mathbf{p}, \mathbf{r}))) . \quad (2.44)$$

2.3.2 Итерационен извод на едночастични алгоритми

Задачата за намиране на функционал от решението (1.53) в конкретния случай е средната стойност на функцията на разпределение в област Ω :

$$f_\Omega = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \theta_\Omega(\mathbf{p}', \mathbf{r}'), \quad (2.45)$$

където интегрирането е в шестмерното фазово пространство. Съгласно с (1.54) задачата може да се преформулира с помощта на спрегнатото уравнение (1.53).

2.3.2.1 Спрегнатото уравнение

Теорема 2.3.1 Уравнението, спрегнато на (2.44) и съответстващо на (2.45), е:

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') = \int_0^\infty d\tau \int d\mathbf{p}_a S(\mathbf{p}', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}') e^{-\int_0^\tau \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} g(\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau)) \theta_D(\mathbf{r}') + \theta_\Omega(\mathbf{p}', \mathbf{r}'), \quad (2.46)$$

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

Доказателство: Сравнението между (2.45) и (2.44) показва, че като първа стъпка е необходимо изравняването на броя на интегралите в двата израза. Формално интегриране по $\mathbf{r}'$ позволява интегралът по време в (2.44) да бъде асоцииран към ядрото:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \int_{-\infty}^0 dt' S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^0 \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \\ &\times \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}(t')) \theta_D(\mathbf{r}') + f_b(\mathbf{P}(t_b), \mathbf{R}(t_b)) e^{-\int_{t_b}^0 \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Индикаторът на симулационната област θ_D осигурява коректната граница t_b на интеграла по време. Съгласно (1.53), (1.54) и (2.45) спрегнатото уравнение има вид:

$$\begin{aligned} g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') &= \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{r} g(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \int_{-\infty}^0 dt' S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^0 \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \\ &\times \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}(t')) \theta_D(\mathbf{r}') + g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}'), \end{aligned}$$

където $g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}') = \theta_\Omega(\mathbf{p}', \mathbf{r}')$. Смяната на интеграционните променливи $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ с

$$\mathbf{p}^a = \mathbf{P}(t'; 0, \mathbf{p}, \mathbf{r}); \quad \mathbf{r}'' = \mathbf{R}(t'; 0, \mathbf{p}, \mathbf{r}); \quad d\mathbf{p} d\mathbf{r} = d\mathbf{p}^a d\mathbf{r}'', \quad (2.48)$$

където последното равенство изразява теоремата на Лиувил, води до

$$\mathbf{p} = \mathbf{P}(0; t', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}'') = \mathbf{P}(-t'; 0, \mathbf{p}_a, \mathbf{r}''), \quad \mathbf{r} = \mathbf{R}(0; t', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}'') = \mathbf{R}(-t'; 0, \mathbf{p}_a, \mathbf{r}'') . \quad (2.49)$$

Използвана е инвариантността на траекториите за изместване на времето с $-t'$. Началото на времето може да бъде сменено и в експонентата:

$$e^{-\int_{t'}^0 \lambda(\mathbf{P}(y; t', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}''), \mathbf{R}(y; t', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}'')) dy} = e^{-\int_0^{-t'} \lambda(\mathbf{P}(y; 0, \mathbf{p}_a, \mathbf{r}''), \mathbf{R}(y; 0, \mathbf{p}_a, \mathbf{r}'')) dy} . \quad (2.50)$$

Следващата смяна $\tau = -t'$ води до параметризация на траекториите напред във времето, $\tau > 0$. Накрая интегралът по пространствената променлива може да бъде отчетен с помощта на δ -функцията, което води до заместването на $\mathbf{r}''$ с $\mathbf{r}'$ и до крайния вид на уравнението (2.46). ■

2.3.2.2 Гранични условия

Благодарение на (1.54) задачата се преформулира както следва:

$$f_\Omega = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' g(\mathbf{p}', \mathbf{r}') f_b(\mathbf{P}'(t_b), \mathbf{R}'(t_b)) e^{-\int_{t_b}^0 \lambda(\mathbf{P}'(y), \mathbf{R}'(y)) dy} . \quad (2.51)$$

Универсалното предположение за граничните условия е, че разпределението на електрони в резервоарите и на контактите е това за равновесие $f_b = f_{MB}$. По отразяващите повърхности f_b не е известна, но както ще бъде показано, не е и необходимо да бъде известна за решаването на задачата.

Интегрирането по реалното пространство е в цялата симулационна област D . Изразът (2.51) 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 (2.51) тъй като за тях $t_b = -\infty$.

Теорема 2.3.2 Производението $|\mathbf{v}_\perp|f_b$ 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:

$$f_\Omega = \int_0^\infty dt \int_{K_+} d\mathbf{p}_b \int_{\partial D} d\sigma |\mathbf{v}_\perp(\mathbf{p}_b)| f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}_b(y), \mathbf{R}_b(y)) dy} g(\mathbf{P}_b(t), \mathbf{R}_b(t)) . \quad (2.52)$$

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

Доказателство: 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 (2.51) 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:

$$\int_{-\infty}^0 dt \delta(B(\mathbf{R}(t)) - c)\phi(\mathbf{R}(t)) = 1; \quad \int \delta(g(t))\phi(t) dt = \int \delta(t - t_b) |g'(t_b)|^{-1} \phi(t_b) dt . \quad (2.53)$$

Също така се предполага, че аргументът на делта функцията има само един корен, така че е валидно второто равенство в (2.53). От (2.53) следва за ϕ :

$$\phi(\mathbf{R}(t_b)) = \left| (\nabla_{\mathbf{R}} B)(\mathbf{R}(t_b)) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt}(t_b) \right| = |(\nabla_{\mathbf{R}} B)(\mathbf{r}_b)| |\mathbf{v}_\perp(\mathbf{p}_b)| . \quad (2.54)$$

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 (2.51) добива вид:

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

То може да се преобразува като се следват стъпките, водещи до параметризацията напред във времето. Интеграционните променливи $\mathbf{p}'$, $\mathbf{r}'$ се сменят на $\mathbf{p}_b$, $\mathbf{r}''$ съгласно

$$\mathbf{p}_b = \mathbf{P}'(t'; 0, \mathbf{p}', \mathbf{r}'), \quad \mathbf{r}'' = \mathbf{R}'(t'; 0, \mathbf{p}', \mathbf{r}') . \quad (2.55)$$

от което с помощта на (2.42) следва

$$\mathbf{p}' = \mathbf{P}'(0; t', \mathbf{p}_b, \mathbf{r}'') = \mathbf{P}'(-t'; 0, \mathbf{p}_b, \mathbf{r}''), \quad \mathbf{r}' = \mathbf{R}'(0; t', \mathbf{p}_b, \mathbf{r}'') = \mathbf{R}'(-t'; 0, \mathbf{p}_b, \mathbf{r}'') . \quad (2.56)$$

Преместването на времето с $-t'$ се извършва и в експонентата:

$$e^{-\int_{t'}^0 \lambda(\mathbf{P}'(y; t', \mathbf{p}_b, \mathbf{r}''), \mathbf{R}'(y; t', \mathbf{p}_b, \mathbf{r}'')) dy} = e^{-\int_0^{-t'} \lambda(\mathbf{P}'(y; 0, \mathbf{p}_b, \mathbf{r}''), \mathbf{R}'(y; 0, \mathbf{p}_b, \mathbf{r}'')) dy} . \quad (2.57)$$

След формалната смяна $t = -t'$ уравнението добива вид:

$$f_\Omega = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{p}_b \int d\mathbf{r}'' g(\mathbf{P}'(t), \mathbf{R}'(t)) \delta(B(\mathbf{r}'') - c) \phi(\mathbf{r}'') f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}'') e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}'(y), \mathbf{R}'(y)) dy} . \quad (2.58)$$

Сега може да се използва тъждеството:

$$\int d\mathbf{r} \delta(B(\mathbf{r}) - c) h(\mathbf{r}) = \int \frac{d\sigma}{|(\nabla_{\mathbf{r}} B)(\mathbf{r}_b)|} h(\mathbf{r}_b) . \quad (2.59)$$

То може да се получи от линейното развитие на B около дадена точка $\mathbf{r}_b$ на граничната повърхност:

$$B(\mathbf{r}) = c + (\nabla_{\mathbf{r}} B)(\mathbf{r}_b) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) . \quad (2.60)$$

Координатната система може да бъде завъртяна така, че например $\mathbf{r}_3$ да стане нормала към повърхността в дадената точка. Якобианът на такава ротация е единица. Сега δ -функцията остава зависима само от $\mathbf{r}_3$ и може да бъде отчетена явно. Остава само интегрирането по променливите от тангенциалната равнина, към която принадлежи и елементът на повърхността в дадената точка.

По такъв начин инициализацията на траекториите $\mathbf{P}'(t)$, $\mathbf{R}'(t)$ се дава от точката $\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b, 0$, така че за удобство те се преименуват на $\mathbf{P}_b, \mathbf{R}_b$. Използвайки (2.54) и (2.59) в (2.58) се получава (2.52). ■

Векторите на скоростта сочат навътре в областта поради обратната параметризация на траекториите в (2.51); така $\mathbf{p}_b$ интегралът е по подпространството K_+ .

Подинтегралната компонента

$$j_b(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = f_b(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \mathbf{v}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) \quad (2.61)$$

в (2.52) има физически смисъл на плътност на потока частици през границата. Потокът на влизащите в D частици е

$$\Phi_D = \int_{K_+} d\mathbf{p}_b \int_{\partial D} d\sigma j_b(\mathbf{p}, \mathbf{r}) . \quad (2.62)$$

Очевидно плътността на потока през повърхностите от границата, които отразяват електроните е нула, така че последните не дават принос към потока което определя областта ∂D в (2.62).

2.3.3 Нехомогенни едночастични алгоритми и ергодичност

Обобщените за нехомогенен случай класически варианти (2.5) и (2.6) на едночастичната техника се извеждат с помощта на (1.55). В частност в съответствие с (1.56) ще бъде анализиран вторият член от развитието $f_\Omega = \sum_j f_\Omega^{(j)}$:

$$\begin{aligned} f_\Omega^{(2)} = & \Phi_D \int_0^\infty dt \int_{K_+} d\mathbf{p}_b \int_{\partial D} d\sigma \int_0^\infty dt_1 \int d\mathbf{p}_1^a \int_0^\infty dt_2 \int d\mathbf{p}_2^a \left\{ \frac{j_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b)}{\Phi_D} \right\} \\ & \left\{ e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}_b(y), \mathbf{R}_b(y)) dy} S(\mathbf{P}_b(t), \mathbf{p}_1^a, \mathbf{R}_b(t)) \right\} \theta_D(\mathbf{R}_b(t)) \\ & \left\{ e^{-\int_0^{t_1} \lambda(\mathbf{P}_1(y), \mathbf{R}_1(y)) dy} S(\mathbf{P}_1(t_1), \mathbf{p}_2^a, \mathbf{R}_1(t_1)) \right\} \theta_D(\mathbf{R}_1(t_1)) \end{aligned} \quad (2.63)$$

$$e^{-\int_0^{t_2} \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} \theta_\Omega(\mathbf{P}_2(t_2), \mathbf{R}_2(t_2)) . \quad (2.64)$$

Първите фигурни скоби избират началната точка на траекторията според плътността на потока през границата. Изразите, затворени във следващите фигурни скоби, могат да бъдат допълнени до вероятностни плътности за дрейф и разсейване точно както в (2.17). Така подредените условни вероятности съответстват на естествената поредица от процеси на дрейф и разсейване: в нормална параметризация крайната фазова точка на всеки свободен полет служи за определяне на състоянието след разсейване. То на свой ред инициализира следващата траектория, по част от която ще бъде осъществен дрейфът.

Следва да се отбележи важната роля на двете индикаторни функции в (2.46): Числената траектория, съответстваща на (2.63), започва от границата и след два процеса на дрейф и разсейване би допринесла за оценката на $f_{\Omega}^{(2)}$ само ако:

- всички точки на числената траектория принадлежат на симулационната област D .
- траекторията на последният свободен полет минава през Ω .

Стойността на $f_{\Omega}^{(2)}$ е произведение на Φ_D със стойността на единствения интеграл, останал за оценка:

$$I_f = \int_0^{\infty} dt_2 e^{-\int_0^{t_2} \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} \theta_{\Omega}(\mathbf{P}_2(t_2), \mathbf{R}_2(t_2)) . \quad (2.65)$$

Този анализ директно се генерализира за всеки член $f_{\Omega}^{(j)}$. При това се получават основните стъпки на алгоритъма за построяване на траекторията на еднoчaстичната техника, в случая обобщен за нехомогенната задача. Основната разлика с ансамбловата техника е, че докато там една траектория допринася за оценката на един и само един член j в даден момент, тук една траектория оценява цялата безкрайна сума. Наистина тя оценява последователно не само $j = 0, 1, \dots, l$ члена преди напускане на областта, но и тези с $j > l$, към които допринася с нула. Така симулирането на тази траектория може да приключи и

да се започне със следващата от границата на областта. Траекториите се симулират последователно във времето, с което техниката запазва едночастичния си характер и при нехомогенния случай.

2.3.3.1 Усредняване по състоянията преди разсейване

Следващата теорема формулира генерализацията на (2.6) за нехомогенния случай.

Теорема 2.3.3 *Средната стойност на една физична величина $\langle A \rangle_\Omega$ се получава съгласно с формула*

$$\langle A \rangle_\Omega = f_D \frac{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in \Omega)} A(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))}{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in \Omega)} \lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))}, \quad (2.66)$$

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

Доказателство: От дефиницията за средна стойност:

$$\langle A \rangle_\Omega = \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{r} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) A(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \theta_\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \quad (2.67)$$

следва, че свободният член на (2.46) се обобщава на $A(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \theta_\Omega(\mathbf{p}', \mathbf{r}')$. Стъпките, водещи от (2.45) до (2.65), предлагат следната формулировка на интеграла съответстващ на j -тия член:

$$I_A = \int_0^\infty dt_j \left\{ e^{-\int_0^{t_j} \lambda(\mathbf{P}_j(y), \mathbf{R}_j(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}(t_j), \mathbf{R}(t_j)) \right\} \frac{\theta_\Omega(\mathbf{P}_j(t_j), \mathbf{R}_j(t_j)) A(\mathbf{P}_j(t_j), \mathbf{R}_j(t_j))}{\lambda(\mathbf{P}(t_j), \mathbf{R}(t_j))}. \quad (2.68)$$

От тук може да се заключи, че траектория, която се реализира в симулационната област, допринася на края на всеки свободен полет със стойността на

случайната величина $\theta_\Omega A/\lambda$, която е 0, ако $\mathbf{P}_j(t_j), \mathbf{R}_j(t_j) \notin \Omega$. Тогава за N траектории оценката е:

$$\langle A \rangle_\Omega = \Phi_D \frac{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in \Omega)} (A\lambda^{-1})(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))}{N} \quad (2.69)$$

и в частност:

$$f_D = \Phi_D \frac{\sum_{((\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i)) \in D)} \lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))}{N} . \quad (2.70)$$

Обикновено, за разлика от броя на носителите в симулационната област, техният поток Φ_D не се знае явно или изчислението му е по-сложно. Релацията в дясно позволява да се елиминира Φ_D/N , което и води до (2.66). ■

Ако броят носители в D не се знае предварително, той може да бъде определен с помощта на (2.66) от познаването му в някоя от симулационни подобласти, например в елемент от контакта. В хомогенния случай, (2.6), f_D се приема за единица.

Алгоритъм 2.3.1 *Получените резултати водят до следния алгоритъм:*

- 1) Избира се броят на траекториите N и се инициализират с нула две величини ν и μ ;
- 2) Началната точка $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ на всяка траектория $n = 1, \dots, N$ се избира с вероятностна плътност $f_b|\mathbf{v}_\perp|(\mathbf{p}, \mathbf{r})/\Phi_D$;
- 3) Накрая на всеки свободен полет, в локално време t_i по поредната част от траектория, принадлежаща на D , се увеличават величините ν и μ както следва: ν с $(A\theta_\Omega\lambda^{-1})(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))$ и μ с $\lambda^{-1}(\mathbf{P}(t_i), \mathbf{R}(t_i))$;
- 4) Когато условието в стъпка 3 се наруши и $\mathbf{R}(t)$ напусне симулационната област, за което и $t \leq t_i$, се започва нова траектория от стъпка 2;
- 5) След N траектории: ν се разделя на μ . Резултатът е статистическа оценка за $\langle A \rangle_\Omega/f_D$.

Теорема 2.3.4 *Физическата система, отговаряща на стационарната задача, определена от гранични условия, е ергодна и в частност важи следната оценка:*

$$\langle A \rangle_{\Omega} = f_D \frac{\int dt (A \theta_{\Omega})(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t))}{T}, \quad (2.71)$$

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

Доказателство: Алтернативна дефиниция на t е времето на часовник, който стартира заедно с първия свободен полет на първата траектория, но не се рестартира с всеки акт на разсейване. Доказването на ергоди́чността е еквивалентно на доказването на метода (2.5) за намиране на средни стойности на физически величини. Доказателството се основава на алтернативно представяне на интеграла (2.65). Експоненциалната функция може да се замени с интеграла:

$$e^{-\int_0^{t_2} \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} = \int_0^{\infty} dt_3 e^{-\int_0^{t_3} \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}_2(t_3), \mathbf{R}_2(t_3)) \theta(t_3 - t_2). \quad (2.72)$$

След смяна на реда на интегриране и с помощта на θ функцията се получава:

$$I_f = \int_0^{\infty} dt_3 \left\{ e^{-\int_0^{t_3} \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}_2(t_3), \mathbf{R}_2(t_3)) \right\} \int_0^{t_3} dt_2 \theta_{\Omega}(\mathbf{P}_2(t_2), \mathbf{R}_2(t_2)). \quad (2.73)$$

Сега членът във фигурните скоби е точно плътността за избор на следващия момент на разсейване, докато следващият интеграл има ясен физичен смисъл: той дава времето, през което траекторията е пребивавала в Ω през интервала $0, t_3$ на последния свободен полет.

Следвайки аргументите, водещи до (2.68), първо се обобщава (2.73) за една физична величина A и за произволен член j

$$I_A = \int_0^\infty dt_{j+1} \left\{ e^{-\int_0^{t_{j+1}} \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}_2(t_{j+1}), \mathbf{R}_2(t_{j+1})) \right\} \times \int_0^{t_{j+1}} dt_j A(\mathbf{P}_2(t_j), \mathbf{R}_2(t_j)) \theta_\Omega(\mathbf{P}_2(t_j), \mathbf{R}_2(t_j)) . \quad (2.74)$$

Приносите от интегралите по t_j първо се сумират по реда на итерациите j в рамките на една числена траектория, а след това и по числените траектории $n = 1, \dots, N$, което се преформулира като интеграл по симулационното време t :

$$\langle A \rangle_\Omega = \Phi_D \frac{\int dt (A \theta_\Omega)(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t))}{N} \quad (2.75)$$

и в частност

$$f_D = \Phi_D \frac{\int dt (\theta_D)(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t))}{N} . \quad (2.76)$$

Накрая Φ_D/N се елиминира чрез второто равенство, което дава (2.71). ■

Така ергодичността на системата следва от Монте Карло метода (1.55), (1.56) и не е необходимо *a priori* предположението за замяна на усредняването по ансамбъл с усредняването по време при оценка на физичните величини.

Алгоритъм 2.3.2 *Ергодичната преформулировка на алгоритъм (2.3.1) се формулира както следва:*

- 1) Избира се броят на траекториите N и се инициализират с нула две величини ν и μ ;
- 2) Началната точка $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ на всяка траектория $n = 1, \dots, N$ се избира с вероятностна плътност $f_b|\mathbf{v}_\perp|(\mathbf{p}, \mathbf{r})/\Phi_D$;

- 3) При всеки свободен полет с продължителност t_i , където t_i е по-малкото от генерираното време на свободен полет и времето, за което траекторията пресича (би пресякла) границата на D : към величината ν се добавя $\int_0^{t_i} dt(A\theta_\Omega)(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t))$ и към величината μ се добавя $\int_0^{t_i} dt$;
- 4) Когато $\mathbf{R}(t)$ се окаже извън симулационната област в който да е момент t от еволюцията, от стъпка 2 се започва нова траектория;
- 5) ν се разделя на μ след симулация на N траектории. Резултатът е статистическа оценка за $\langle A \rangle_\Omega / f_D$.

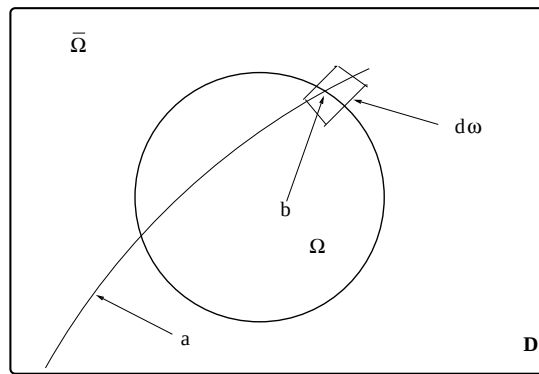
2.3.3.3 Избор на границата

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 физически 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. 2.12. Задачата е да се изчисли $f_{\bar{\Omega}}$, като за удобство се предполага познаването и на f_D , и на 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 Ω .

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 интерпертирани като траектории, генерирани от подходи **В** и **С**. От съображения за съгласуваност се



Фигура 2.12: Подобласти на симулационната област D

очаква верността на следното твърдение:

Теорема 2.3.5 *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**.*

Доказателство: Анализът започва със сравнение на процесите на свободен полет, започващи от различните начални точки a и b по Нютоновата траектория от Фиг. 2.12. Всъщност точките b_i и b_o , в които траекторията пресича S_Ω , са две: при влизане и при излизане от Ω , като нататък с b се означава коя да е от тях. В случая **А** границата с Ω в точка b се пресича по траекторията по време на

свободен полет, започнал от точка a . При **B**, **C** всички траектории започват от b , като техният брой съгласно (2.52) се определя от теглото в тази точка $f_b|\mathbf{v}_\perp|$. Какъв е броят траектории, осигурени около тази точка от **A**? Нека свободният полет, започнал от $\mathbf{p}_a, \mathbf{r}_a$ в момент нула, пресича S_Ω в $\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b$ в момент t_b . Не е трудно да се види, че единственият начин за попадане на траектории в диференциалната област $d\Omega = d\omega d\mathbf{p}$ около $\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b$ е по диференциално близки такива до тази Нютонова траектория. Вероятността следващият момент на разсейване да е по-голям от t_b може да се запише така:

$$\begin{aligned} & \int_{t_b}^{\infty} dt \lambda(\mathbf{P}_a(t), \mathbf{R}_a(t)) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}_a(y), \mathbf{R}_a(y)) dy} \\ &= e^{-\int_0^{t_b} \lambda(\mathbf{P}_a(y), \mathbf{R}_a(y)) dy} \int_0^{\infty} dt \lambda(\mathbf{P}_b(t), \mathbf{R}_b(t)) e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}_b(y), \mathbf{R}_b(y)) dy} . \end{aligned}$$

Последният интеграл в дясно дава вероятностната плътност за свободен полет, започващ от b . Факторът преди интеграла е вероятността свободен полет, започваща от a , да стигне до b . Тази вероятност трябва да се умножи по броя на полетите, тръгващи от a , който очевидно е равен на броя на попадащите там след разсейване числени траектории. По-нататък точката a може да е навсякъде назад по Нютоновата траектория чак до границата на D , така че трябва да се сумират приносите на всички такива точки. За да се оцени общият ефект на дискутираните елементарни процеси, се използва това, че **A** оценява усреднената функция на разпределение във всяка подобласт на D и в частност в $d\Omega$. Нека $d\omega$ е цилиндърът около нормалата към повърхността S_Ω в точка b както е показано на Фиг. 2.12. Височината на цилиндъра е dx и той загражда площ $S_{d\omega}$ от S_Ω . Така $f_{d\Omega}$ е:

$$f_{d\Omega} = f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b) S_{d\omega} dx d\mathbf{p} . \quad (2.77)$$

Времето $dt_{d\omega}$, за което всяка една траектория пресича $d\omega$, се оценява като $dx/|\mathbf{v}_\perp(\mathbf{p}_b)|$. Нека от границата D да започват N траектории, от които n да

минават през $S_{d\omega}$. Тогава оценката за $f_{d\Omega}$ е

$$f_{d\omega} = \Phi_D \frac{ndt_{d\omega}}{N} . \quad (2.78)$$

От (2.77) и (2.78) следва

$$f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b) |\mathbf{v}_\perp(\mathbf{p}_b)| S_{d\omega} d\mathbf{p} = n \frac{\Phi_D}{N} . \quad (2.79)$$

Тоест, относителният брой траектории на единица площ $S_{d\omega}$ на единица интервал $d\mathbf{p}$ в импулсното пространство, осигурявани от подход **A** върху S_Ω , е пропорционален на $f_b |\mathbf{v}_\perp|$. Следва да се провери дали за тези траектории е валидна оценката (2.76), записана за област Ω или е необходима корекция във връзка с фактора в (2.79). За целта разглеждаме числените траектории на **A**, които могат да бъдат разделени на части, принадлежащи на Ω и такива на $\bar{\Omega}$. Нека броят на тези в Ω да е N_Ω . Те започват от границата S_ω , K_{Ω_i} и свършват върху границата S_ω , K_{Ω_o} , където индексите i и o са свързани със скоростите, сочещи навътре или навън от Ω . Интегрирането на (2.79) по $S_{d\omega} d\mathbf{p}$ води до:

$$\frac{\Phi_{\Omega_i}}{\Phi_D} = \frac{N_\Omega}{N}, \quad \Phi_{\Omega_i} = \int f_{dS} |\mathbf{v}_\perp| dS d\mathbf{p}_{bi}, \quad (2.80)$$

където Φ_{Ω_i} е физичния поток частици, влизащи в Ω - този необходим на **C**. Нека t_Ω е времето, прекарано вътре в Ω от траекториите N_Ω , Валидна е следната оценка:

$$f_\Omega = \frac{\Phi_D t_\Omega}{N} = \frac{\Phi_{\Omega_i} t_\Omega}{N_\Omega} . \quad (2.81)$$

Това доказва, че траекториите N_Ω , осигурени от **A**, може да бъдат интерпретирани като избрани съгласно с **C** и водещи до коректна оценка на f_Ω изцяло в съответствие с (2.76).

Сега да разгледаме $\bar{\Omega}$ от гледна точка на алгоритъм **B**. N_Ω траектории излизат от Ω подходящо разпределени върху S_ω , K_{Ω_o} за да дадат оценка на $f_{\bar{\Omega}}$. Броят на числените траектории за този алгоритъм е $N + N_\Omega$. Времето $t_{\bar{\Omega}}$, прекарано от формално разделените траектории на алгоритми **A** и **B**

$$t_{\bar{\Omega}} = f_{\bar{\Omega}} \frac{N}{\Phi_D} = f_{\bar{\Omega}} \frac{N + N_\Omega}{\Phi_D + \Phi_{\Omega_o}},$$

където Φ_{Ω_o} е стойността на интеграла от $f_{S_\omega}|\mathbf{v}_\perp|$ по dS_ω , K_{Ω_o} .

Последните две релации са съгласувани само ако

$$\Phi_{\Omega_o} = \Phi_{\Omega_i}$$

Тук е лесно е да се разпознае условието за стационарност: потокът частици навътре през границата на една произволна област е равен на потока частици, напускащи тази област. ■

2.3.4 Алгоритъм с разделяне на траекториите от ИП

Итерационният подход (ИП) може да бъде директно приложен за извеждане на една от техниките за увеличаване на статистиката, дискутирани в (2.1.3). Това е естественият и интуитивен алгоритъм за разделяне на траекториите на Phillips и Price, който може да бъде обоснован с помощта на спрегнатото уравнение (2.46). Сегментите на всяка едночастична траектория се построяват с помощта на вероятностен процес, дължащ се на последователното приложение на ядрото на уравнението. Тогава на всяка стъпка ядрото може се разклони M пъти съгласно с представянето:

$$S(\mathbf{p}', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}') e^{-\int_0^\tau \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} = \sum_{i=1}^M \frac{1}{M} S(\mathbf{p}', \mathbf{p}_a, \mathbf{r}') e^{-\int_0^\tau \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy}.$$

Такова разделяне на траекторията води до тегло $1/M$ за всеки един от клоновете. Моментът на разцепване не е свързан с навлизането в определена област на фазовото пространство, а може да бъде произволно избран. Нещо повече разцепването може да се прави на всяка итерация j независимо от предишната история, като и M_j може да варира. Единственото условие е да не се променя стойността на пресмятаното средно е теглото, натрупано от предишни разцепвания да се обновява с фактор $1/M_j$.

2.3.5 Алгоритъм на обратната еволюция от ИП

Прилагането на итерационния подход за извеждане на алгоритми за обратната във времето еволюция формално следва извода на алгоритъм (2.1.6.1). В съответствие с (1.50) и (1.51) записваме втората итерация на стационарното нехомогенно уравнение (2.44) както следва:

$$\begin{aligned}
 f^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = & \int_{t_b(\mathbf{p}, \mathbf{r})}^0 dt_1 \int d\mathbf{p}_1 \int_{t_{b1}}^0 dt_2 \int d\mathbf{p}_2 f_b(\mathbf{P}_2(t_{b2}), \mathbf{R}_2(t_{b2})) e^{-\int_{t_{b2}}^0 dy \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y))} \\
 & S(\mathbf{p}_2, \mathbf{P}_1(t_2), \mathbf{R}_1(t_2)) e^{-\int_{t_2}^0 dy \lambda(\mathbf{P}_1(y), \mathbf{R}_1(y))} \\
 & S(\mathbf{p}_1, \mathbf{P}(t_1), \mathbf{R}(t_1)) e^{-\int_{t_1}^0 dy \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y))}.
 \end{aligned} \tag{2.82}$$

Допълването на последните два реда на (2.82) с (λ/λ') съответно с аргументи $(\mathbf{P}(t_1), \mathbf{R}(t_1))$ и $(\mathbf{P}_1(t_2), \mathbf{R}_1(t_2))$ води до формиране на вероятностни плътности за дрейф обратно във времето и разсейване в обратна на физическата посока. Съответно, за да се запази стойността на $f^{(2)}$, се добавят и фактори λ'/λ , които се появяват като тегла. Това води до алгоритъм (2.1.6.1) с единствената разлика, че еволюцията назад във времето не е ограничена от момента на началното условие: конструирането на една траектория спира при достигане границата на областта на симулация.

Въпреки че тази техника е напълно обоснована от числена гледна точка, практическото ѝ прилагане може да доведе до трудности поради една особеност на физическите процеси на разсейване. Тя е свързана с това, че основните механизми на разсейване - фононите действат в посока на възстановяване на равновесието на носителите. Така един високоенергетичен носител с по-голяма вероятност ще губи енергия от фононите и ще се термализира при нормална еволюция. Когато обаче разсейването е в обратната посока, приоритетно ще се добавя енергия, което може да доведе до голяма дисперсия на обратните

траектории във фазовото пространство.

Модификация на метода е предложена от Kosina и Nedjalkov [69]. Идеята на подхода е да се използва естествената посока за разсейване и за конструкцията на обратните траектории. Така енергиите се разпределят в околност на равновесната енергия, което значително намалява дисперсията на траекториите във фазовото пространство. Използва се принципът на детайлния баланс:

$$S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) e^{(\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon(\mathbf{p}'))/k_B T} \quad (2.83)$$

с чиято помощ (2.82) може да се преформулира както следва:

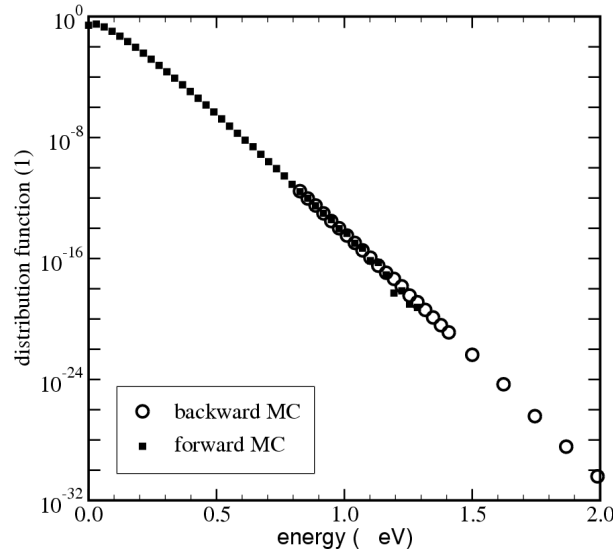
$$\begin{aligned} f^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = & \int_{t_b(\mathbf{p}, \mathbf{r})}^0 dt_1 \int d\mathbf{p}_1 \int_{t_{b1}}^0 dt_2 \int d\mathbf{p}_2 f_b(\mathbf{P}_2(t_{b2}), \mathbf{R}_2(t_{b2})) e^{-\int_{t_{b2}}^0 dy \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y))} \\ & e^{\frac{\epsilon(\mathbf{p}_2) - \epsilon(\mathbf{P}_1(t_2))}{k_B T}} \left\{ \frac{S(\mathbf{P}_1(t_2), \mathbf{p}_2, \mathbf{R}_1(t_2))}{\lambda(\mathbf{P}_1(t_2), \mathbf{R}_1(t_2))} \right\} \left\{ \lambda(\mathbf{P}_1(t_2), \mathbf{R}_1(t_2)) e^{-\int_{t_2}^0 dy \lambda(\mathbf{P}_1(y), \mathbf{R}_1(y))} \right\} \\ & e^{\frac{\epsilon(\mathbf{p}_1) - \epsilon(\mathbf{P}(t_1))}{k_B T}} \left\{ \frac{S(\mathbf{P}(t_1), \mathbf{p}_1, \mathbf{R}(t_1))}{\lambda(\mathbf{P}(t_1), \mathbf{R}(t_1))} \right\} \left\{ \lambda(\mathbf{P}(t_1), \mathbf{R}(t_1)) e^{-\int_{t_1}^0 dy \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y))} \right\}. \quad (2.84) \end{aligned}$$

Условните вероятности за конструкция на траекторията са затворени във фигурни скоби, а теглото, което се натрупва при еволюцията, е произведение на съответните експоненти извън скобите.

За практическо приложение на подхода може да се използва балансът между процесите на абсорбция и емисия в даден тип разсейване. Тези процеси се отличават по знака $\pm$ в (1.12) както следва:

$$S_{ab}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = A n(\mathbf{q}) \delta(\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon(\mathbf{p}') + \hbar \omega_{\mathbf{q}}); \quad S_{em}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = A(n(\mathbf{q}) + 1) \delta(\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon(\mathbf{p}') - \hbar \omega_{\mathbf{q}}). \quad (2.85)$$

Може да се използва (1.8), за да се покаже, че $n(\mathbf{q}) + 1 = n(\mathbf{q}) \exp(\hbar \omega_{\mathbf{q}}/k_B T)$,



Фигура 2.13: Разпределение на електроните по енергия, пресметнати с методи на права, $\bullet$ и обратна еволюция, $\circ$.

откъдето следва

$$S_{ab}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = S_{em}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \exp(-\hbar\omega_{\mathbf{q}}/k_bT) \quad S_{em}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = S_{ab}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \exp(\hbar\omega_{\mathbf{q}}/k_bT) . \quad (2.86)$$

Подходът е проверен за случая на еволюция на електрони в хомогенен силиций при температура $300K$ и поле $10kV/cm$. Началното разпределение е равновесно, като еволюционното време от 3 пикосекунди след включване на полето практически гарантира достигане на стационарно състояние. Фигура 2.13 показва разпределението по енергии на електроните, получени чрез модифицирания подход на обратна еволюция и Монте Карло метод с техника за увеличаване на статистиката. Предимствата на първия са очевидни и в частност резолюцията от 30 порядъка се гарантира от 10 милиона траектории. Достигнатата енергия от $2eV$ е от порядъка на потенциалната бариера, която контролира инжекцията на електрони от силиция в силициевия двуокис, и които водят до деградация на съвременните процесори и памети.

2.4 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. Тази задача се поставя при моделирането на съвременните прибори, където условията на транспорт са подчертано неравновесни. При тези условия е необходимо както самосъгласувано решаване заедно с уравненията за електромагнитното поле, Фиг. 1.2, които в повечето случаи се свеждат до уравнението на Поасон, така и прилагането на техники за подобряване на статистиката.

На практика всички симулатори използват класическата ансамблова Монте Карло техника в съчетание с алгоритми за популационен контрол с разделяне на траекториите, разгледани в (2.1.3). От феноменологични съображения е ясно, че не трябва да се прави разлика между траектории, дошли от началното условие или от границата. Численият анализ обаче показва, [70], че това е характеристика само на ансамбловата техника, при която не е необходимо да се прави разлика между приносите към физическите средни, идващи от началното или от граничното условия.

Алтернативно, може да бъдат предложени техники за подобряване на статистиката, които използват модифицирани вероятности за начално/гранични условия и съответно въвеждат статистически тегла. Последните се получават и при въведените в подсекция 2.1.6.2 техники с модифицирани вероятности за еволюция - дрейф и разсейване, анализирани от Rota и Jacoboni [56] за случая на начално условие и от Nedjalkov et al [71] при стационарен транспорт, и [72], [70] за задачата за самосъгласуване на тези техники с уравнението на Поасон. Задачата е нетривиална защото уравнението на Болцман става нелинейно чрез зависимостта на полето от функцията на разпределение, което не позволява директното прилагане на итерационния подход. В частност се показва, че теглата на числените траектории може да бъдат запазвани през последователните

итерационни стъпки.

2.4.1 Постановка на задачата

Разглежда се решението на уравнение (1.15), определено от начално и гранични условия в седеммерното пространство на координати, импулси и време. Задачата е да се изчисли средната стойност $\langle A \rangle(t)$ на дадена физична величина A . За извеждането на Монте Карло методи с нормална - напред във времето еволюция на траекториите, е удобно да се разгледа спрегнатото на интегралната форма на (1.15) уравнение. В съответствие с (1.54) задачата може да се преформулира с помощта на спрегнатото уравнение, за извеждането на което в (1.52) се въвежда и интеграл по времето:

$$\langle A \rangle = \int d\mathbf{p} \int_D d\mathbf{r} A(\mathbf{p}, \mathbf{r}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p} \int_D d\mathbf{r} \int_0^\infty dt' A(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \delta(t - t') f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t'), \quad (2.87)$$

докато функцията на разпределение f се предполага нормирана на броя носители в областта D , който в едночастичния случай беше означен с f_D , (2.70). Тук ще бъде означен с $N(t) = \langle \theta_D \rangle$, за да се подчертае съответствието с броя едновременно симулирани траектории. Съответно $N(t, \Omega) = \langle \theta_\Omega, f \rangle$ е актуалният брой носители в подобласт Ω .

Изводът на интегралната форма на (1.15) обобщава получаването на уравнения (2.24) и (2.43), като 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 .

Наличието на две алтернативни времена води до появата на два алтернативни

члена в интегралната форма на уравнението:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int_0^t dt' \theta_D(\mathbf{R}(t')) \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t'), t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{R}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \\ + e^{-\int_0^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} f_i(\mathbf{P}(0), \mathbf{R}(0)) + e^{-\int_{t_b}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} f_b(\mathbf{P}(t_b), \mathbf{R}(t_b), t_b), \quad (2.88)$$

отговарящи съответно за началното и за граничните условия. За дадена инициализация $\mathbf{p}, \mathbf{r}, t$ на обратната траектория един от тези два члена винаги е нула.

2.4.2 Спрегнатото уравнение

Следната теорема обобщава уравнение (2.46) за случая на обща задача, поставена от начално и гранични условия:

Теорема 2.4.1 *Спрегнатото на (2.88) уравнение е:*

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = \int_{t'}^{\infty} d\tau \int d\mathbf{p}^a \theta_D(\mathbf{r}') S(\mathbf{p}', \mathbf{p}^a, \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^{\tau} \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} g(\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau), \tau) + g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t'), \quad (2.89)$$

където свободният член g_0 , съответстващ на (2.87), има вид

$$g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = A(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (2.90)$$

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

Доказателство: Ядрото в (2.88) е изродено, което налага преформулирането му с помощта на функциите на Дирак и Хевисайд като седеммерен интеграл:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int_0^{\infty} dt' \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t'), t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \times \\ \theta_D(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}(t')) \theta(t - t') + f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t). \quad (2.91)$$

Свободният член в (2.88), означен с f_0 , е функция единствено на $\mathbf{p}, \mathbf{r}, t$, защото последните определят t_0 и $\mathbf{P}(t_0), \mathbf{R}(t_0)$. Съгласно, (1.53), спрегнатото уравнение с даден свободен член g_0 има същото ядро, но интегрирането е по непримованите променливи:

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{r} g(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \times \\ \theta_D(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}(t')) \theta(t - t') + g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') . \quad (2.92)$$

С помощта на теоремата на Лиувил следва смяна на интеграционните променливи от $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ на $\mathbf{p}^a = \mathbf{P}(t'), \mathbf{r}'' = \mathbf{R}(t')$, като последните инициализират траекторията, която, както при извода на (2.46), получава нормална параметризация по времето. Уравнението добива вид:

$$g(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{p}^a \int d\mathbf{r}'' g(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t), t) S(\mathbf{p}', \mathbf{p}^a, \mathbf{r}') e^{-\int_{t'}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \times \\ \theta_D(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \theta(t - t') + g_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') .$$

Сега е удобно да се отчетат δ функцията и функцията на Хевисайд θ , което води до (2.89) с уговорката, че интеграционната променлива τ заменя t , тъй като с последното беше означено еволюционното време. Последно, сравнението между (1.53), (1.54) и (2.87) води до (2.90). ■

Решението на спрегнатото уравнение (2.89) при специалният 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:

$$G(\theta_\Omega, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0) = \int_0^\infty dt' e^{-\int_0^{t'} \lambda(\mathbf{P}_\alpha(y), \mathbf{R}_\alpha(y)) dy} g(\mathbf{P}_\alpha(t'), \mathbf{R}_\alpha(t'), 0) \quad (2.93)$$

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. Ще бъдат използвани и вероятностните плътности (2.1) и (2.2), които в случая зависят от следните аргументи:

$$p_S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{r}) d\mathbf{p}' = \frac{S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{r})}{\lambda(\mathbf{p}, \mathbf{r})} d\mathbf{p}', \quad w(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0) dt = e^{-\int_{t_0}^t \lambda(\mathbf{p}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \lambda(\mathbf{p}(t), \mathbf{R}(t)) dt. \quad (2.94)$$

С помощта на тези величини се формулира следната теорема:

Теорема 2.4.2 *С помощта на (2.94) G може да бъде представен като безкрайнономерен интеграл:*

$$G = \lim_{m \rightarrow \infty} \prod_{l=0}^m \int_{t_l}^{\infty} dt_{l+1} \int d\mathbf{p}_{l+1}^a w(t_{l+1}; \mathbf{p}_l^a, \mathbf{R}_{l-1}(t_l), t_l) p_S(\mathbf{P}_l(t_{l+1}), \mathbf{p}_{l+1}^a, \mathbf{R}_l(t_{l+1})) \dots \\ \times \sum_{i=0}^m \theta(t - t_i) \left(\prod_{j=0}^{i-1} \theta_D(\mathbf{R}_j(t_{j+1})) \right) \theta_\Omega(\mathbf{P}_i(t), \mathbf{R}_i(t)) \theta(t_{i+1} - t), \quad (2.95)$$

където е използвана конвенцията:

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

Доказателство: За удобство разглеждаме приноса на втората итерация на (2.89) към (2.93), като при това предполагаме $A = \theta_\Omega$:

$$G^{(2)} = \int_0^\infty dt' \int_{t'}^t dt_1 \int d\mathbf{p}_1^a \int d\mathbf{p}_2^a e^{-\int_0^{t'} \lambda(\mathbf{P}_\alpha(y), \mathbf{R}_\alpha(y)) dy} S(\mathbf{P}_\alpha(t'), \mathbf{p}_1^a, \mathbf{R}_\alpha(t')) \theta_D(\mathbf{R}_\alpha(t')) \\ \times e^{-\int_{t'}^{t_1} \lambda(\mathbf{P}_1(y), \mathbf{R}_1(y)) dy} S(\mathbf{P}_1(t_1), \mathbf{p}_2^a, \mathbf{R}_1(t_1)) \theta_D(\mathbf{R}_1(t_1)) \\ \times e^{-\int_{t_1}^t \lambda(\mathbf{P}_2(y), \mathbf{R}_2(y)) dy} \theta_\Omega(\mathbf{P}_2(t), \mathbf{R}_2(t)). \quad (2.96)$$

Уравнението може да бъде разширено точно както уравнение (2.17), така че последователните множители exp и S да се допълнят до съответните вероятностни плътности (2.94). Целесъобразно е да се преозначат времевите променливи съгласно със схемата $t' \rightarrow t_1$, $t_1 \rightarrow t_2$, и да се разшири интегралът по t_2 до безкрайност, което да се компенсира от функцията $\theta(t - t_2)$. По такъв начин $G^{(2)}$ се представя като произведение на условните плътности $wp_S wp_S$, които генерират естествения процес на еволюция на Болцмановите носители. Могат да бъдат разпознати елементарните явления, при които началната частица се движи по траектория $\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{R}_\alpha$ до момент t_1 , когато настъпва разсейване. Координатите в края на свободния полет са входни параметри за генериране на състоянието след разсейване, което от своя страна определя следващата траектория за свободен полет, като е входен параметър за намиране на времето за следващото разсейване. Последната експонента е вероятността за дрейф без разсейване по траекторията $\mathbf{P}_2, \mathbf{R}_2$ до достигане на определеното време t . Наистина равенството (2.72) се обобщава за времезависимия случай както следва:

$$e^{-\int_{t_2}^t \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} = \int_{t_2}^{\infty} dt_3 e^{-\int_{t_2}^{t_3} \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} \lambda(\mathbf{P}(t_3), \mathbf{R}(t_3)) \theta(t_3 - t) dt \quad (2.97)$$

и показва, че експонентата обединява всички явления имащи време на разсейване по-голямо от t . Накрая θ_Ω in (2.96) отхвърля тези процеси, при които частицата не е в Ω в момент t . Интегралите по време и импулс сумират всички възможни елементарни явления, водещи до три дрейфа и две явления на разсейване. Индикаторите на областта отчитат само тези събития, при които траекториите остават в D до момента t . Функцията θ се грижи за подходящата подредба на времената на последователните събития: $t_1 \leq t_2 \leq t$.

И така (2.95) обобщава процеси, в които частицата: (i) претърпява две разсейвания по време на своята еволюция; (ii) остава в D по време на еволюцията; (iii) намира се в Ω в момент t . Към това уравнение, с помощта на (2.97), може

да бъде добавен и члена, обобщаващ процеси с едно разсейване $i = 1$:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^2 G^{(i)} = & \int_0^\infty dt_1 \int_{t_1}^\infty dt_2 \int_{t_2}^\infty dt_3 \int d\mathbf{p}_1^a \int d\mathbf{p}_2^a \int d\mathbf{p}_3^a \times \\
& w(t_1; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0) p_S(\mathbf{P}_\alpha(t_1), \mathbf{p}_1^a, \mathbf{R}_\alpha(t_1)) \times \\
& w(t_2; \mathbf{p}_1^a, \mathbf{R}_\alpha(t_1), t_1) p_S(\mathbf{P}_1(t_2), \mathbf{p}_2^a, \mathbf{R}_1(t_2)) \times \\
& w(t_3; \mathbf{p}_2^a, \mathbf{R}_1(t_2), t_2) p_S(\mathbf{P}_2(t_3), \mathbf{p}_3^a, \mathbf{R}_2(t_3)) \times \\
& \left(\theta_\Omega(\mathbf{P}_\alpha(t), \mathbf{R}_\alpha(t)) \theta(t_1 - t) + \theta(t - t_1) \theta_D(\mathbf{R}_\alpha(t_1)) \theta_\Omega(\mathbf{P}_1(t), \mathbf{R}_1(t)) \theta(t_2 - t) \right. \\
& \left. + \theta(t - t_2) \theta_D(\mathbf{R}_\alpha(t_1)) \theta_D(\mathbf{R}_1(t_2)) \theta_\Omega(\mathbf{P}_2(t), \mathbf{R}_2(t)) \theta(t_3 - t) \right) .
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Функциите на Хевисайд ефективно разделят случайната величина в скобите на това уравнение на събития с нула, едно и две разсейвания, които се допълват по отношение на скалата на времето. Този резултат може да бъде обобщен за остатъка от редицата, водещ до безкрайномерния интеграл (2.95) и сума от θ функции, които представляват случайната величина Ψ , асоциирана с изследваният транспортен процес. ■

Следва анализ на физическите 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 (2.95) се свежда до

$$\psi = \sum_{i=0}^{m-1} \theta(t - t_i) \theta(t_{i+1} - t); \quad 0 < t_1 < t_2 \dots \tag{2.99}$$

Времева ос се разделя на интервали от последователните времена в (2.95). 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 (2.99) 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 (2.95) се оценява лесно:

$$G(\theta_{\mathcal{T}}, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0) = 1 \quad \forall \quad t, \quad \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha . \tag{2.100}$$

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.

Трябва да се отбележи, че традиционният начин за извод на закона за запазване на вероятността е както следва: От уравнения (1.54), (2.87) и (2.100) и условието $\theta_\Omega = \theta_\mathcal{T} = 1$ следва, че:

$$G(\theta_\mathcal{T}, t; \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha, 0) = \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{r} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) .$$

Интегрирането на уравнението на Болцман в цялото пространство води до (2.100).

В общия случай, когато $\Omega \in D \neq \mathcal{T}$ индикаторите на симулационната област отхвърлят някои от събитията, отчитани в (2.99). Случайната величина ψ в (2.95) е вече не фиксирана на 1, но има нулата 0 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. Нататък ограничението траекторията да принадлежи на D ще бъде наричано условие I .

Горният анализ води до следната оценка, [73], за дисперсията на случайната величина, асоциирана с G :

Твърдение 2.4.1 *Дисперсията на случайната величина ψ , чието математическо очакване E_ψ е дефинирано от уравнение (2.95), е:*

$$\sigma_\psi^2 = G(1 - G) . \quad (2.101)$$

В дефиницията $\sigma_\psi^2 = E_{\psi^2} - E_\psi^2$ използваме $E_\psi = G$, както и че възможните стойности, заемани от ψ , са 0 и 1, от което следва $\psi^2 = \psi$ ■

Уравнение (2.95) може да бъде обобщено до уравнение, отговарящо на дадена физична величина A чрез заместване на θ_Ω с A . Случайната величина ψ ,

асоциирана с A , заема стойности:

$$\psi = A(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \quad \text{или} \quad \psi = 0 \quad (2.102)$$

където $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ е позицията, достигната от траекторията в момента t . Предполага се, че няма напускане на симулационната област в предишен момент. В последния случай $\psi = 0$. Трябва да се отбележи, че A може да бъде една най-обща физическа величина или нейната стойност $A\theta_\Omega$ в дадена подобласт на фазовото пространство.

2.4.3 Принос от началното и граничните условия

Съгласно с уравнение (1.54) средната стойност на величината A в момент t се определя от решението на (2.89) и свободния член в (2.91):

$$\langle A \rangle(t) = \int dQ' f_0(Q') g(Q') = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' \int_0^\infty dt' f_0(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') g(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') . \quad (2.103)$$

Тъй като f_0 включва начални и гранични условия, приносът им към (2.103) трябва да бъде анализиран поотделно.

2.4.3.1 Начално условие

Приносът от началното условие

$$\langle A \rangle_i(t) = \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{r}' f_i(\mathbf{P}(0), \mathbf{R}(0)) \int_0^\infty dt' e^{-\int_0^{t'} \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y)) dy} g(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t') \quad (2.104)$$

е формулирано с използването на обратна траектория $(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y))$ инициализирана от $\mathbf{p}', \mathbf{r}', t'$. За смяната към нормална параметризация се използва подхода, водещ до уравнение (1.20). За фазовата точка $\mathbf{P}(0), \mathbf{R}(0)$ се въвежда означението $\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i$. Тази точка инициализира в момент 0 нормално параметризираната

траектория $\mathbf{p}_i(y), \mathbf{R}_i(y)$. Следва смяна на интеграционните променливи, като се използва, че в новите означения $\mathbf{p}' = \mathbf{P}_i(t')$ и $\mathbf{r}' = \mathbf{R}_i(t')$:

$$\langle A \rangle_i(t) = \int d\mathbf{p}_i \int d\mathbf{r}_i f_i(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i) \int_0^\infty dt' e^{-\int_0^{t'} \lambda(\mathbf{P}_i(y), \mathbf{R}_i(y)) dy} g(\mathbf{P}_i(t'), \mathbf{R}_i(t'), t') . \quad (2.105)$$

Интерпретацията на този израз е както при (2.96). Функцията f_i дава разпределението на носителите, които инициализират траектории в момент 0. Остатъкът от израза може лесно да бъде идентифициран като $G(A, t; \mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i, 0)$: наистина, изборът $f_i(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i) = \delta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_\alpha) \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_\alpha)$, както и $A = \theta_\Omega$ трансформира (2.105) в (2.93).

Освен това, при $A = \theta_\Omega$ и условия на хомогенен транспорт, (2.105) се опростява до уравнение (2.15).

2.4.3.2 Гранични условия

Приносът от граничните условия, записан в обратна параметризация, изглежда по същият начин, както (2.104), като само началното разпределение f_i се замества с условията по границите f_b . Формулировката му с нормална параметризация на траекторията обаче изглежда по съвсем различен начин и се получава, следвайки трансформациите водещи до (2.52):

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_b(t) = & \int_0^t dt_b \oint_{\partial D} d\sigma(\mathbf{r}_b) \int_{K_+} d\mathbf{p}_b v_\perp(\mathbf{p}_b) f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b, t_b) \times \\ & \int_{t_b}^\infty dt' e^{-\int_{t_b}^{t'} \lambda(\mathbf{P}_b(y), \mathbf{R}_b(y)) dy} g(\mathbf{P}_b(t'), \mathbf{R}_b(t'), t') . \end{aligned} \quad (2.106)$$

Горната граница на интеграла по t_b се фиксира на t от делта-функцията в g_0 . Членът $v_\perp f_b$ има подобна интерпретация като f_i : той дава разпределението на началните точки на траекториите, инициализирани от t_b . Остатъкът от подинтегралната величина може лесно да се идентифицира като $G(A, t; \mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b, t_b)$.

Подобно на стационарния случай, уравнения (2.61) и 2.62), към (2.106) може да бъдат асоциирани следните физични величини:

$$\begin{aligned} j_{\perp}(\mathbf{r}_b, t_b) &= d\mathbf{p}_b \int_{K_+(\mathbf{r}_b)} v_{\perp}(\mathbf{p}_b) f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b, t_b), \\ \Gamma_D(t_b) &= \oint_{\partial D} j_{\perp}(\mathbf{r}_b, t_b) d\sigma(\mathbf{r}_b), \\ N_{\Gamma}(t) &= \int_0^t dt_b \Gamma_D(t_b) . \end{aligned} \quad (2.107)$$

Те представят нормалната компонента на плътността на навлизащия поток частици, потока частици в момент t_b и общия брой частици, инжектирани до момента t . Така интегралът по t_b отчита приноса на всички частици, инжектирани в моменти $t_b \leq t$ към стойността на $\langle A \rangle_b(t)$. Полагането $A = \theta_{\Omega}$, идентифицира втория член като $G(\theta_{\Omega}, t; \mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i, t_b)$. Обикновено f_b не зависят от времето, така че интегралът (2.107) става линейна функция по t .

Полезен при актуални симулационни задачи е следният резултат, който дава информация за флуктуацията на частици в дадена област Ω : Нека $A = \theta_{\Omega}$ и да търсим оценка на дисперсията на случайните величини асоциирани, с приносите от начално и гранични условия (2.105) и (2.106)

Теорема 2.4.3 *Ако началното условие f_i е нормирано на единица, то дисперсията на съответната случайна величина е*

$$\sigma_{\Omega}^2 = f_{\Omega}(1 - f_{\Omega}) . \quad (2.108)$$

Ако f_i съответства на физическата задача с $l = 1, \dots, N$ електрона, то дисперсията е

$$\sigma_{\Omega}^2 = \sum_l \sigma_{\psi l}^2 . \quad (2.109)$$

Ако в момент t_b от границите се инжектират $l(t_b) = 1, \dots, N(t_b)$ електрона, то дисперсията е

$$\sigma_{\Omega}(t)^2 = \int_0^t dt_b \sum_{l(t_b)} \sigma_{\psi l(t_b)}^2(t) . \quad (2.110)$$

Доказателство: Резултатът се базира на твърдение (2.4.1).

Когато f_i е нормирано на единица, то може да се интерпретира като вероятно разпределение, отразяващо например нашето незнание на точните начални координати на даден електрон. В този случай f_i се аташира към останалите вероятности в уравнение (2.95), така че остават валидни условията за (2.4.1).

Уравнението (2.109) следва от закона за събиране на дисперсиите на независими събития. Тук съществено се използва това, че електроните не си взаимодействат, като това става в самосъгласуваните задачи, в които траекториите си влияят една на друга посредством уравнението на Поасон.

Уравнение (2.110) е директно обобщение на (2.109), като се вземе предвид потокът частици през границите. Трябва да се отбележи, че в случая няма постоянно увеличение на дисперсията с времето, защото като правило в реалните задачи, времето за пребиваване на електроните в симулационната област е крайно и $\sigma_{\psi l(t_b)}^2(t) \rightarrow 0$ ако $t - t_b \rightarrow \infty$. ■

2.4.4 Ансамблов алгоритъм за моделиране на прибори

Съвременният Ансамблов Монте Карло алгоритъм за смесената задача, обединяваща както стационарни, така и за времезависими симулации на полупроводникови структури, ще бъде анализиран от гледна точка на итерационния подход. Основно значение има представянето (2.95). Типичен представител на членовете в този ред е изразът (2.98), който има формата на (1.56). Това сравнение позволява да се идентифицира 'естествената' вероятност за преход P^B като произведение от вероятностите $w \times p_S$, произлизащи от ядрото на уравнението на Болцман. P^B обобщава схемата свободен полет - разсейване на симулация в хомогенен полупроводник. Времето на следващото разсейване t_r се определя от

$$\int_{t_0}^{t_r} w(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0) dt = r,$$

където r е генерирано равномерно разпределено случайно число. Следващата стъпка е да се определи състоянието след разсейване съгласно p_S . Като правило

S включва различни механизми на разсейване S_i :

$$S = \sum_i S_i; \quad p_S = \frac{S}{\lambda} = \sum_i \frac{\lambda_i S_i}{\lambda \lambda_i} = \sum_i \frac{\lambda_i}{\lambda} p_{S,i}; \quad \sum_i^{i_r} \frac{\lambda_i}{\lambda} \leq r < \sum_i^{i_r+1} \frac{\lambda_i}{\lambda}. \quad (2.111)$$

Така вероятността за избор на дадено състояние е произведение от условни вероятности. Неравенството се използва за намиране на конкретния механизъм на разсейване i_r , където r е следващо случайно число. Тогава състоянието след разсейване се определя по избрания механизъм i_r . Понеже $|\mathbf{p}'|$ се определя от типа разсейване, са необходими още две случайни числа за определянето на $\mathbf{p}'$ като вектор.

С това се установява съответствие между числените траектории на Монте Карло метода и траекториите на токовите носители в приборите. Числената траектория, конструирана с помощта на P^B , е възможна траектория на един реален носител.

Извън условието да остава в симулационната област, само финалната точка $\mathbf{p}, \mathbf{r}$, достигната в момент t , определя стойността на съответната случайна величина $\psi = 1, 0$ за (2.95). Така, алтернативно може да се говори за числена частица, чиято еволюция във фазовото пространство е тази на един токов носител. Съгласно с (1.48), N такива частици могат да се използват за определяне на интересувашата ни средна стойност в момент t : $\langle A \rangle \simeq \sum_{n=1}^N \psi_n / N$, като в случая ψ_n е стойността на случайната величина (2.102) за n -тата частица. Трябва да се отбележи, че това е средна стойност на един електрон с начално условие $\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{r}_\alpha$. Ако нормализирацият фактор N се аташира към числената частица, последната може да се разглежда като носеща една N^{-1} част от физичните характеристики на електрона. Прието е да се казва, че теглото на такива частици е N^{-1} .

Началното условие (2.105), както и граничните условия (2.106), въвеждат допълнителни интеграли, които, както беше дискутирано, инициализират разпределения на електрони в моменти 0 и t_b . В съвременните симулатори обикновено се използва конвенцията $N = 1$, при която съответствието между числени час-

тици и токови носители е едно към едно.

Средната стойност $\langle A \rangle = \langle A \rangle_i + \langle A \rangle_b$ е представена от два члена, чиито приноси като начало оценяваме отделно. Началната плътност $P_{0,i}^B$, съответстваща на (2.105), се конструира като се вземе предвид физическата същност на f_i : последната е представена от $N(0) = (1, f_i)$ носители, така че $P_{0,i}^B = f_i/N(0)$. Съгласно с горната конвенция броят на Монте Карло частиците е също $N(0)$. Еволюцията на всяка една от инициализираните $n = 1, \dots, N(0)$ следва правилата на Ансамбловия Монте Карло алгоритъм и допринася за оценката на $\langle A \rangle_i$ със съответната стойност на ψ_n . Съгласно с (1.48) и (1.56) е вярна следната релация

$$\langle A \rangle_i \simeq \frac{1}{N(0)} \sum_{n=1}^{N(0)} \frac{f_i}{P_{0,i}^B} \psi_n = \sum_{n=1}^{N(0)} \frac{P_{0,i}^B}{P_{0,i}^B} \psi_n = \sum_{n=1}^{N(0)} \psi_n = \sum_{n=1}^{N_i(t)} A_n, \quad (2.112)$$

където $N_i(t)$ е броят на частиците, които остават до момент t в симулационната област. Тук трябва да се отбележи, че всяко друго число на мястото на $N(0)$ би довело до тегло $N(0)/N$ за всички частици.

Членът (2.106), отговарящ за границите, се анализира с помощта на физичните величини (2.107), описващи инжекцията на носителите, чиито стойности се предполагат известни, и входни за дадена симулация. Вероятностната плътност на инжекцията се определя съгласно с:

$$P_{0,b}^B = \frac{\Gamma_D(t_b)}{N_\Gamma(t)} \times \frac{j_\perp(\mathbf{r}_b, t_b)}{\Gamma_D(t_b)} \times \frac{v_\perp(\mathbf{p}_b) f_b(\mathbf{p}_b, \mathbf{r}_b, t_b)}{j_\perp(\mathbf{r}_b, t_b)}. \quad (2.113)$$

Този избор на $P_{0,b}^B$ води до следната оценка:

$$\langle A \rangle_b \simeq \frac{1}{N_\Gamma(t)} \sum_{n=1}^{N_\Gamma(t)} \frac{v_\perp f_b}{P_{0,b}^B} \psi_n = \sum_{n=1}^{N_\Gamma(t)} \psi_n = \sum_{n=1}^{N_b(t)} A_n, \quad (2.114)$$

където $N_b(t)$ е броя на инжектираните от границата частици които не напускат симулационната област до момента t .

Плътността $P_{0,b}^B$ води до следната схема за симулация на граничните условия: $P_{0,b}^B$ е произведение от три условни вероятности, според които за всяка инжектирана частица (1) съгласно първия член трябва да се избере времето на инжекция

t_b ; (2) вторият член избира точката от границата, през която се осъществява инжекцията; (3) последният член избира стойността на нормалната компонента на импулса.

- 1 На тази стъпка t_b се избира според равномерно разпределение за всяка отделна частица, докато техният брой достигне $N_\Gamma(t)$. Диференциалният брой на инжектираните частици в интервала Δt_b около t_b се получава равен на $\Gamma_D(t_b)\Delta t_b/N_\Gamma(t)$. Тогава е еквивалентно (и по удобно) на всяка последователна стъпка Δt_b на еволюцията да се инжектира съответният диференциален брой частици.
- 2 Като правило f_b е равновесното разпределение f_e , което определя всеки контакт като хомогенна област на локално равновесие. Тогава $j_\perp$ е константа, характеризираща тази област.
- 3 Може да се покаже, че ако разпределението на частиците в една хомогенна област е равновесно, то разпределението по границата на областта е $v_\perp f_e$ и обратното. Затова има два начина за инжекция на f_e -разпределени частици: или да се фиксира тяхната позиция по границата, или те да се разпределят равномерно в една област до границата на симулационната област.

До тук схемата разчита на явното познаване на величините $j_\perp$, Γ_D и N_Γ , които трябва да се пресметнат според f_e . Алтернативно тези величини могат да бъдат определени неявно, което се оказва по-удобно за практиката. В една хомогенна равновесна област зарядът на подвижните носители трябва да компенсира заряда на йонизираните примесни атоми. Така на всяка стъпка се инжектират толкова частици, колкото са необходими за да осигурят неутралност на общия заряд в областта.

Въз основа на този анализ може да се формулира следният резултат:

Твърдение 2.4.2 *При този специален избор на начална и гранични плътности 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 производът на последната не може да бъде идентифициран.

Оценката за $\langle A \rangle$ е сума от приносите от начално и гранични условия: от уравнения (2.112) и (2.114) следва, че:

$$\langle A \rangle(t) = \langle A \rangle_i + \langle A \rangle_b \simeq \sum_{n=1}^{N_i(t)} A_n + \sum_{n=1}^{N_b(t)} A_n = \sum_{n=1}^{N(t)} A_n . \quad (2.115)$$

Според този резултат, всички частици в прибора се третират по един и същи начин, без значение дали техният произход се дължи на начални или гранични условия. ■

В резюме: 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 токовите 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.

2.4.5 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 могат 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.

Ще бъде показано, че оценката (2.115) се обобщава до

$$\langle A \rangle(t) \simeq \sum_{n=1}^{N^{bias}(t)} w_n A_n, \quad (2.116)$$

където $N^{bias}(t)$ е броят на модифицираните частици, а w_n е теглото на n -тата от тях.

Теглото може да бъде разглеждано като памет за числената траектория, която води една модифицирана частица до дадена точка от фазовото пространство. За разлика от нея съгласно (2.4.2) една частица от стандартния ансамблов алгоритъм няма памет - нейният принос към оценката на физичните величини не зависи от пътя, по който тя стига до тази точка.

Ще бъдат разгледани възможните начини за модифициране на Болцмановата еволюция. Докато изменението на началното и гранични разпределения дават тегла които се запазват по време на симулацията, модификацията на вероятностите за разсейване и свободен полет води до тегла, които се подновяват динамично с еволюцията. Тогава w_n in (2.116) е стойността на теглото в момент t .

2.4.5.1 Модифициране на началното и гранични условия

Начална плътност Начално условие може да е всяка неорицателна функция $P_{0,i}^{bias}$, нормализирана на единица в D , която е различна от нула, там където и началното условие е различно от нула. Съгласно с (1.56) модифицираната начална функция на разпределение замества $P_{0,i}^B$ в знаменателя на (2.112). Теглото на една частица, инициализирана в $(\mathbf{p}, \mathbf{r})$, тогава е

$$w(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{P_{0,i}^B(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{P_{0,i}^{bias}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}, \quad \langle A \rangle_i \simeq \sum_{n=1}^{N(0)} \frac{P_{0,i}^B}{P_{0,i}^{bias}} \psi_n = \sum_{n=1}^{N(0)} \psi_n = \sum_{n=1}^{N_i^{bias}(t)} w_n A_n. \quad (2.117)$$

където N_i^{bias} е броят на останалите в симулационната област в момент t модифицирани частици. В зависимост от конкретния избор на $P_{0,i}^{bias}$ частиците получават различно тегло. Горната оценка е направена с използването на уговорката, че теглото в D се запазва:

$$\int d\mathbf{p} d\mathbf{r} P_{0,i}^{bias}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) w(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{p} d\mathbf{r} P_{0,i}^B(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = 1 \simeq \frac{1}{N(0)} \sum_l^{N(0)} w_l, \quad (2.118)$$

където последният член показва, че $N(0)$ модифицирани частици представят $N(0)$ реални носители точно както и при стандартния Ансамблов алгоритъм. Или както броят на модифицираните частици е $N(0)$, така и сумарното им тегло е $N(0)$.

Разбира се, понеже броят на независимите експерименти може да бъде свободно избран, всяко друго N може да замести $N(0)$. Това обаче би довело до един допълнителен фактор $N(0)/N$ в (2.117).

Гранични условия Тук разглеждаме общите свойства, както и два начина за модифициране на граничните условия от $f_b = f_e$ на f^{bias} .

Най-общо членът $v_\perp f_e$ в (2.106) се аташира към случайната величина, а инжекцията се осъществява с плътност $P_{0,b}^{bias}$:

$$P_{0,b}^{bias} = \frac{v_\perp f^{bias}}{N_\Gamma^{bias}(t)}, \quad N_\Gamma^{bias}(t) = \int_0^t dt_b \oint d\sigma(\mathbf{r}_b) \int d\mathbf{p} v_\perp f^{bias},$$

където N_{Γ}^{bias} се получава в съответствие с (2.107). Оценката (2.106) е валидна за генерален избор на $N_{num}(t)$ инжектирани модифицирани частици става:

$$\langle A \rangle_b \simeq \frac{1}{N_{num}(t)} \sum_{n=1}^{N_{num}(t)} \frac{v_{\perp} f_e}{P_{0,b}^{bias}} \psi_n, \quad w = \frac{v_{\perp} f_e}{P_{0,b}^{bias} N_{num}(t)}. \quad (2.119)$$

Конкретният избор $N_{num}(t) = N_{\Gamma}^{bias}(t)$ дава като резултат теглото $w = f_e / f^{num}$.

$$\langle A \rangle_b \simeq \sum_{n=1}^{N_{\Gamma}^{bias}(t)} \frac{f_e}{f^{bias}} \psi_n = \sum_{n=1}^{N_b^{bias}(t)} w_n A_n. \quad (2.120)$$

Докато броят на инжектираните частици $N_{num}(t)$ (от $N_{\Gamma}^{bias}(t)$) е външна или входна величина, то броят на модифицираните частици $N_b^{bias}(t)$ останали в областта до момент t , е изходна за симулацията величина.

Схема, която осигурява инжекцията на $N_{\Gamma}^{bias}(t)$ модифицирани частици, се получава с помощта на (2.119): броят на инжектираните реални частици се дава от условието $\psi = 1$.

$$N_{\Gamma}(t) = \sum_{n=1}^{N_{\Gamma}^{bias}(t)} \frac{f_e}{f^{bias}} = \sum_{n=1}^{N_b^{bias}(t)} w_n. \quad (2.121)$$

Следователно сумата от теглата на инжектираните модифицирани частици е равна на този на реалните носители за всяко еволюционно време t . Това води до правилото, че модифицирани частици се инжектират докато сумата от теглата им стане равна на заряда, необходим за осигуряване на електронеутралност на съответния контакт. Съответно, техният брой в симулационната област в момент t се получава $N_{\Gamma}^{bias}(t)$. Благодарение на това се избягва необходимостта от явното познаване на величините от (2.107).

Средното значение на теглото на една модифицирана частица се оценява от израза:

$$\bar{w} = \int_0^t dt_b \oint d\sigma(\mathbf{r}_b) \int d\mathbf{p} w P_{0,b}^{bias} = \frac{N_{\Gamma}(t)}{N_{\Gamma}^{bias}(t)},$$

където се използва равенството $w v_{\perp} f^{bias} = v_{\perp} f_e$. Като правило $\bar{w} \neq 1$, така че броят на модифицираните частици обикновено е различен от този на естествените носители.

По-долу са разгледани два възможни начина на избор на f^{bias} . Равновесното разпределение

$$f_e(\epsilon, T) = \frac{1}{\bar{\epsilon}} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\bar{\epsilon}}\right\}, \quad \bar{\epsilon} = 1.5k_B T, \quad (2.122)$$

може да бъде използвано за избора $f^{bias} = f_e(\epsilon, T_b)$ съответстващ на по-висока температура T_b в контактната област. Това води например при често симулираните структури на MOSFET до това, че имащите по-висока кинетична енергия модифицирани частици по-лесно преминават през потенциалната бариера на сорса и така увеличават статистиката. За отношението f_e/f^{bias} е характерно следното свойство. С нарастване на T_b се увеличава отклонението на теглата от единица с което нараства и стандартното отклонение при оценка на физическите средни. Така изборът на подходяща температура е въпрос на компромис между необходимостта от голям брой частици и малка дисперсия на теглата.

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 може да се постигне, като f^{bias} се избере както следва:

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

Стойността на w_2 се определя от избора на w_1 и ϵ_1 в условието за нормировка на f^{bias} :

$$w_2 = \frac{w_1 f_e(\epsilon_1)}{c_1 - 1 + f_e(\epsilon_1)}. \quad (2.123)$$

Естественото разпределение (2.122) 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. Наистина, от (2.123) следва, че $w_2 < 1$ ако $w_1 > 1$. ϵ_1 може да бъде избрано от физични съображения, така че да увеличава статистиката в канала.

И в двата случая модифицираните тежки частици, които навлизат в канала, могат да повлияят статистиката, натрупана от голям брой леки частици. Затова е желателно успоредно да се прилага и техниката за разделяне на траекториите, дискутирана в (2.1.3).

2.4.5.2 Модифициране на еволюционния процес

Еволюционният процес се модифицира чрез заместване на Болцмановите вероятности, образуващи P^B в (2.95), със съответни вероятности, водещи до P^{bias} . Ролята на теглото $w(t) = P^B/P^{bias}(t)$ е да запазва стойността на (2.95) непроменена. Всяка модификация в еволюционен момент t определя фактор $w(t)$, който умножава натрупаното при предходната еволюция тегло w_e , което, от своя страна, умножава случайната величина за съответната оценка на физическите средни. Наблюдава се един нов ефект - еволюция на теглата на симулираните частици:

$$w_e = \prod_i w(t_i) . \quad (2.124)$$

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:

$$w(t) = \frac{p(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0)}{w^{bias}(t; \mathbf{p}, \mathbf{r}, t_0)} .$$

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 могат да бъдат 'окуражавани' да попадат в една желана област от симулационното пространство.

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 $w \geq 1$,

$$\lambda_a^{bias} = \lambda_a + \lambda_e \left(1 - \frac{1}{w}\right) , \quad \lambda_e^{bias} = \frac{\lambda_e}{w} . \quad (2.125)$$

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 $\lambda_e/\lambda_e^{bias} = w$. Интересното при тази техника е, че това не повлиява разпределението на времената за свободен полет, защото в сумарната вероятност за разсейване влиза сборът от вероятностите за емисия и абсорбция, която остава непроменена.

Частичите могат 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.

$$p^{bias}(\chi) = \begin{cases} \frac{1}{2w} & -1 \leq \chi < \chi_0 \\ \frac{w}{2} & \chi_0 \leq \chi < 1 \end{cases} . \quad (2.126)$$

Тук $w \geq 1$ е даден параметър, χ_0 се определя от нормализацията:

$$\chi_0 = \frac{w-1}{w+1}, \quad P^{bias}(\chi_0) = \frac{\chi_0+1}{2w} = \frac{1}{1+w},$$

а $P^{bias}(\chi_0)$ е кумулативната вероятност. В този случай ако r равномерно разпределено случайно число в интервала между 0 и 1 и $r < P^{bias}(\chi_0)$, то:

$$\chi_r = 2wr - 1, \quad \frac{p}{p^{bias}} = w .$$

В алтернативния случай

$$\chi_r = 1 - \frac{2(r-1)}{w}, \quad \frac{p}{p^{bias}} = \frac{1}{w} .$$

Следва, че теглото на една частица се увеличава или намалява с фактора w всеки път, когато χ се генерира от плътността (2.126).

Дискутираните свойства на теглата се обобщават от следното твърдение:

Твърдение 2.4.3 *Всяка частица допринася в оценката $\langle A \rangle$ с произведението $w_n A_n$ където A_n е стойността на физичната характеристика A , която би имал един реален носител в заеманата фазова точка от частицата, а w_n е произведението от всички тегла, натрупани в резултат от модификация на естествената еволюция. При модификация само на начално и гранични условия произходът на частицата може да бъде различен в общия случай по началното тегло.*

От уравнения (2.117) и (2.120) се получава (2.116).

$$\langle A \rangle(t) = \langle A \rangle_i + \langle A \rangle_b \simeq \sum_{n=1}^{N_i^{bias}(t)} w_n w_e A_n + \sum_{n=1}^{N_b^{bias}(t)} w_n w_e A_n = \sum_{n=1}^{N^{bias}(t)} A_n . \quad (2.127)$$

■

В частност, съгласно с уравнения (2.118) и (2.121), при инициализацията на траекториите се следи не броят, а теглото на частиците.

Трябва да се подчертае, че до тук съществено бе използвана линейността на разглежданата задача.

2.4.6 Самосъгласуван модифициран алгоритъм

Както беше дискутирано в подсекция 1.3.1, кулоновото взаимодействие между полупроводниковите носители се отчита от уравнението на Поасон:

$$\nabla(\epsilon \nabla V) = q(D + C), \quad C(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) . \quad (2.128)$$

Тук V е електричният потенциал в прибора и D е концентрацията на йонизирани 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. Връзката между C_l и функцията на разпределение f , се установява съгласно (2.115) като се въведе и мрежа Φ_m в подпространството на импулсите. Тогава $\Omega_{m,l} = \Phi_m \Psi_l$, $\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l \in \Omega_{m,l}$, и

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l, t) &\simeq \frac{\sum_n^{N(t)} \theta_{\Omega_{m,l}}(n)}{V_{\Phi_m} V_{\Omega_l}}, \\ C(\mathbf{r}_l, t) &\simeq \sum_m f(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l, t) V_{\Phi_m}, \\ N(t) &\simeq \sum_l C(\mathbf{r}_l, t) V_{\Psi_l}. \end{aligned} \quad (2.129)$$

Тук аргументът на θ функцията е кратко означение на позицията на n -тата частица. Горните оценки стават равенства в термодинамичната граница $N \rightarrow \infty$, $V_{\Phi_m}, V_{\Omega_l} \rightarrow 0$. Плътността 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:

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

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

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.

Твърдение 2.4.4 *Транспортът на Болцманови частици има Марков характер.*

Това се доказва чрез използване на интегралната форма (2.88) на транспортното уравнение, която се записва, като се разделя интервалът по време $(0, t)$ на две части: $(0, \tau)$ и (τ, t) :

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = & \int_{\tau}^t dt' \theta_D(\mathbf{R}(t')) \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t'), t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{R}(t')) e^{-\int_{t'}^t \lambda(y) dy} + \\ & e^{-\int_{\tau}^t \lambda(y) dy} \left[\int_0^{\tau} dt' \theta_D(\mathbf{R}(t')) \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{p}', \mathbf{R}(t'), t') S(\mathbf{p}', \mathbf{P}(t'), \mathbf{R}(t')) e^{-\int_{t'}^{\tau} \lambda(y) dy} \right. \\ & \left. + e^{-\int_0^{\tau} \lambda(y) dy} f_i(\mathbf{P}(0), \mathbf{R}(0)) + e^{-\int_{t_b}^{\tau} \lambda(y) dy} f_b(\mathbf{P}(t_b), \mathbf{R}(t_b), t_b) \right] \\ & + e^{-\int_{t_b}^t \lambda(y) dy} f_b(\mathbf{P}(t_b), \mathbf{R}(t_b), t_b), \end{aligned}$$

където е използвано съкращението $\lambda(y) = \lambda(\mathbf{P}(y), \mathbf{R}(y))$. Освен това граничното условие е представено от две части, в зависимост от времето до границата: такива с $t_b \leq \tau$ и с $t_b > \tau$. В последния случай времето t_b , което се определя от $\mathbf{p}, \mathbf{r}, t$, може да се разглежда и като определено от $\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau), \tau$. С това членът в квадратните скоби се идентифицира с $f(\mathbf{P}(\tau), \mathbf{R}(\tau), \tau)$. Следва, че решението f в момент τ вътре в симулационната област е начално условие за бъдещата еволюция, $t > \tau$. ■

Да предположим модифициран процес, при който в момент $\tau = t - \Delta t$ частиците се появяват с тегло w_n . Функцията на разпределение на носителите f и функцията на разпределение на модифицираните частици се оценяват с помощта на

(2.116) и (2.129):

$$f(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l, \tau) \simeq \frac{\sum_n^{N^{bias}(\tau)} w_n \theta_{\Omega_m, l}(n)}{V_{\Phi_m} V_{\Omega_l}}, \quad f^{bias}(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l, \tau) \simeq \frac{\sum_n^{N^{bias}(\tau)} \theta_{\Omega_m, l}(n)}{V_{\Phi_m} V_{\Omega_l}}. \quad (2.130)$$

Както и преди, аргументът на θ функцията е кратко означение на позицията на n -тата частица.

Сега вече, за да оценим физическата плътност на носителите в момент τ , може да използваме f . Съответно коректният потенциал и сила се получават от уравнението на Поасон. Възниква въпросът каква да бъде съдбата на модифицираните частици след този момент. 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 2.4.4 *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 .*

Доказателство: Съгласно с принципите на статистическата физика, в термодинамичната граница $N^{bias} \rightarrow \infty$, $V_{\Phi_m}, V_{\Omega_l} \rightarrow 0$, величините f и f^{bias} получават добре дефинирани стойности във всяка точка на фазовото пространство. Това дава възможност в момент τ да се въведат величините модифицирана начална плътност $P_{\tau, i}^{bias}$ и естествена начална плътност $P_{\tau, i}$ както следва

$$P_{\tau, i}^{bias} = \frac{f^{bias}}{N^{bias}(\tau)}, \quad P_{\tau, i} = \frac{f}{N(\tau)}, \quad w(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{P_{\tau, i}}{P_{\tau, i}^{bias}} = \frac{f}{f^{bias}} \frac{N^{bias}(\tau)}{N(\tau)}. \quad (2.131)$$

като теглото е оценено съгласно (2.117), а $N(\tau)$, $N^{bias}(\tau)$ са получени от съответното интегриране, даващо броя носители/частици в симулационната област.

Благодарение на това, че $P_{\tau,i}$ е известна, може да се приложат всички аргументи от (2.4.5.1) за дефиниране на едно ново, независимо от f^{bias} , модифицирано начално разпределение.

В частност, ако се следва уговорката за запазване на теглото, въведена в (2.4.5.1), то трябва да се изберат $N(0)$ носителя, които да продължат еволюцията. Броят на модифицираните частици се променя от $N^{bias}(\tau)$ на $N(\tau)$ - актуалният брой на носителите в областта. Този подход води до ренормализация на теглото на всяка стъпка с константен фактор, но запазва разпределението пропорционално на f^{bias} . Трябва да се отбележи, че невъзможността да се поддържа постоянен брой частици при една нестационарна еволюция има физическа причина: ролята на границите, които инжектират или поглъщат частици на всяка стъпка по времето. Наистина, уговорката за запазване на теглото от (2.4.5.1) важи само за началния момент, когато началното условие на носителите принадлежи на симулационната област.

Алтернативният избор е броят на продължаващите частици да бъде избран равен на изходните в момент τ частици, а именно $N^{bias}(\tau)$ да продължават до следващия момент време Δt . Това води до ренормализация на (2.131) с фактор $N(\tau)/N^{bias}(\tau)$ и до съответната оценка на теглата:

$$w(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l) = \frac{f(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l, \tau)}{f^{bias}(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l, \tau)} \simeq \frac{\sum_n^{N^{bias}(\tau)} w_n \theta_{\Omega_{m,l}(n)}}{\sum_n^{N^{bias}(\tau)} \theta_{\Omega_{m,l}(n)}} = \frac{\sum_n^{N^{bias}(\tau)} w_n \theta_{\Omega_{m,l}(n)}}{N_{m,l}^{bias}(\tau)}.$$

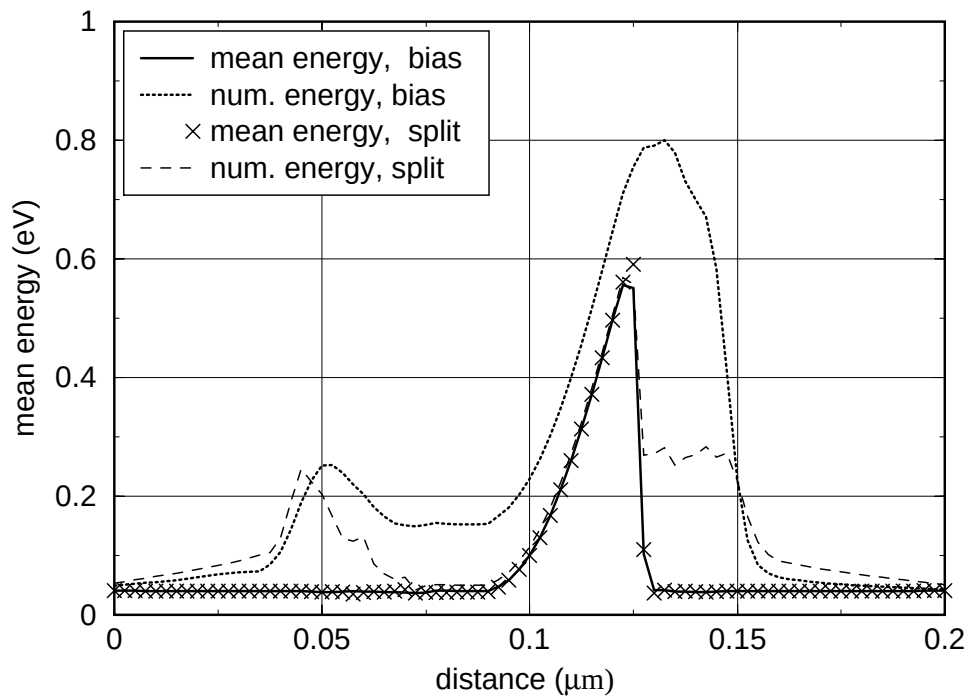
Следващ от (2.131) ортодоксалният Монте Карло подход изисква $N_{m,l}^{bias}(\tau)$ частици да започнат от $\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l$ с тегло $w(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l)$. Както обаче следва от последната оценка, $w(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l)$ е средната стойност на теглото за частица, като усредняването е по множеството $N_{m,l}^{bias}(\tau)$ модифицирани частици които се намират в областта около $(\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_l)$. Така теглата w_n се интерпретират като независими реализации на случайната величина w . Следва, че може да бъдат използвани оригиналните тегла и разположение на частиците, които да продължат еволюцията. Или модифицираните частици, които се появяват в момент τ с тегла w_n , представляват подходящ избор на модифицирано начално условие за следващата стъпка

на еволюцията, съгласно със следната схема.

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

■

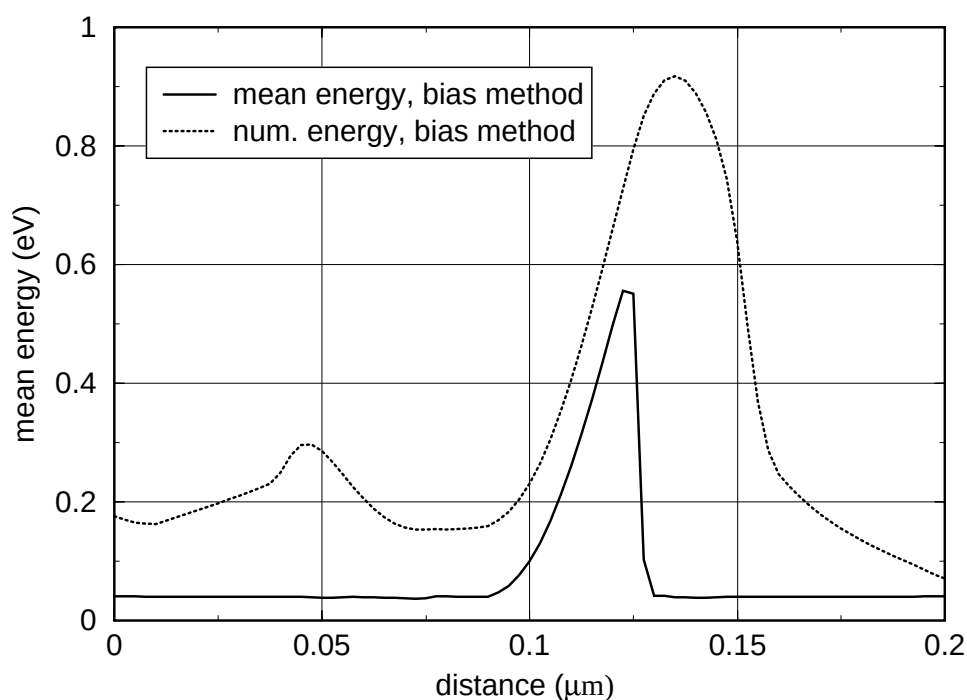
2.4.6.1 Симулационни експерименти



Фигура 2.14: Средна енергия на физическите носители (mean) и на симулираните частици, получени с разделяне на траекториите (split) и с модифициране на естествените вероятности (bias).

Представени са някои симулационни експерименти, които имат за цел да про-

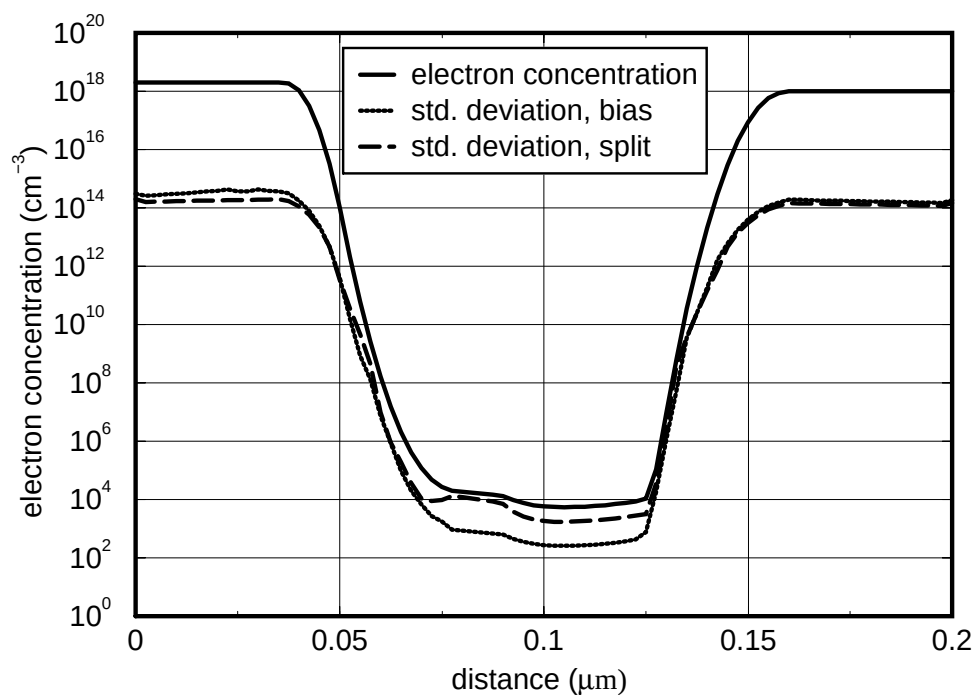
верят практическата страна на описаните възможности за модифициране. Разгледани са две типични ситуации: надбариерна инжекция и протичане на подпрагов ток, при които явления с малка вероятност контролират функционирането на прибора. Първо е разгледана стационарна задача на транспорт през $n-i-n$ диод, в който потенциалната бариера, формирана в i областта, е с височина 0.8 електронволта. При тези условия, поради екстремалните стойности на вграденото поле задачата може да се разглежда като линейна, както и да се използва едночастичният алгоритъм. На Фиг. 2.14 са сравнени алгоритъмът с



Фигура 2.15: Към метода с модифицирани вероятности от Фиг. 2.14 е добавено и изкуствено загряване на носителите в левия контакт.

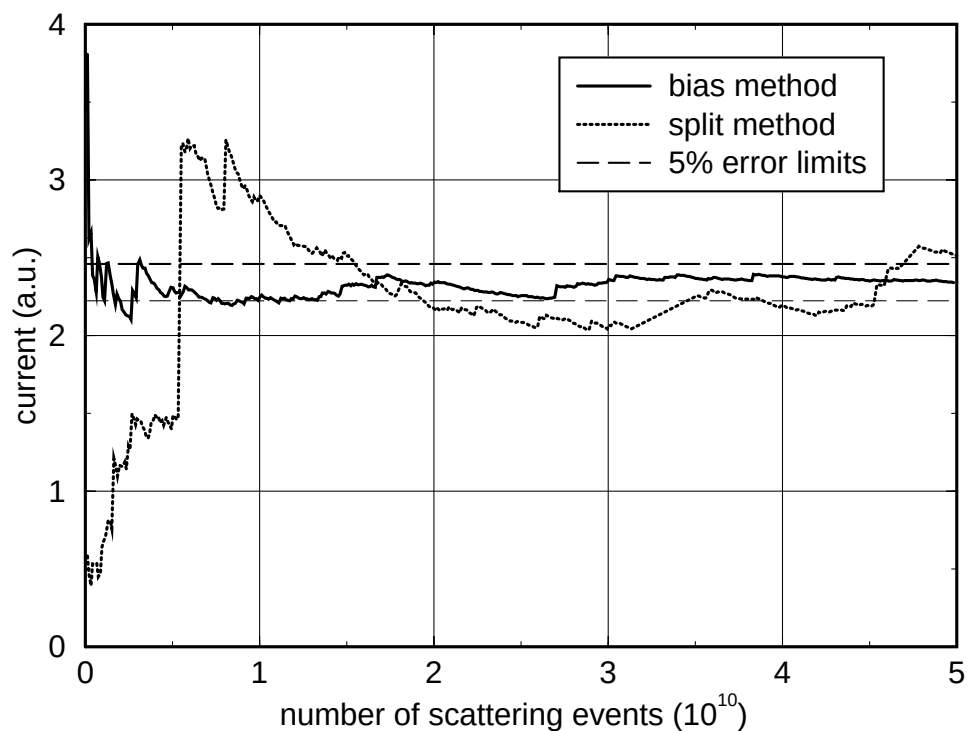
разделяне на траекториите и един алгоритъм, при който се модифицират както вероятностите за емисия и абсорбция в резултат на което се получава изкуствено загряване на частиците, така и изборът на ъгъла на състоянието след

разсейване. И двата алгоритъма се прилагат само в i областта. Разпределение на средната енергия на физическите носители по дължината на структурата е получено и по двата алгоритъма.



Фигура 2.16: Разпределение на електронната концентрация в структурата, както и емпирично пресметнатото стандартно отклонение за двата метода.

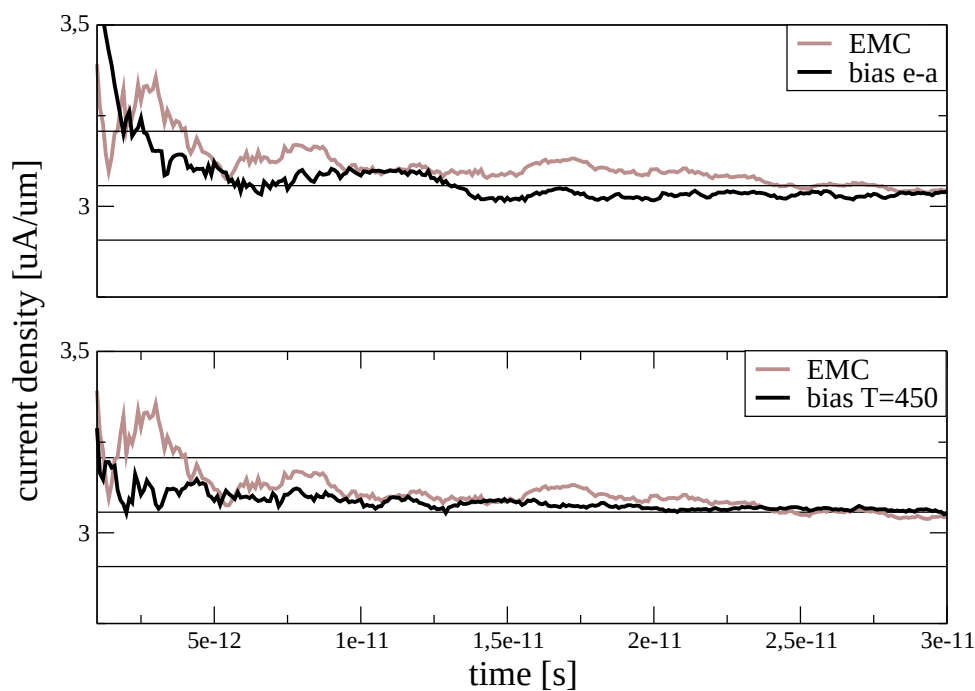
Показани са и разпределенията на енергията на числените частици, които разкриват типични особености на двата подхода: в случая с разделяне, двата пика в ляво от главния се дължат на отразени от бариерата частици. Разделянето на траекториите спира при достигане на върха на бариерата, така че там енергията на физически 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.



Фигура 2.17: Еволюция на тока през прибора, получен с двата метода за много дълго симулационно време. Показан е интервалът, в който грешката е под 5 процента.

Независимо от това физическите криви показват отлично съвпадение, което е успешен тест на подхода с модифицирани вероятности. Фиг. 2.15 показва резултатите от същия алгоритъм с модифициране на вероятностите, към които е добавена и модификация на граничните условия: температурата на левия контакт е повишена от $300K$ на $1500K$. Това не променя физическите средни, но съществено влияе на разпределението на модифицираните частици. Средната енергия на частиците на левия контакт, отговарящ на тази температура, дава представа за температурата на носителите които имат енергия да преодолеят бариерата. Концентрацията на електроните варира над 14 порядъка, Фиг. 2.16.

В левият контакт, където алгоритъмът с модифицираните вероятности използва по-голям



Фигура 2.18: Самосъгласувани двумерни симулации на MOSFET. Показан е подпороговият ток в канала като функция на времето, получен чрез стандартния ансамблов алгоритъм (EMC), чрез модификация на вероятностите за емисия и абсорбция на фонони (e-a), и чрез повишаване на температурата на частиците в инжектиращия контакт от 300 на 450. Показан е и интервалът, в който грешката е под 5 процента.

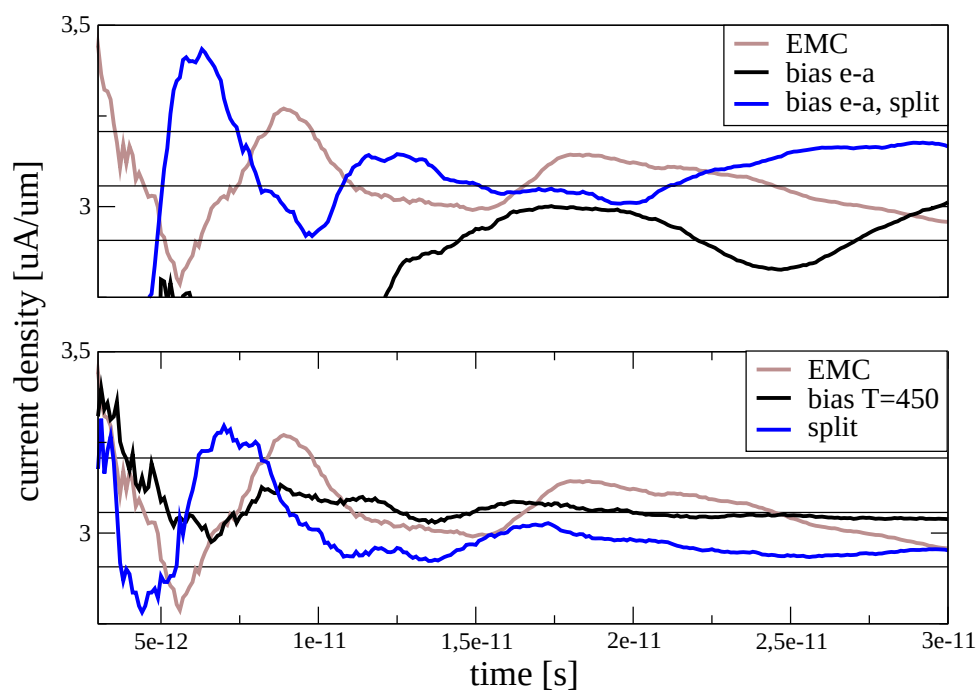
се търси подобряване на статистиката, този подход дава на порядък по-голяма точност в сравнение с метода на разделяне.

Особено чувствителен към избора на алгоритъм се оказва токът през структу-

рата. Модифицирането на естествените вероятности води в случая до по-бърза сходимост и по-голяма стабилност, както се вижда от поведението на кривите на Фиг. 2.17.

Следващите две фигури показват самосъгласувани симулации на тока в актуален прибор, произведен от Intel [74]. 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 $V_G = 0.375V$, 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. 2.18, и двата модифицирани алгоритма демонстрират по-голяма стабилност, което се свързва с факта, че в канала статистическите средни се получават главно от леки частици, при Фиг. 2.19 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 алгоритма 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 физическите средни, които трябва да са свързани с областите на подобрена статистика.



Фигура 2.19: Самосъгласувани двумерни симулации на MOSFET. Показан е подпраговият терминален ток като функция на времето, получен чрез стандартния ансамблов алгоритъм (EMC), чрез модификация на вероятностите за емисия и абсорбция на фонони (e-a), комбинацията на последният алгоритъм с стандартен метод за разделяне на траекториите (e-a,split), само с разделяне на траекториите (split), както и чрез повишаване на температурата на частиците в инжектиращия контакт от $300K$ на $450K$. Показан е и интервалът, в който грешката е под 5 процента.

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. Предимствата на въведения в секция 1.6 формализъм за моделирането на такива структури са резюмирани по-долу.

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. Така Вигнеровият подход позволява по естествен начин да се разглеждат отворени системи

(обмяната на частици с околната среда е всъщност първата характеристика на един работещ прибор) при стационарни или преходни условия или в режим на отклик към малък сигнал [75].

Първите приложения на този формализъм за симулации на прибори, [76, 15, 77], започват преди повече от 20 години с изследвания на балистичен транспорт с помощта на кохерентната функция на Вигнер. Симулират се едномерни структури с помощта на детерминистичен подход, като се решават проблеми, свързани с коректната постановка на граничните условия, осигуряващи сходимост на изчислителната задача, както и свързани с дискретизационните схеми, за които ще стане дума по-нататък. По-късно подходът е усъвършенстван като се разработват самосъгласувани схеми, включващи уравнението на Поасон [75]. 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 [13]. Отчитането на дисипативните процеси се оказва необходимост, заради която първоначално се използват феноменологични модели на основата на приближението на време на релаксация [78, 75, 79, 80]. Включването на Болцмановия оператор на разсейване в уравнението на Вигнер [81] се предлага отначало като едно априорно предположение което може да е 'адекватно на дадено ниво' [13].

Може ли класическият модел на Болцманово разсейване да бъде включен в квантовата картина на Вигнеров транспорт? И ако може, то кои са физическите 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. 1.3;

(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 нарушаване на закона за запазване на енергията (Collisional Broadening), [82], [83], [84], [85], както и ефекта от действието на полето в процеса на разсейване (Intra Collisional Fied Effect), [86], [87], [88] [14] [89]. 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 [90], уравненията на Levinson [91] и Barker-Ferry [92] и други [93], [94].

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 [83]. 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 [84, 14]. 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 [95]: с помощта на анализ, използващ малък параметър и водещ до делта функцията и първата ѝ поправка към уравнението. Необходимо усло-

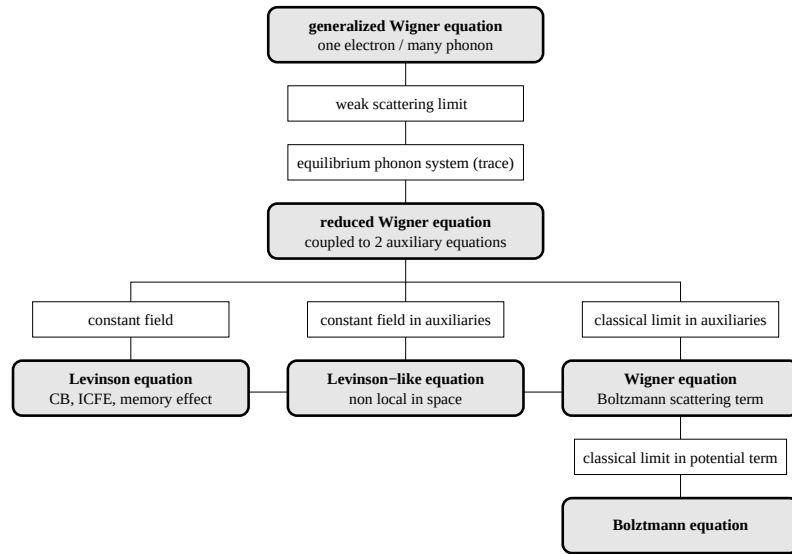
вие за отпадане на поправката е произведението от скалите на времето и енергията на фононите да стане много по-голямо от константата на Планк. Поради това, при големи еволюционни времена квантовите ефекти във взаимодействието между електрони и фонони може да бъдат пренебрегнати. Съответно ICFE не може да бъде наблюдаван при стационарен транспорт, независимо от силата на полето [96], 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 нанометра 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 [14], а наскоро за алтернативния случай на разсейване от йонизирани примеси от Querlioz et al [97], [20].

Подходът, използван в [14], позволява систематичен анализ на приближенията, както и обединяването им в йерархията от модели, както е показано на Фиг. 3.1. Йерархията започва от обобщената за цялата система функция на Вигнер [16], 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 [98]. 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 [19].

Изложението в тази глава следва конструкция, при която първо са изведени



Фигура 3.1: Йерархия кинетични модели

уравненията на Levinson и Barker-Ferry за квантова жица. Използвани са основни принципи на квантовата механика, приложени към система от физически допускания, на които след това е направен детайлен анализ. Показани са и числени резултати, които демонстрират ефектите на CB, CR и ICFE. Те са изследвани в случай на силно електрично поле и ултрабърз транспорт в полупроводници в [99, 100, 101, 96, 14, 19] и в случай на фотоиндуцирани полупроводници в [102, 84]. 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, ко-

ято 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 физическите величини.

3.1 Еволюция в квантова жица

3.1.1 Постановка на задачата

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. Освен това плътността на носителите е малка, така че те се разглеждат невзаимодействащи и е валидно едноелектронното приближение. Описанието на системата се осигурява и от електронните, и от фононните степени на свобода (1.11), което води до обобщаване на функцията и уравнението на Вигнер както следва.

Хамилтонианът на системата

$$H = H_0 + V + H_p + H_{e-p} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} + i\hbar \sum_{\mathbf{q}} F(\mathbf{q})(a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - a_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}) \quad (3.1)$$

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 (1.6) на създаване и унищожение на фонон от вид $\mathbf{q}$, $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ е

енергията, като тук е мястото да се отбележи, че членът $1/2$ в (1.7) е отчетен чрез преместване на нулата в скалата на енергията, и последно $F(\mathbf{q})$ е функция, която зависи от вида на фононите. Състоянието на фононната подсистема се описва от 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 (1.11) 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 . При тези предположения е валидно следното представяне:

$$H_0 + V(\mathbf{r}) = H_{\perp} + H_z = H_{0\perp} + V_{\perp} + H_{0z} + V(z),$$

където

$$H_{\perp}\Psi = E_{\perp}\Psi; \quad V(z) = -eEz; \quad |\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}_{\perp}\rangle|z\rangle.$$

Обобщената електрон-фононна функция на Вигнер се получава от оператора на плътността $\hat{\rho}_t$:

$$f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz' \int d\mathbf{r}_{\perp} e^{-ip_z z'/\hbar} \langle z + \frac{z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\} | \hat{\rho}_t | \{n'_{\mathbf{q}}\}, z - \frac{z'}{2} \rangle.$$

Това позволява да се раздели задачата на надлъжна (z) и напречна компонента на състоянието: $\hat{\rho}_t = |\Psi\rangle\langle\Psi| \hat{\rho}_{tz}$:

$$\langle \mathbf{r}, \{n_{\mathbf{q}}\} | \hat{\rho}_t | \{n'_{\mathbf{q}}\}, \mathbf{r}' \rangle = \Psi^*(\mathbf{r}'_{\perp}) \Psi(\mathbf{r}_{\perp}) \rho(z, z', \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t).$$

От условието за нормираност на Ψ следва:

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

3.1.2 Обобщено уравнение на Вигнер

Уравнението на фон-Нойман (1.38) добива вид:

$$\frac{\partial f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t)}{\partial t} = \int \frac{dz'}{i2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}_{\perp} e^{-ip_z z'/\hbar} \langle z + \frac{z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\} | \langle \mathbf{r}_{\perp} | [H, \hat{\rho}_t]_- | \mathbf{r}_{\perp} \rangle | \{n'_{\mathbf{q}}\}, z - \frac{z'}{2} \rangle.$$

За удобство означаваме дясната част на уравнението с $WT(H)$. Следващите стъпки оценяват $WT(H)$ за всяка компонента на Хамилтониана (3.1), което накрая води до обобщеното уравнение на Вигнер (GWF) [16, 103, 104].

$WT(H_{\perp})$ дава нула за основното състояние в напречната равнина. $WT(H_{0z})$ и $WT(-eEz)$ се оценяват с помощта на интегриране по части:

$$WT(H_{0z}) = -\frac{p_z}{m} \frac{\partial f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t)}{\partial z},$$

$$WT(-eEz) = -eE \frac{\partial f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t)}{\partial p_z}.$$

Приносът от енергията на невзаимодействащите фонони е:

$$WT(H_p) = \frac{1}{i\hbar} \left(\epsilon(\{n_{\mathbf{q}}\}) - \epsilon(\{n'_{\mathbf{q}}\}) \right) f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t),$$

където $\epsilon(\{n_{\mathbf{q}}\}) = \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}}$. $WT(H_{e-p})$ се състои от 4 члена, произлизащи от комутатора на оператора на плътността с фононните оператори на раждане и унищожение. При оценката им се използва спектралното разложение на единичната:

$$1 = \int dz'' |z''\rangle \langle z''| \int d\mathbf{r}_{\perp}'' |\mathbf{r}_{\perp}''\rangle \langle \mathbf{r}_{\perp}''|.$$

Сумационният индекс в H_{e-p} , (3.1) се замества с $\mathbf{q}'$, тъй като променливата $\mathbf{q}$ е вече използвана при фононните базисни функции.

Първият принос I към $WT(H_{e-p})$ се оценява като:

$$\int d\mathbf{r}_{\perp} \int \frac{dz'}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r}'' e^{-ip_z z'/\hbar} \langle z + \frac{z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\} | \langle \mathbf{r}_{\perp} | a_{\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}''} | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \hat{\rho}_t | \mathbf{r}_{\perp} \rangle | \{n'_{\mathbf{q}}\}, z - \frac{z'}{2} \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} \int d\mathbf{r}_{\perp} e^{i\mathbf{q}'_{\perp} \mathbf{r}_{\perp}} |\Psi(\mathbf{r}_{\perp})|^2 \int dz' e^{-ip_z z' / \hbar} e^{iq'_z(z + \frac{z'}{2})} \times \\
&\quad \langle z + \frac{z'}{2}, \{n_1, \dots, n_{\mathbf{q}'} + 1, \dots\} | \hat{\rho}_{tz} | \{n'_{\mathbf{q}}\}, z - \frac{z'}{2} \rangle = \\
&\sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t),
\end{aligned}$$

където G означава Фурие трансформацията на $|\Psi(\mathbf{r}_{\perp})|^2$. Използва се още нормализацията на базиса на позицията: $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, както и фактът че $a_{\mathbf{q}}$ става оператор на раждане, ако действа на функцията в ляво. Последно, въведено е и съкращението $\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^{\pm} = \{n_1, \dots, n_{\mathbf{q}'} \pm 1, \dots\}$. По такъв начин $\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+$ ($\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-$) е състояние на фононната подсистема, получена от $\{n_{\mathbf{q}}\}$ чрез увеличаване (намаляване) на броя фонони от вид $\mathbf{q}'$ с единица. Аналогично се оценяват и:

$$\begin{aligned}
II &= - \int d\mathbf{r}_{\perp} \int \frac{dz'}{2\pi\hbar} e^{-ip_z z' / \hbar} \langle z + \frac{z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\} | \langle \mathbf{r}_{\perp} | a_{\mathbf{q}'}^{\dagger} e^{-i\mathbf{q}' \mathbf{r}''} \hat{\rho}_t | \mathbf{r}_{\perp} \rangle | \{n'_{\mathbf{q}}\}, z - \frac{z'}{2} \rangle \\
&= - \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z} f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t).
\end{aligned}$$

Тук трябва да се отбележи, че: половината от z компонентата на импулса на фонона се добавя към електронният импулс p_z ; знакът на q'_z е обратен на знака на аргумента в съответната експонента.

В следващите два члена операторите на раждане и унищожение на фонони променят десните базисни функции:

$$\begin{aligned}
III &= - \int d\mathbf{r}_{\perp} \int \frac{dz'}{2\pi\hbar} e^{-ip_z z' / \hbar} \langle z + \frac{z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\} | \langle \mathbf{r}_{\perp} | \hat{\rho}_t a_{\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}' \mathbf{r}''} | \mathbf{r}_{\perp} \rangle | \{n'_{\mathbf{q}}\}, z - \frac{z'}{2} \rangle \\
&= - \sqrt{n'_{\mathbf{q}'}} G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z} f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, t).
\end{aligned}$$

Тук знакът на фононния импулс, който се добавя към p_z , е същият както на аргумента на експонентата. И последно, четвъртият член е:

$$\begin{aligned}
IV &= \int d\mathbf{r}_{\perp} \int \frac{dz'}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r}'' e^{-ip_z z' / \hbar} \langle z + \frac{z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\} | \langle \mathbf{r}_{\perp} | \hat{\rho}_t a_{\mathbf{q}'}^{\dagger} e^{-i\mathbf{q}' \mathbf{r}''} | \mathbf{r}_{\perp} \rangle | \{n'_{\mathbf{q}}\}, z - \frac{z'}{2} \rangle \\
&= \sqrt{n'_{\mathbf{q}'}} + 1 G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t).
\end{aligned}$$

Обединяването на тези резултати дава уравнението на движение на GWF в квантовата жица:

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) = \\
 & \frac{1}{i\hbar} \left(\epsilon(\{n_{\mathbf{q}}\}) - \epsilon(\{n'_{\mathbf{q}}\}) \right) f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) + \\
 & \sum_{\mathbf{q}'} F(\mathbf{q}') \left\{ \begin{aligned}
 & G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) \\
 & - G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} } f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) \\
 & - G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'} } f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, t) \\
 & + G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t) \end{aligned} \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

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 (3.2), защото електронната функция на

Вигнер се въвежда от следата:

$$f_w(z, p_z, t) = \sum_{\{n_{\mathbf{q}}\}} f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \quad (3.3)$$

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 [90]. 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, определен от разликата в честотите на лявото и дясно фононно състояние. Както е показано в Допълнение (3.1.8), този член определя осилациите във времето на GWF. Тази разлика ще бъде основен аргумент при сравняване на последователните членове в системата. Според този критерий основно е уравнението за диагоналните елементи FOD:

3.1.3 Уравнение за диагоналните елементи

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \\ & \sum_{\mathbf{q}'} \left\{ F'_G e^{iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \right. \\ & - F'_G{}^* e^{-iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \\ & - F'_G e^{iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, t) \\ & \left. + F'_G{}^* e^{-iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t) \right\}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

където $F'_G = F(\mathbf{q}')G(\mathbf{q}'_{\perp})$. Към него се предполага начално условие, отговарящо на невзаимодействащи подсистеми, при което фононите са в равновесие.

Поради липсата на имагинерен член диагоналните елементи нямат осцилаторното поведение, което, като ще бъде показано, е типично за недиагоналните елементи. Всеки диагонален елемент е свързан с недиагонални елементи от първи порядък FOD, които са диагонални по всички фононни координати, освен тези, отговарящи на сумационния индекс $\mathbf{q}'$: отнася се за четирите съседа на $n_{\mathbf{q}'}$, $n_{\mathbf{q}'}$ с координати $n_{\mathbf{q}'} \pm 1$, $n_{\mathbf{q}'}$ и $n_{\mathbf{q}'}$, $n_{\mathbf{q}'} \pm 1$.

Достатъчно е да бъдат разгледани само съдържащите се в първите два члена FOD елементи: от дефиницията на f_w и (3.4) следва, че третият и четвъртият член са комплексно спрегнати съответно на втория и първия член. Съответните уравнения за FOD елементите $f_{FOD}^{\pm} = f_w(\cdot\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^{\pm}, \{n_{\mathbf{q}}\}\cdot)$ въвеждат недиагонални елементи от втори порядък.

Нататък се изследва възможността за прекъсване на йерархията, като се пренебрегнат недиагоналните елементи от втори и по-висок порядък.

3.1.4 Затваряне на ниво FOD елементи

За да се разграничат членовете, които остават, е необходимо да се оценят подробно всички алгебрични комбинации, при които FOD елементите се изразяват обратно чрез диагонални елементи. Ще бъде доказана следната теорема:

Теорема 3.1.1 *Прекъсването на йерархията на ниво FOD елементи заедно с предположението за равновесни фонони води до следното квантово-кинетично уравнение за електронната функция на Вигнер:*

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m}\nabla_z + eE\nabla_{p_z}\right) f_w(z, p_z, t) = \sum_{\mathbf{q}'_{\perp}, p'_z} \int_0^t dt' \quad (3.5)$$

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

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

$$+(n(\mathbf{q}) + 1)\cos\left(\int_{t'}^t \frac{(\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p'_z(\tau)) + \hbar\omega_{\mathbf{q}'}) d\tau}{\hbar}\right)\Bigg], \quad (3.6)$$

$n(\mathbf{q})$ 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. Физичните и числени аспекти на уравнението ще бъдат дискутирани в секция (3.1.6).

Доказателство: За удобство въвеждаме съкращението $F''_G = F_G(\mathbf{q}'')$. Уравненията за движение за елементите f_{FOD}^+ и f_{FOD}^- , получени от (3.2), може да бъдат обединени както следва:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z \mp \frac{\hbar q'_z}{2}}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \pm i\omega_{\mathbf{q}'} \right) f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^{\pm}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \\ & \sum_{\mathbf{q}''} \left\{ F''_G e^{iq''_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}''} + 1} f_w(z, p_z \mp \frac{\hbar(q'_z \pm q''_z)}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^{\pm}\}_{\mathbf{q}''}^{\pm}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \right. \\ & - F''_G e^{-iq''_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}''}} f_w(z, p_z \mp \frac{\hbar(q'_z \mp q''_z)}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^{\pm}\}_{\mathbf{q}''}^{\mp}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \\ & - F''_G e^{iq''_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}''}} f_w(z, p_z \mp \frac{\hbar(q'_z \mp q''_z)}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^{\pm}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^{\mp}, t) \\ & \left. + F''_G e^{-iq''_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}''} + 1} f_w(z, p_z \mp \frac{\hbar(q'_z \pm q''_z)}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^{\pm}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^{\pm}, t) \right\}. \quad (3.7) \end{aligned}$$

Отделните уравнения в тази система са означени съответно като (3.7 $^{\pm}$). Следващото приближение пренебрегва всички SOD елементи в ляво. Единствените

елементи в (3.7⁺), които не са от втори порядък, се получават от втория и четвъртия член в дясно в случая, когато $\mathbf{q}'' = \mathbf{q}'$. В частност трябва да се отбележи, че факторът $\sqrt{n_{\mathbf{q}''}}$ става $\sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1}$, тъй като броят на фононите от вид $\mathbf{q}'$ се увеличава с единица. Подобно, в (3.7⁻) първият и третият член в дясно стават диагонални елементи в случая, в който $\mathbf{q}'' = \mathbf{q}'$. Съответно факторът $\sqrt{n_{\mathbf{q}''} + 1}$ става $\sqrt{n_{\mathbf{q}'}}$, понеже броят на фононите от вид $\mathbf{q}'$ се намалява с единица. Ще бъдат използвани интегралните форми на така приближените уравнения, които се получават с помощта на характеристиките на оператора на Лиувил в лявата част на (3.7). Това са Нютоновите траектории (1.3), които в едномерния случай имат вид (3.44), и са инициализирани от стойностите на временните и фазови променливи, идентифициращи левите страни на (3.7[±]). Така съответните траектории са инициализирани от $(z, p_z \mp \frac{\hbar q'_z}{2}, t)$:

$$\begin{aligned} z^\mp(t') &= z - \frac{1}{m} \int_{t'}^t p_z^\mp(\tau) d\tau, \\ p_z^\mp(t') &= p_z \mp \frac{\hbar q'_z}{2} - eE(t - t') = p_z(t') \mp \frac{\hbar q'_z}{2}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Началните условия за $f_{FOD}^\pm$ са нула поради това, че в началото електронната и фононна подсистеми са невзаимодействащи.

$$\begin{aligned} f_w(z, p_z \mp \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^\pm, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \\ F_G^\mp(\mathbf{q}') \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}} \int_0^t dt' e^{\mp i\omega_{\mathbf{q}'}(t-t')} e^{\mp i q'_z z^\mp(t')} \\ \left\{ \mp f_w(z^\mp(t'), p_z(t'), \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') \right. \\ \left. \pm f_w(z^\mp(t'), p_z(t') \mp \hbar q'_z, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^\pm, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^\pm, t') \right\}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

където $F_G^+ = F_G$, $F_G^- = F_G^*$, и $p_z(t') = p_z - eE(t - t')$ в съответствие с (3.8).

След заместване на (3.9) в (3.4) се получава уравнение, което съдържа само диагонални елементи:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = 2Re \left(\sum_{\mathbf{q}'} |F_G(\mathbf{q}')|^2 \left\{ \right. \right. \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^t dt' (n_{\mathbf{q}'} + 1) e^{iq'_z z} e^{-i\omega_{\mathbf{q}'}(t-t')} e^{-iq'_z z^-(t')} \\
& \left(f_w(z^-(t'), (p_z - \hbar q'_z)(t'), \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+ \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t') - f_w(z^-(t'), p_z(t'), \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') \right) \\
& - \int_0^t dt' n_{\mathbf{q}'} e^{-iq'_z z} e^{i\omega_{\mathbf{q}'}(t-t')} e^{iq'_z z^+(t')} \\
& \left(f_w(z^+(t'), p_z(t'), \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') - f_w(z^+(t'), p_z(t') + \hbar q'_z, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^- \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, t') \right) \Bigg\}.
\end{aligned}$$

С помощта на (3.8) аргументите на експонентите може да се преобразуват както следва:

$$\begin{aligned}
& \pm q'_z z \mp \omega_{\mathbf{q}'}(t - t') \mp q'_z z^\mp(t') = \\
& - \int_{t'}^t \left(\frac{q'_z}{m} \left(p_z - eE(t - \tau) \mp \frac{\hbar q'_z}{2} \right) \mp \omega_{\mathbf{q}'} \right) d\tau = \\
& \mp \int_{t'}^t \frac{1}{\hbar} (\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p_z(\tau) \mp \hbar q'_z) \mp \hbar \omega_{\mathbf{q}'}) d\tau.
\end{aligned}$$

Удобни са следните модификации. Като се вземе под внимание четността на $\omega_{\mathbf{q}'}$ и F_G като функции на фононната променлива, може да се смени знакът на $\mathbf{q}'$ в последния ред на уравнение (3.10). За удобство се въвежда и променливата $p'_z = p_z - \hbar q'_z$.

Електронната функция на Вигнер (3.3) се получава с помощта на 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:

$$f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') = f_w(z, p_z, t') \prod_{\mathbf{q}} P_{eq}(n_{\mathbf{q}}). \quad (3.11)$$

$P(n_{\mathbf{q}})$ е равновесната вероятност (1.8) за разпределение на броя на фононите $n_{\mathbf{q}}$ от вид $\mathbf{q}$. Средният или равновесен брой фонони $n(\mathbf{q})$ се получава от разпределението на Бозе-Айнщайн,

$$n(\mathbf{q}) = \sum_{n_{\mathbf{q}}=0}^{\infty} n_{\mathbf{q}} P(n_{\mathbf{q}}); \quad \sum_{n_{\mathbf{q}}=0}^{\infty} P(n_{\mathbf{q}}) = 1. \quad (3.12)$$

което има следните свойства:

$$n(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} = \sum_{n_{\mathbf{q}}} (n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) P(n_{\mathbf{q}} \pm 1). \quad (3.13)$$

Следва заместване на (3.11) в модифицираното уравнение (3.10). Следата по фононните координати води до елиминирането на последните и заместването им с числата (3.13). ■

Отчитането на следващото ниво на приближение в прекъсване на йерархията усложнява значително изчисленията, но позволява да се отчете един важен физически параметър, свързан с крайното време на живот на носителите в дадено квантово състояние в резултат от взаимодействието с фононите.

3.1.5 Затваряне на ниво SOD елементи

Теорема 3.1.2 *Прекъсването на йерархията на ниво SOD елементи заедно с предположението за равновесни фонони, които при това имат постоянна честота, води до следното квантово-кинетично уравнение за електронната функция на Вигнер:*

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) f_w(z, p_z, t) = \\ & \sum_{\mathbf{q}'_{\perp}, p'_z} \int_0^t dt' \left\{ S(p_z, p'_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') f_w(z^-(t'), p_z^-(t'), t') \right. \\ & \left. - S(p'_z, p_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') f_w(z^-(t'), p_z^-(t'), t') \right\}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

където

$$\begin{aligned} S(p_z, p'_z, \mathbf{q}'_{\perp}, t, t') = & 2|F_G(\mathbf{q}')|^2 e^{-\int_{t'}^t \bar{\gamma} \left(\left(\frac{p_z + p'_z}{2} \right)(\tau) \right) d\tau} \times \\ & \left[n(\mathbf{q}) \cos \left(\int_{t'}^t \frac{(\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p'_z(\tau)) - \hbar \omega_{\mathbf{q}'}) d\tau}{\hbar} \right) + \right. \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$(n(\mathbf{q}) + 1) \cos \left(\int_{t'}^t \frac{(\epsilon(p_z(\tau)) - \epsilon(p'_z(\tau)) + \hbar\omega_{\mathbf{q}'}) d\tau}{\hbar} \right) \Bigg],$$

u

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}(p) = & \sum_{\mathbf{q}''} 2\pi\hbar |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \\ & [(n(\mathbf{q}'') + 1) \delta(\epsilon(p) - \epsilon(p - \hbar q''_z) - \hbar\omega) \\ & + n(\mathbf{q}'') \delta(\epsilon(p) - \epsilon(p + \hbar q''_z) + \hbar\omega)] \end{aligned} \quad (3.16)$$

е едномерният еквивалент на сумарната скорост на Болцманово разсейване (1.12).

Доказателство: Следващият анализ има за цел да намери критерии, по които да запази и някои определени SOD елементи в дясната част на уравнение (3.7[±]).

3.1.5.1 Приближение на уравнението за f_{FOD}^+

Започваме с уравнението (3.7⁺), в което може да бъдат идентифицирани четири типа SOD елементи: f_{SOD}^{++} , f_{SOD}^{+-} , $f_{SOD}^{+,-}$ и $f_{SOD}^{+,+}$. В така избраните означения запетайката отделя левия от десния базис, така че ++, означава два допълнителни фонона от тип $\mathbf{q}'$ и $\mathbf{q}''$ в левия базис и така нататък. f_{SOD}^{+-} , $f_{SOD}^{+,+}$, от които се получават единствените диагонални елементи, бяха вече отчетени по-горе. Остава да се анализират SOD елементите в първия и третия член: f_{SOD}^{++} и $f_{SOD}^{+,-}$. В левия базис те съдържат два фонона повече от десния базис. Съответните уравнения на движение съдържат честотата $i2\omega$, добавена към оператора на Лиувил в ляво. В сравнение с диагоналните елементи тези SOD елементи осцилират бързо във времето и формалното прилагане на RPA позволява те да бъдат пренебрегнати, така че да останат само вторият и четвъртият член, които трябва да бъдат анализирани за допълнителни корекции към диагоналните членове. Внимателният анализ обаче показва, че и членовете f_{SOD}^{++} и $f_{SOD}^{+,-}$

дават своите приноси: коректно е да се сравняват елементи, свързани в уравнение. Прескачания на нива в йерархията, като например сравняване на SOD с диагонални елементи, може да доведе до грешни резултати.

По-долу се оценяват последователно приносите от SOD елементите към дясната част на уравнение (3.7⁺). Съответните уравнения на движение изобщо въвеждат недиагонални елементи от трети порядък. Следва се същата стратегия на приближение на десните страни на тези уравнения. Тоест, разглеждат се само специалните случаи, в които недиагоналните елементи от трети порядък се редуцират до SOD елементи. След това уравненията за SOD елементите се решават и заместват в (3.7⁺). Получава се уравнение, което съдържа само FOD елементи. Последното, заедно със съответното уравнение, получено от (3.7⁻) се използват за затваряне на системата (3.4). Едно необходимо предположение е за постоянна честота на фононите $\omega_{\mathbf{q}} = \omega$, което до голяма част е изпълнено за оптичната част от техния спектър.

Принос от f_{SOD}^{++} Уравнението на движение на f_{SOD}^{++} следва от (3.2):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} + i2\omega \right) f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \\ + \sum_{\mathbf{q}'''} \left\{ F_G(\mathbf{q}''') e^{iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z + q_z''')}{2}, \{\{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^+\}_{\mathbf{q}'''}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \right. \\ - F_G^*(\mathbf{q}''') e^{-iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} } f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z - q_z''')}{2}, \{\{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^+\}_{\mathbf{q}'''}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \quad (3.17) \\ - F_G(\mathbf{q}''') e^{iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} } f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z - q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'''}, t) \\ \left. + F_G^*(\mathbf{q}''') e^{-iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z + q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'''}, t) \right\}. \end{aligned}$$

Уравнението се апроксимира, като се пренебрегват всички членове освен тези, които съдържат *FOD* елементи. Такива са само два члена в дясно, а именно вторият и четвъртият, при условие, че $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}''$ или $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}'$. Апроксимираното уравнение се интегрира по траектория (3.8), инициализирана от $(z, p_z -$

$\frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}, t)$ идентифицираща оператора на Лиувил в ляво на (3.17). Припомняме, че свободният член е нула поради начално невзаимодействащите подсистеми.

$$\begin{aligned}
F_G(\mathbf{q}'') e^{iq''_z z} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \int_0^t dt' |F_G(\mathbf{q}'')|^2 e^{-i2\omega(t-t')} \left(\right. \\
\left. -e^{iq''_z z} e^{-iq''_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') \right. \\
\left. - \frac{F_G^*(\mathbf{q}')}{F_G^*(\mathbf{q}'')} e^{iq''_z z} e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q''_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') \right. \\
\left. + e^{iq''_z z} e^{-iq''_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''}} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar(q'_z + 2q''_z)}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+, t') \right. \\
\left. + \frac{F_G^*(\mathbf{q}')}{F_G^*(\mathbf{q}'')} e^{iq''_z z} e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar(2q'_z + q''_z)}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t') \right). \quad (3.18)
\end{aligned}$$

Уравнение (3.18) може да бъде заместено в (3.7⁺), така че дясната му страна се явява като корекция, добавена към дясната страна на (3.7⁺). Може да се види, че докато лявата страна на (3.7⁺) зависи от $i\omega$, членовете от корекцията зависят от $e^{-i2\omega(t-t')}$. Затова удобна за анализ е интегралната форма на уравнението, която се оказва (3.9⁺) с допълнителни членове в дясно, произлизащи от (3.18). Корекциите от тези членове са адитивни, поради което ще бъдат оценени последователно както следва: започваме с приноса от първия член в (3.18), които може да бъде записан така, че аргументите в експонентите, зависещи от q''_z , да се изразят като електронни енергии:

$$\begin{aligned}
q''_z z - q''_z z(t') = \\
\int_{t'}^t \frac{\epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q'_z}{2}) - \epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q'_z}{2} - \hbar q''_z) d\tau}{\hbar}. \quad (3.19)
\end{aligned}$$

За удобство означаваме разликата на енергиите в числителя с $\Delta\epsilon(\tau)$. Разглежданият член дава следния принос към дясната страна на (3.9⁺):

$$\begin{aligned}
f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \dots - \sum_{\mathbf{q}''} (n_{\mathbf{q}''} + 1) \\
|F_G(\mathbf{q}'')|^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-i\omega(t-t')} e^{-i2\omega(t'-t'')} \times \quad (3.20)
\end{aligned}$$

$$e^{i \int_{t''}^{t'} \frac{\Delta \epsilon(\tau) d\tau}{\hbar}} f_w(z(t', t''), p_z(t'') - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t''),$$

където $z(t', t'')$ се изразява с помощта на (3.8):

$$z(t', t'') = z^-(t') - \frac{1}{m} \int_{t''}^{t'} (p_z(\tau) - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}) d\tau. \quad (3.21)$$

Уравнение (3.20) е във форма, удобна за анализ на зависимостта от времевите променливи. Интегралите по време може да бъдат трансформирани с помощта на тъждеството: $\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' = \int_0^t dt'' \int_{t''}^t dt'$:

$$\begin{aligned} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-i\omega(t-t')} e^{-i2\omega(t'-t'')} e^{i \int_{t''}^{t'} \frac{\Delta \epsilon(\tau) d\tau}{\hbar}} f_w = \\ \int_0^t dt'' e^{-i\omega(t-t'')} \int_{t''}^t dt' e^{i \int_{t''}^{t'} \frac{(\Delta \epsilon(\tau) - \hbar\omega) d\tau}{\hbar}} f_w. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Сега вътрешният интеграл може да се апроксимира с помощта на класическата граница, известна във физиката още като границата $\hbar \rightarrow 0$. Последната е съкратено означение на определени съотношения в скалите на процесите, дискутирани в Допълнение (3.1.9), и се формулира както следва:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{i \frac{\epsilon \tau}{\hbar}} = \pi \delta(\epsilon) + v.p. \frac{i}{\epsilon}.$$

Тази граница удобно определя t' да е равно на t'' , така че $z(t', t'')$ в f_w , (3.20), става $z^-(t'')$. Ако се пренебрегне члена с главната стойност $v.p.$, (3.20) се трансформира до:

$$\begin{aligned} f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \\ \dots - \int_0^t dt'' e^{-i\omega(t-t'')} \sum_{\mathbf{q}''} (n_{\mathbf{q}''} + 1) |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \pi \hbar \times \\ \delta \left(\epsilon \left(p_z(t'') - \frac{\hbar q'_z}{2} \right) - \epsilon \left(p_z(t'') - \frac{\hbar q'_z}{2} - \hbar q''_z \right) - \hbar \omega \right) \\ f_w(z(t''), p_z(t'') - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t''). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Това уравнение е от вида на (3.46), което заедно с уравнение (3.48) имат обща диференциален форма от вида (1.23), Допълнение (3.1.8). Или еквивалентно, производната по време на (3.23) води до (3.7⁺) с един допълнителен член $\gamma_e f_{FOD}^+$, появяващ се в дясната страна на уравнението. Ако се трансформира в ляво, този член води до корекцията:

$$\gamma_e(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}) = \sum_{\mathbf{q}''} (n_{\mathbf{q}''} + 1) |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \quad (3.24)$$

$$\pi \hbar \delta \left(\epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} \right) - \epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} - \hbar q''_z \right) - \hbar \omega \right)$$

добавена към оператора на Лиувил в скобите на (3.7⁺). Трябва да се отбележи, че сумирането по $\mathbf{q}''$ дава само положителни приноси към γ_e . Имагинерната част с главната стойност води до промяна на честотата на фононите - ефект, известен като поларонна ренормализация на енергиите. Тук този ефект се пренебрегва. Може да бъде показано, че станалите членове в (3.18) се пренебрегват с помощта на RPA [19]

Много близък до горния е и анализът на приноса на $f_{SOD}^{+,-}$.

Принос от $f_{SOD}^{+,-}$ Следвайки същият подход, в уравнението за $f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z - q''_z)}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^-, t)$ се запазват само FOD елементи в дясната страна. Уравнението се интегрира с помощта на траектория, инициализирана от $(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z - q''_z)}{2}, t)$:

$$F_G(\mathbf{q}'') e^{iq''_z z} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z - q''_z)}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^-, t) = \int_0^t dt' |F_G(\mathbf{q}'')|^2 e^{-i2\omega(t-t')} \left(\right.$$

$$- e^{iq''_z z} e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''}} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar(q'_z - 2q''_z)}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^-, t')$$

$$- \frac{F_G^*(\mathbf{q}')} {F_G^*(\mathbf{q}'')} e^{iq''_z z} e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') + \frac{\hbar q''_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^-, t')$$

$$+ e^{iq''_z z} e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''}} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t')$$

$$+ \frac{F_G^*(\mathbf{q}')} {F_G^*(\mathbf{q}'')} e^{iq''_z z} e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar(2q'_z - q''_z)}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^-\}_{\mathbf{q}'}^+, t') \Bigg).$$

Може да се покаже, че само третият член оцелява след прилагане на RPA. С помощта на конкретната траектория $z(t')$, аргументът на експонентата $q_z''z - q_z''z(t')$ може да бъде представен като:

$$- \int_{t'}^t \frac{\epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q_z'}{2}) - \epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q_z'}{2} + \hbar q_z'')}{\hbar} d\tau. \quad (3.25)$$

Този израз се различава от (3.19) по водещия знак и знака на q_z'' . Както преди разликата в енергиите се означава като $\Delta\epsilon(\tau)$ и се оценява приноса към интегралната форма на (3.7⁺). Полученият израз се отличава от (3.20) по следното: (i) множителят $(n_{\mathbf{q}''} + 1)$ се замества с $n_{\mathbf{q}''}$; (ii) $\Delta\epsilon(\tau)$ се актуализира от (3.25); (iii) $z(t', t'')$ се актуализира от (3.21) като се сменя знака на q_z'' от плюс на минус. Модифицирането на интегралите по времето е точно по (3.22). Прилагането на класическата граница, както и аргументите при извода на (3.24), водят до члена:

$$\gamma_a(p_z - \frac{\hbar q_z'}{2}) = \sum_{\mathbf{q}''} n_{\mathbf{q}''} |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \pi \hbar \delta \left(\epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q_z'}{2} \right) - \epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q_z'}{2} + \hbar q_z'' \right) + \hbar \omega \right), \quad (3.26)$$

които трябва да бъде добавен към оператора на Лиувил в (3.7⁺). Фононната енергия сега се добавя към $\Delta\epsilon$ поради знака минус пред (3.25),

Корекция от f_{SOD}^{+-} . Вторият член в (3.7⁺) вече допринася с диагонален елемент при затварянето на системата на първо ниво. Сега трябва да се изследва каква допълнителна корекция $\delta f_{\text{SOD}}^{+-}$ може да бъде получена на ниво SOD елементи. Очевидно $\delta f_{\text{SOD}}^{+-}$ се дефинира като:

$$(1 - \delta_{\mathbf{q}', \mathbf{q}''}) f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}, t),$$

така че съответното уравнение на движение предполага $\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}''$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'')}{2}}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) \delta f_{\text{SOD}}^{+-}(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) =$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mathbf{q}'''} \left\{ F_G(\mathbf{q}''') e^{iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'' + q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \right. \\
& - F_G^*(\mathbf{q}''') e^{-iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} } f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'' - q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \\
& - F_G(\mathbf{q}''') e^{iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} } f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'' - q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'''}^-, t) \\
& \left. + F_G^*(\mathbf{q}''') e^{-iq_z'''} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'' + q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'''}^+, t) \right\}. \quad (3.27)
\end{aligned}$$

Четиричлените в дясно съдържат FOD елементи, които се получават съответно от комбинациите $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}''$, $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}'$, $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}''$, $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}'$. В тези случаи $n_{\mathbf{q}'''}$ заема стойностите на съответния брой фонони в $\mathbf{q}'$ or $\mathbf{q}''$. Така редуцираното уравнение се интегрира по траекторията $(z(t'), p_z(t'))$, инициализирана от $(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'')}{2}, t)$. Корекцията δf_{SOD}^{+-} се изразява чрез FOD елементи както следва:

$$\begin{aligned}
& F_G^*(\mathbf{q}'') e^{-iq_z''} \delta f_{SOD}^{+-}(z, p_z - \frac{\hbar(q_z' - q_z'')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \int_0^t dt' |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \left(\right. \\
& + e^{-iq_z''} e^{iq_z'' z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''}} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q_z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') \\
& - \frac{F_G^*(\mathbf{q}')}{F_G(\mathbf{q}'')} e^{-iq_z''} e^{-iq_z' z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') + \frac{\hbar q_z''}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') \\
& - e^{-iq_z''} e^{iq_z'' z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''}} f_w(z(t'), p_z(t') + \hbar q_z'' - \frac{\hbar q_z'}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^-\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^-, t') \\
& \left. + \frac{F_G^*(\mathbf{q}')}{F_G(\mathbf{q}'')} e^{-iq_z''} e^{-iq_z' z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \hbar q_z' + \frac{\hbar q_z''}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t') \right). \quad (3.28)
\end{aligned}$$

Приносът на първият член в дясно към (3.9) се изразява с помощта на $\Delta\epsilon(\tau)$:

$$q_z'' z(t') - q_z'' z = \int_{t'}^t \frac{\epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q_z'}{2}) - \epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q_z'}{2} + \hbar q_z'')}{\hbar} d\tau, \quad (3.29)$$

както следва:

$$f_w(z, p_z - \frac{\hbar q_z'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = \dots - \sum_{\mathbf{q}''} n_{\mathbf{q}''} |F_G''|^2$$

$$\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-i\omega(t-t')} e^{i \int_{t''}^{t'} \frac{\Delta\epsilon(\tau)d\tau}{\hbar}} \quad (3.30)$$

$$f_w(z(t', t''), p_z(t'')) - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t''),$$

където

$$z(t', t'') = z^-(t') - \frac{1}{m} \int_{t''}^{t'} (p_z(\tau) - \frac{\hbar(q'_z - q''_z)}{2}) d\tau. \quad (3.31)$$

Интегралите по време се преподреждат до следния израз:

$$\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-i\omega(t-t')} e^{i \int_{t''}^{t'} \frac{(\Delta\epsilon(\tau))d\tau}{\hbar}} f_w = \quad (3.32)$$

$$\int_0^t dt'' e^{-i\omega(t-t'')} \int_{t''}^t dt' e^{i \int_{t''}^{t'} \frac{(\Delta\epsilon(\tau) + \hbar\omega)d\tau}{\hbar}} f_w.$$

След класическо приближение на вътрешния интеграл и пренебрегване на главната стойност се получава следният принос към оператора на Лиувил в (3.7⁺):

$$\gamma_a(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}) = \sum_{\mathbf{q}''} n_{\mathbf{q}''} |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \pi \hbar$$

$$\delta \left(\epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} \right) - \epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} + \hbar q''_z \right) + \hbar \omega \right).$$

Останалите членове на (3.28) се пренебрегват въз основа на RPA.

Корекция от $\mathbf{f}_{\text{SOD}}^{+,+}$ Корекцията $\delta f_{\text{SOD}}^{+,+}$, асоциирана към четвъртия член в (3.9), удовлетворява уравнението:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} \right) \delta f_{\text{SOD}}^{+,+}(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+, t) =$$

$$+ \sum_{\mathbf{q}'''} \left\{ F_G(\mathbf{q}''') e^{iq_z''' z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z + q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}'''}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+, t) \right.$$

$$- F_G^*(\mathbf{q}''') e^{-iq_z''' z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z - q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}'''}^-, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+, t)$$

$$- F_G(\mathbf{q}''') e^{iq_z''' z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z - q_z''')}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+\}_{\mathbf{q}'''}^-, t)$$

$$\left. + F_G^*(\mathbf{q}''') e^{-iq_z''' z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'''} + 1} f_w(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z + q_z''')}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+\}_{\mathbf{q}'''}^+, t) \right\},$$

при условието, че $\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}''$. Четирите члена в дясно водят до FOD елементи съответно получавани в случаите, когато: $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}''$, $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}'$, $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}''$, $\mathbf{q}''' = \mathbf{q}'$. Редуцираното уравнение се интегрира с помощта на траектория, инициализирана от $(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}, t)$:

$$\begin{aligned}
F_G^*(\mathbf{q}'') e^{-iq''_z z} \delta f_{SOD}^{+,+}(z, p_z - \frac{\hbar(q'_z + q''_z)}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}, t) = \int_0^t dt' |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \left(\right. \\
+ e^{-iq''_z z} e^{iq''_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \hbar q''_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}'}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+\}_{\mathbf{q}''}, t') \quad (3.34) \\
- \frac{F_G^*(\mathbf{q}')}{F_G(\mathbf{q}'')} e^{-iq''_z z} e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q''_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}''}^+\}_{\mathbf{q}''}, t') \\
- e^{-iq''_z z} e^{iq''_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}''} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t') \\
+ \left. \frac{F_G^*(\mathbf{q}')}{F_G(\mathbf{q}'')} e^{-iq'_z z(t')} e^{-iq''_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \hbar q'_z - \frac{\hbar q''_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, \{\{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+\}_{\mathbf{q}'}, t') \right).
\end{aligned}$$

Следва прилагането на RPA, което филтрира всички членове освен третия. С помощта на конкретния израз за траекторията $z(t')$ се получава, че експоненциалният член $-q''_z z + q''_z z(t')$ се записва чрез електронни енергии както следва:

$$- \int_{t'}^t \frac{\left(\epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q'_z}{2}) - \epsilon(p_z(\tau) - \frac{\hbar q'_z}{2} - \hbar q''_z) \right) d\tau}{\hbar}. \quad (3.35)$$

Този израз се различава от (3.29) по водещия знак, както и по знака пред q''_z . Приносът на $\delta f_{SOD}^{+,+}$ към съответния FOD елемент в интегралната форма на уравнение (3.7⁺) е във вид, който се различава от (3.30) по следното: (i) факторът $n_{\mathbf{q}''}$ пред $|F_G|^2$ става $(n_{\mathbf{q}''} + 1)$; (ii) разликата на енергиите в експонентата е в съответствие с (3.35); (iii) $z(t', t'')$ е в съответствие с (3.31) в резултат на което знакът на q''_z се сменя от плюс на минус. Следващата стъпка е свързана с интегралите по време, които, аналогично на случая с уравнение (3.32), водят до появата на члена

$$\begin{aligned}
\gamma_e(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}) = \sum_{\mathbf{q}''} (n_{\mathbf{q}''} + 1) |F_G(\mathbf{q}'')|^2 \pi \hbar \\
\delta \left(\epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} \right) - \epsilon \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} - \hbar q''_z \right) - \hbar \omega \right)
\end{aligned}$$

в скобите в лявата страна на (3.7⁺).

Горните оценки дават възможност да се формулира приближеното уравнение за първия FOD елемент:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} + \gamma \left(p_z - \frac{\hbar q'_z}{2} \right) + i\omega \right) f_w(z, p_z - \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \quad (3.36)$$

$$= F_G^*(\mathbf{q}') e^{-iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} \left(f_w(z, p_z - \hbar q'_z, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+ \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t) - f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \right),$$

където $\gamma = 2(\gamma_a + \gamma_e)$.

3.1.5.2 Приближение на уравнението за f_{FOD}^-

Дясната страна на уравнението (3.7⁻) съдържа SOD елементи, чиито брой фонони от вид $\mathbf{q}'$ е намален с един в левия базис. Тези елементи се означават съответно като f_{SOD}^{-+} , f_{SOD}^{--} , f_{SOD}^{-} и f_{SOD}^{+} . До диагонални елементи водят първият и третият член: f_{SOD}^{-+} и f_{SOD}^{-} . Съответно се изследват уравненията за движение за корекциите δf_{SOD}^{-+} и δf_{SOD}^{-} за подходящи приноси към (3.7⁻). Уравненията за останалите два члена f_{SOD}^{--} и f_{SOD}^{+} , също се изследват за такива приноси. Анализът следва същите стъпки на запазване на FOD елементи в десните части на съответните уравнения, след което се прилага RPA. На следваща стъпка получените приноси се апроксимират от класическата граница. Дългите алгебрични преобразувания са подобни на вече описаните и ще бъдат изпуснати, като приносите, добавени към оператора на Лиувил от съответните елементи, се обобщават в следната таблица:

$$\begin{aligned} f_{SOD}^{-+} &\rightarrow \gamma_e \left(p_z + \frac{\hbar q'_z}{2} \right); & f_{SOD}^{--} &\rightarrow \gamma_a \left(p_z + \frac{\hbar q'_z}{2} \right); \\ f_{SOD}^{-} &\rightarrow \gamma_a \left(p_z + \frac{\hbar q'_z}{2} \right); & f_{SOD}^{+} &\rightarrow \gamma_e \left(p_z + \frac{\hbar q'_z}{2} \right). \end{aligned}$$

Събирането им в $\gamma = 2(\gamma_a + \gamma_e)$ позволява да се формулира уравнението за втория FOD елемент:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}}{m} \nabla_z + eE \nabla_{p_z} + \gamma \left(p_z + \frac{\hbar q'_z}{2} \right) - i\omega \right) f_w(z, p_z + \frac{\hbar q'_z}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) = F_G(\mathbf{q}') e^{iq'_z z} \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} \left(f_w(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\} \{n_{\mathbf{q}}\}, t) - f_w(z, p_z + \hbar q'_z, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}, t) \right). \quad (3.37)$$

3.1.5.3 Затваряне на получената система

Уравненията (3.36) и (3.37) обобщават (3.7). Получаването на затворено уравнение за електронната функция на Вигнер се постига, следвайки подобни стъпки както при извода на (3.5). Съответните интегрални уравнения съответстват на (3.9) с една корекция в резултат на допълнителните членове $e^{-\int_{t'}^t \gamma(p_z(\tau) \mp \frac{\hbar q'_z}{2}) d\tau}$. Заместването в (3.4) обобщава уравнение (3.10), като $e^{-\int_{t'}^t \gamma(p_z(\tau) - \frac{\hbar q'_z}{2}) d\tau}$ се добавя към експонентите във втория ред и $e^{-\int_{t'}^t \gamma(p_z(\tau) + \frac{\hbar q'_z}{2}) d\tau}$ към експонентите в последния ред. В този ред се сменят знаците на $\mathbf{q}'$. След това се въвежда променливата p'_z , съответстваща на закона за запазване на импулса и се взема следата по фононните координати. Сега обаче, оценката на следата не е така директна както при (3.5). Причината е, че γ внася нелинейни членове, така че (3.13) може да се приложи след допълнителен анализ на фононната подсистема, който ще бъде изложен по-нататък. Тук отбелязваме, че Болцмановата сумарна скорост на разсейване $\bar{\gamma}$ се получава от γ чрез формалното заместване на фононните координат $n_{\mathbf{q}''}$ с тяхната средна стойност $n(\mathbf{q}'')$. ■

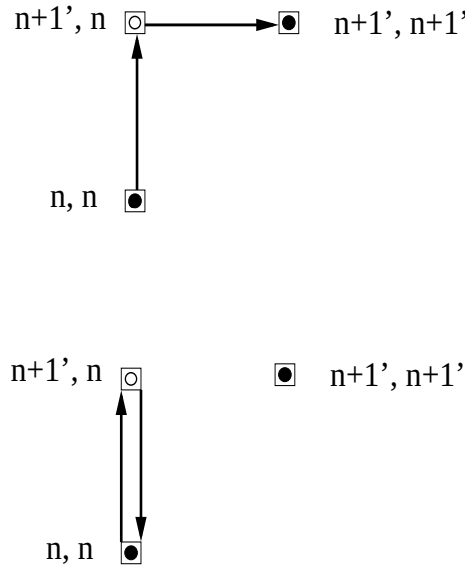
Полученото квантово-кинетично уравнение (3.14) се редуцира до уравнението на Barker-Ferry, чиито оригинален извод с помощта на формализма на проекционни оператори е за случая на хомогенен полупроводник. Така полученото тук уравнение може да се нарича уравнение на Barker-Ferry за квантова жица или нехомогенно уравнение на Barker-Ferry.

3.1.6 Физични аспекти

3.1.6.1 Кинетични модели

Изводът на двата модела сега ще бъде подкрепен от следващия евристичен анализ. Основната стъпка е прекъсването на системата GWF уравнения на първо или второ ниво на отдалеченост от главния диагонал. Основен аргумент в полза на такова прекъсване е предположението за слабо електрон-фононно взаимодействие. Тоест функцията F , която определя силата на връзка между двете подсистеми, умножена със съответните скала по време β_t , която характеризира взаимодействието, трябва да се оценява отгоре от малък параметър. Изследване на предположението за слабо взаимодействие е направено от Ringhofer et al, [95]. Началното състояние се определя от невзаимодействащи подсистеми, така че всички недиагонални елементи са нула. Преходът в резултат от взаимодействието на Levinson свързва диагонален елемент с FOD елемент и се връща обратно върху диагонален елемент. Два такива прехода, свързани с левия фононен базис, са показани на Фиг. 3.2. Докато времето на един преход се определя от енергията на фононите $\hbar\omega$, времето между две взаимодействия е обратно пропорционално на F , [95]. Единствено фонони от тип $\mathbf{q}'$ са въведени в двата прехода. След края на взаимодействието цялата система се връща отново в диагонално състояние. Предположението за слабо взаимодействие означава, че само един единствен преход се осъществява в даден момент. Процеси, при които два или повече прехода въвеждат два или повече фонона, се разглеждат като крайно невероятни. Такива явления се пренебрегват заедно с тези процеси, които въвеждат по-отдалечени от диагонала елементи в пътя, диагонален към диагонален елемент. Както може да се види от интегралната форма на (3.5), продължителността на прехода се определя от интервала $t - t'$ в (3.6). Еволюцията на системата протича на времева скала β_e , която е по-голяма от β_t . Тази времева скала характеризира времетраенето T на измерването на състоянието на системата. Кинетичният модел на Levinson е адекватен за система, която е

преди всичко невзаимодействаща през време на измерването, т.е. кумулативното време на всички преходи е много малка част от времето за усредняване T : $\beta_e \gg \beta_t$. Това е в съответствие с предположението (3.11) за една равновесна фононна подсистема (предположение на Блох), което асоциира бърз механизъм, възстановяващ равновесието в подсистемата между преходите.



Фигура 3.2: Преходите на Levinson свързват диагонални с първи недиагонални - FOD елементи. FOD е отбелязан с празно кръгче, като n, n представя левия и десния фононен базис $\{n_q\}, \{n_q\}$

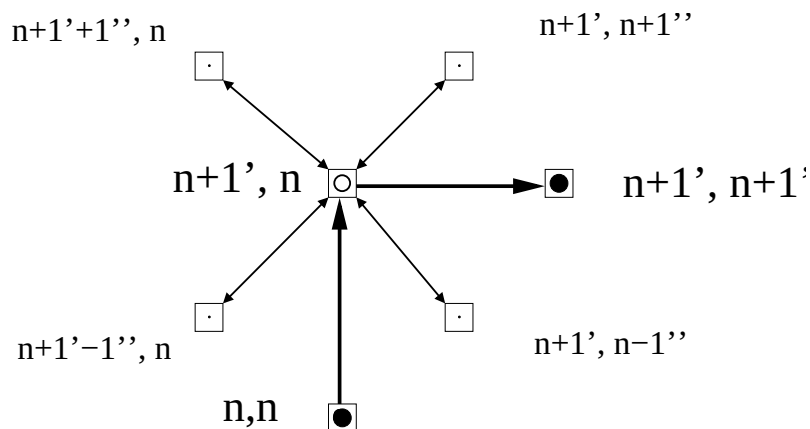
Много важно свойство на уравнението на Levinson е, че класическата граница в (3.6) води до уравнението на Болцман. Това свойство обяснява еволюцията на една система в широки граници от време в термините на преходи на Levinson. За големи времена тези преходи може да се разглеждат като моменталните Болцманови процеси на разсейване.

Един отворен проблем на този модел е, че не съществува механизъм, който да ограничава времетраенето на преходите. Наистина функцията на разсейване S ,

(3.6) не намалява с увеличаване на $(t - t')$ така че времето на преход принципно може да е от порядъка на еволюционното време: $\beta_t \simeq \beta_e$.

Уравнението на Barker-Ferry е на по-дълбоко ниво, като отчита взаимодействието между FOD и SOD елементи. Основните преходи са пак от тип Levinson. Фиг. (3.3) показва преход между диагонален елемент n, n и диагонален елемент $n + 1', n + 1'$ през FOD елемент $n + 1', n$. Последният обаче е модифициран поради взаимодействието му с SOD елементи, както е показано на фигурата. Взаимодействието въвежда втори вид фонони $\mathbf{q}''$ и съответства на моментални преходи от FOD към SOD елементите и обратно. Тези преходи са интегрирани в експонентата на (3.15): това се вижда от сравняването на (3.9) с (3.46), като се има предвид, че последното е еквивалентно с (3.48), (с γ_1 положено нула). Границите на интеграла по време в експонентата отговаря на времетраенето на главният преход, докато поради класическата граница взаимодействието с SOD елементите е моментално. Всички такива SOD елементи са обединени от сумата по $\mathbf{q}''$. По такъв начин моделът на Barker-Ferry въвежда един механизъм, който се грижи да ограничи времетраенето на преходите: експонентата ефективно подтиска дълговременните корелации. За сметка на това обаче класическата му граница не успява да възстанови закона за запазване на енергиите, а води до Лоренциан в разпределението на енергиите [105].

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. Оценката на $\mathcal{T}$, която разбира се зависи от физичните параметри на системата, може да бъде получена чрез числени симулации. Това ще е моментът от еволюцията, в който поведението на наблюдаемите започва да бъде нефизично. Например по-неже Лоренцианът води до изкуствено загряване на електронната система [66], пълната енергия на системата е една такава наблюдаема. Дали плътността на носителите е друга такава наблюдаема? Отговорът е не: интегрирането на (3.5) или (3.14) по p_z води до уравнение на нерекъснатост. Така че, ако началното условие е физическо, то еволюцията му не може да доведе до изненади като



Фигура 3.3: Преход от тип Barker-Ferry. Тук $\pm 1''$ означава увеличаване или намаляване с единица на фонони от вид q'' в левия или десния базис.

например отрицателни стойности на концентрацията електрони. Нищо обаче не може да бъде казано за разпределението по импулс. Докато в класическия случай неотрицателната Болцманова функция S гарантира физично поведение на разпределението по импулс, квантовия еквивалент (3.6) и (3.15) позволява отрицателни стойности. Така поведението на разпределението по импулс може да бъде друг кандидат за изследване на валидността на двата модела. Въпросът остава отворен поради изключителното нарастване на изчислителната трудност с увеличаване на еволюционното време.

3.1.6.2 Фоонната подсистема

Появата на Болцмановата скорост на разсейване $\bar{\gamma}$ в (3.16) може да бъде обоснована по два начина. Може да бъде следван един широко използван във физиката подход, при който сложни функционални зависимости се заместват с подходящи макропараметри, получавани в резултат от усредняване. Тъй като фооните се предполагат в равновесие, вероятността да се намерят n_q фоона

от вид $\mathbf{q}$ е $P(n_q)$. Като се използва зависимостта на γ от $\{n_{\mathbf{q}}\}$, е достатъчно да се усредни γ до:

$$\bar{\gamma} = \sum_{\{n_{\mathbf{q}}\}} \prod_{\mathbf{q}} P_{eq}(n_{\mathbf{q}}) \gamma. \quad (3.38)$$

След това $\bar{\gamma}$ се замества в уравнението (3.10) и се следват стъпките между (3.11)-(3.13).

Има и един алтернативен подход, който хвърля повече светлина относно предположенията, довели до (3.38). Ще бъде използван подходът към фононната система, разработен в [93], към който ще бъдат добавени съображения, изведени с помощта на комбинаторика. Експонентата $e^{-\int_{t'}^t \gamma}$ в обобщеното уравнение (3.10) се развива в ред, който се прекъсва до член K , съответстващ на желана точност. След това се взема следата, като се използва полагането (3.11). Получават се членове от ред $k \leq K$ от вида:

$$\sum_{\{n_{\mathbf{q}}\}} n_{\mathbf{q}_0} \sum_{\mathbf{q}_1} n_{\mathbf{q}_1} \sum_{\mathbf{q}_2} (n_{\mathbf{q}_2} + 1) \dots P_{eq}(n_{\mathbf{q}_0} + I) \prod_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0} P_{eq}(n_{\mathbf{q}}) |F_G(\mathbf{q}_1)|^2 |F_G(\mathbf{q}_2)|^2 \dots \delta_{q_{z1}} \delta_{q_{z2}} \dots \quad (3.39)$$

Тук сумата от следата е по натуралните числа от нула до безкрайност за всеки вид. Както ще бъде показано по-долу, усредняването по всеки вид фонони $\mathbf{q}$ може да бъде направено независимо от останалите видове в (3.39). Тоест, при подходящи предположения членове с повтарящи се моди от типа $n_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} \dots P_{eq}(n_{\mathbf{q}})$ могат да бъдат пренебрегнати: нататък предполагаме всички моди различни. Първият фактор $n_{\mathbf{q}_0}$, съответстващ на $\mathbf{q}'$ в (3.10), е разпределен съгласно $P(n_{\mathbf{q}_0} + I)$, където I е ± 1 или 0 . С помощта на (3.13) той се оценява на $n(\mathbf{q}_0)$ или $n(\mathbf{q}_0) + 1$ и може да бъде изпуснат от разглежданията. Модите $\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \dots$ идват от произведението $\gamma \gamma \dots$ в развитието на експонентата. Фононите в тези моди също са разпределени по $P(n_{\mathbf{q}})$ и могат да бъдат усреднени по същия начин. След усредняването равновесният брой $n(\mathbf{q}_i)$ замества всяка съответна координата $n_{\mathbf{q}_i}$ в (3.39). Тези членове се сумират и възстановяват експонентата, така, че $\bar{\gamma}$ се появява в (3.15).

Сега ще бъде показано използваното по-горе:

Твърдение 3.1.1 *Операцията по вземане на следата може да се извърши като се пренебрегнат повтарящите се моди в произведението (3.39) при условие, че броят на напречните моди е много по-голям от надлъжните такива.*

Делта функциите в γ повлияват само z координатата на вълновите вектори както се индикира от индекса в $\delta_{q_{z1}}$. По такъв начин (3.39) може да бъде разложено по-нататък по произведения, където делта функциите са отчетени, и координатите по z са фиксирани на $q_{z1}q_{z2} \dots q_{zk}$:

$$\sum_{n_{\mathbf{q}_1} \dots n_{\mathbf{q}_k}=0}^{\infty} \sum_{\mathbf{q}_{\perp 1}} n_{\mathbf{q}_1} \dots \sum_{\mathbf{q}_{\perp k}} n_{\mathbf{q}_k} P_{eq}(n_{\mathbf{q}_1}) \dots P_{eq}(n_{\mathbf{q}_k}) |F_G(\mathbf{q}_1)|^2 \dots |F_G(\mathbf{q}_k)|^2.$$

Освен това модите, в които F_G е нула (нулите на електронното състояние в напречната равнина), не се разглежда в сумата. Сега се предполага, че броят на надлъжните моди е пренебрежим в сравнение с броя N на напречните такива. Разглежда се продуктът

$$\sum_{n_{\mathbf{q}_1} \dots n_{\mathbf{q}_k}=0}^{\infty} n_{\mathbf{q}_1} \dots n_{\mathbf{q}_k} P_{eq}(n_{\mathbf{q}_1}) P_{eq}(n_{\mathbf{q}_2}) \dots P_{eq}(n_{\mathbf{q}_k}). \quad (3.40)$$

който се оценява както следва

$$n(\mathbf{q}_1) \dots n(\mathbf{q}_k); \quad \text{if} \quad \mathbf{q}_1 \neq \mathbf{q}_2 \neq \dots \neq \mathbf{q}_k, \quad (3.41)$$

или ако някои моди съвпадат

$$n(\mathbf{q}_1) \dots n^{(\alpha)}(\mathbf{q}_j) \dots n^{(\beta)}(\mathbf{q}_m) \dots n(\mathbf{q}_k);$$

$$n^{(\alpha)}(\mathbf{q}) = \sum_{n_{\mathbf{q}}=0}^{\infty} n_{\mathbf{q}}^{\alpha} P_{eq}(n_{\mathbf{q}}). \quad (3.42)$$

Сега нека l е инфинимум, а m_k - супремум дефинирани като:

$$L = \inf_{\mathbf{q}} n(\mathbf{q}) |F_G(\mathbf{q})|^2$$

$$M_k = \sup_{\alpha\beta\dots;\mathbf{q}_0\dots\mathbf{q}_k} n(\mathbf{q}_1) \dots n^{(\alpha)}(\mathbf{q}_j) \dots \\ \dots n^{(\beta)}(\mathbf{q}_m) \dots n(\mathbf{q}_k); |F_G(\mathbf{q}_1)|^2 \dots |F_G(\mathbf{q}_k)|^2.$$

Тези числа съществуват поради това, че модите са дискретни. Освен това L е различно от нула, тъй като нулите на F_G са вече отчетени, а фононната енергия в (1.8) е ограничена положителна величина. Оценяват се относителните приноси на членовете (3.42) към сумата (3.40). Понеже броят на членовете в (3.41) е $N(N-1)\dots(N-k+1)$ (предполага се най-лошият случай, когато всички z координати са еднакви), този принос е по-малък от:

$$\frac{M_k(N^k - N(N-1)\dots(N-k+1))}{L^k N(N-1)\dots(N-k+1)}.$$

Последният клони към нула, когато N клони към безкрайност за всяко $k \leq K$.

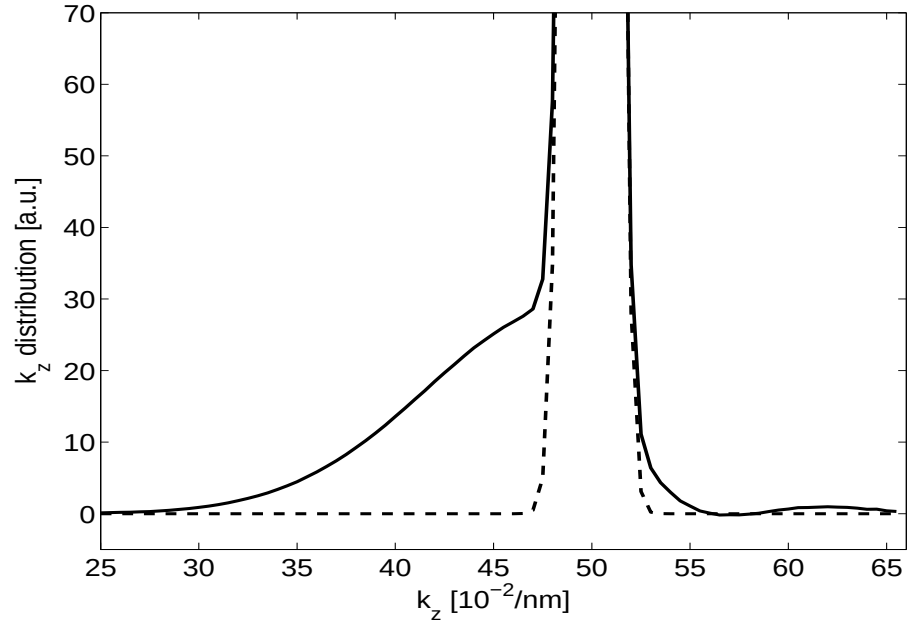
■

Този резултат също е в подкрепа на предположението на Блох: Първоначално равновесната фононна система може да се разглежда като равновесна по време на еволюцията ако броя на съответните моди е достатъчно голям. В този случай предположението за бърз механизъм, който връща системата в равновесие, става излишен.

3.1.7 Симулационни резултати

Показани са някои симулационни резултати, които демонстрират квантовия характер на изследваните кинетични уравнения.

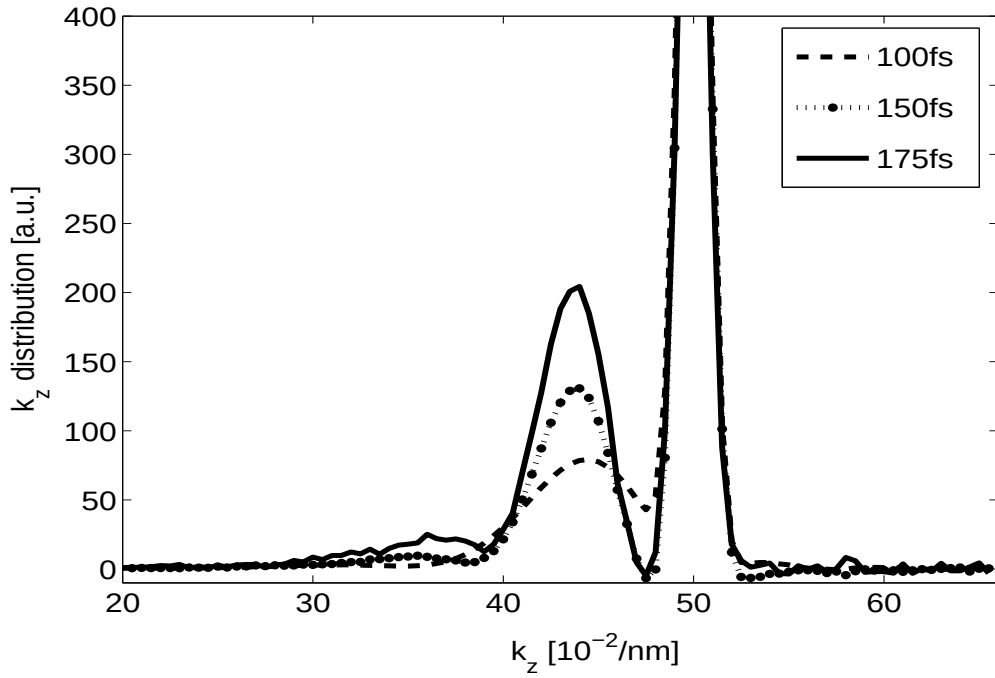
Използвана е Монте Карло техниката на обратната еволюция, която, както беше дискутирано, е ефективна, когато се изследва самото решение в дадена точка [51, 69, 71, 85, 106, 107]. Интегралната форма на съответното кинетично уравнение се развива в ред на Нойман и се оценяват съответните членове с помощта на вериги на Марков. Припомняме, че за да се използва еволюция напред във времето, е необходимо спрегнатото уравнение, което задава функционал от решението. При обратната еволюция точността се контролира директно от броя



Фигура 3.4: Началното условие (прекъснатата линия) и разпределението по k_z след 50 фемтосекунди еволюция.

на веригите N , като зависимостта е от вида $N^{-1/2}$. Конкретно е разгледана жица от $GaAs$ с квадратно сечение от 10 нанометра. Материалните параметри са взети от [85], като в частност има един полярно-оптичен фонон с постоянна енергия $\hbar\omega$. Електричното поле е нула. Началното условие за електроните се задава от произведение от две Гаусови разпределения по енергия и позиция. В частност k_z^2 разпределението съответства на генерирано от лазерен импулс с енергия от $150meV$. Разпределението по z е центрирано около началото на координатната система. Първо ще бъдат разгледани еволюцията на разпределението по вълнов вектор (и така по енергия) и на концентрацията, зададена от интегралите:

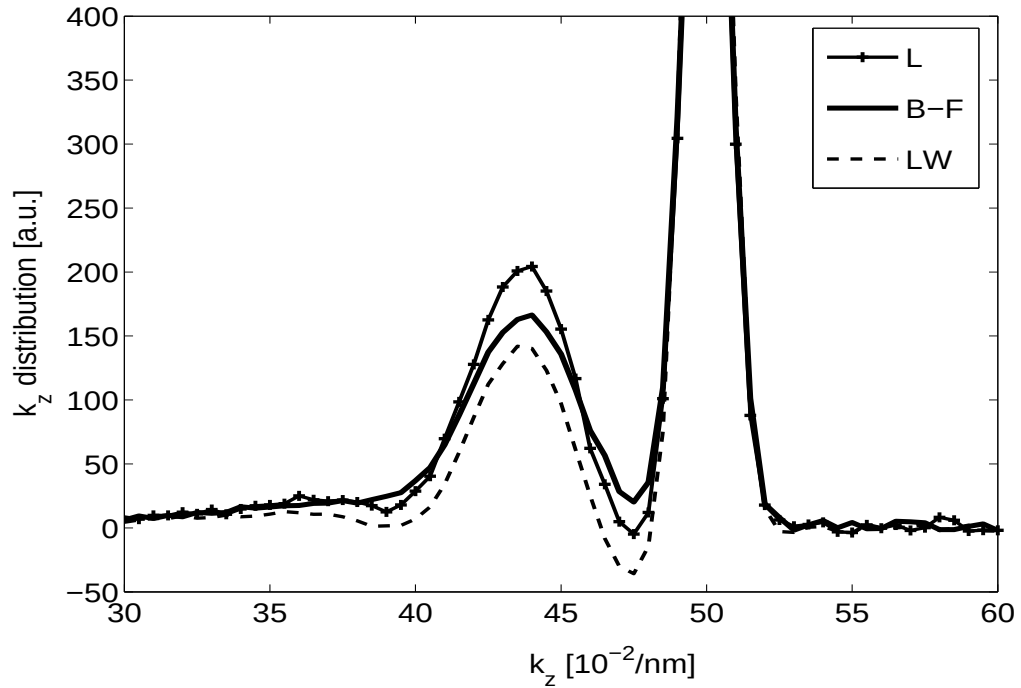
$$f(k_z, t) = \int dz f_w(z, \hbar k_z, t); \quad n(z, t) = \int dp_z f_w(z, p_z, t). \quad (3.43)$$



Фигура 3.5: Разпределението $f(k_z, t)$ за три различни времена на еволюция, получени с модела на Levinson.

в които се предполага, че функцията е нормирана на единица.

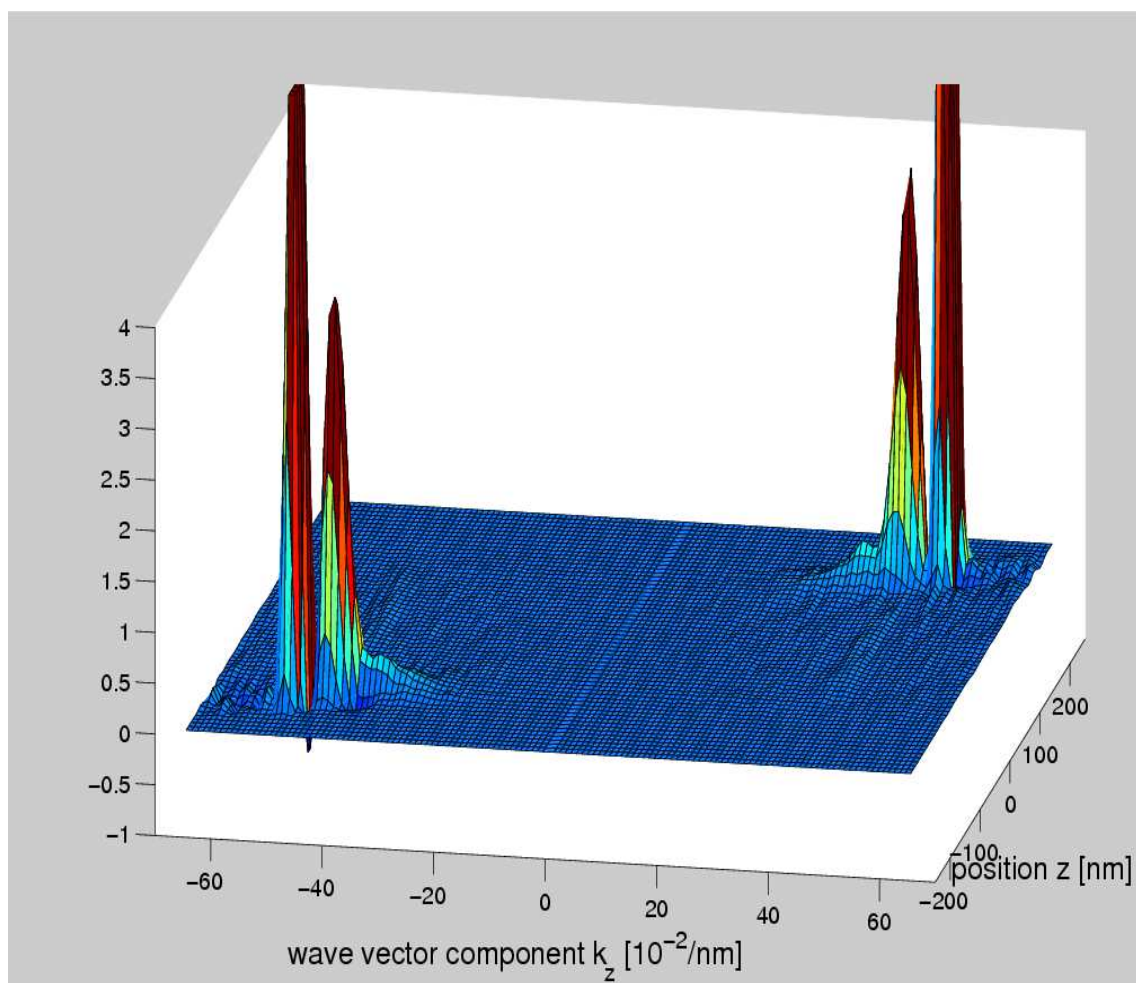
Поведението на разпределението по енергия при много ниски температури може да се използва като критерии за коректността на изведените нехомогенни уравнения: тъй като в напречно състояние електроните остават в основно състояние, еволюцията трябва да е същата както в хомогенния случай. Квантовата кинетика в хомогенни полупроводници е изследвана в детайли за ефектите СВ, CR и ICFE: [82], [83], [84], [85], [107], [14]. Тук само ще бъдат обяснени основните положения при симулационния експеримент. Лазерният пулс създава начално разпределение от носители, чиято средна енергия е значително над равновесната. Те започват да взаимодействат с фононите, като при екстремно



Фигура 3.6: Разпределение на вълновия вектор след 175 фемтосекунди, получено от модела на Levinson чрез директни (L) и индиректни (LW) пресмятания. Стойностите на последната стават отрицателни в долината между двата пика.

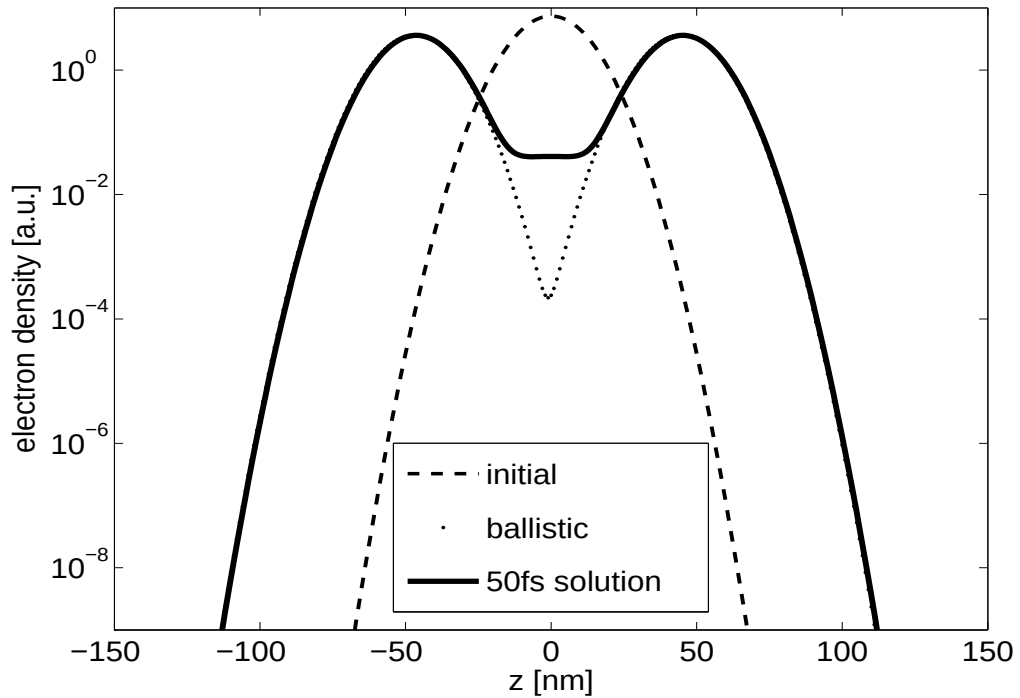
ниски температури могат само да отдават енергия. По такъв начин електронната подсистема релаксира. Полупроводниковият материал се подбира така, че да има силно взаимодействие с определен тип оптични фонони, чиято енергия се оценява добре от константа, $\hbar\omega$.

При класическото описание на процеса, поради закона за запазване на енергията се получават точни реплики на началното разпределение, отстоящи от него на енергии, кратни на $\hbar\omega$. В областта от енергии над началното условие не могат да се появяват електрони. Ефектите на СВ и CR, наблюдавани в квантовите решения, се изразяват в появата на първоначално много широки реплики,



Фигура 3.7: Функцията на Вигнер след 175 фемтосекунди еволюция. Двата основни пика са прекъснати за по-ясно представяне. Вторичните пикове се формират от електрони, които са прехвърлили част от енергията си на фононната подсистема. Класически забранените области са разположени от другата страна на главните пикове, в близкия ляв и далечния десен ъгли на фигурата. Тези области са населени с бързо движещи се електрони.

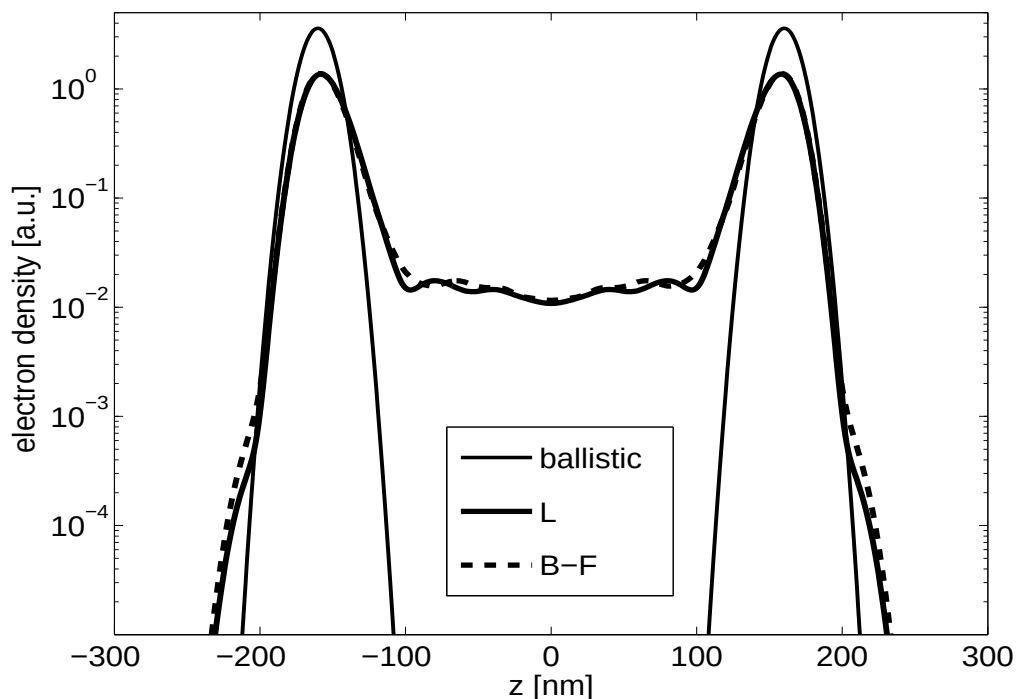
които с нарастване на времето постепенно се стесняват. Наблюдава се поява на носители в класически забранената област от енергии. При така подобрите условия електроните в жицата показват същото поведение. Функцията $f(k_z, t)$ е симетрична, поради което $f(k_z > 0, t)$ представя поведението на разпределението по енергии. Фиг.(3.4) показва началното разпределение и разпределението $f(|k_z|, t)$ след $t = 50$ фемтосекунди, което е толкова уширено, че не може да се определи пикът на първата реплика. Добре се вижда наличието на електрони над началното условие, около $k_z = 60[10^{-2}/nm]$. При такива малки времена не се очаква разлика между двата квантови кинетични модела.



Фигура 3.8: Концентрация на началния пакет електрони и след 50 фемтосекунди еволюция. Фронтите части на концентрацията и на балистичната крива изцяло съвпадат. В централната зона се появяват електрони, забавени поради разсейването.

С нарастване на времето първата реплика започва да се оформя, Фиг. (3.5), 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. Кривата на 175 фемтосекундна еволюция се получава чрез директна оценка на функционала (3.43). Кривите с по-малки времена са оценени чрез функцията на Вигнер, изчислена в 800×260 z и kz точки върху равномерна върху симулационната област мрежа със стъпки $1nm$ и $0.5[10^{-2}/nm]$. С увеличаване на еволюционното време Монте Карло техниките, свързани с директната оценка, стават по-ефективни.

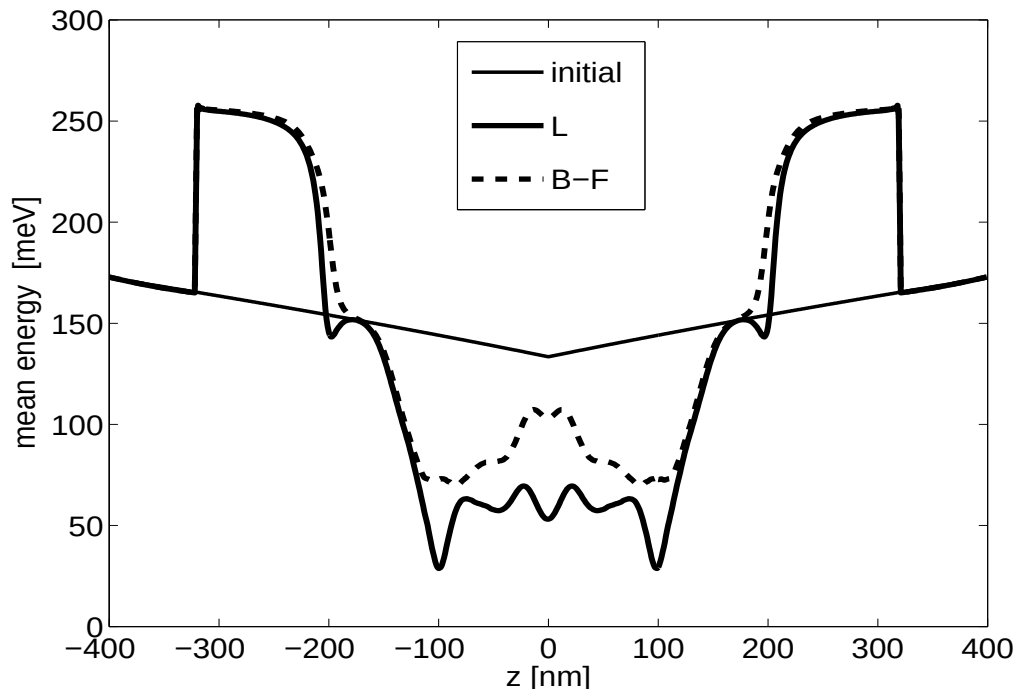
Фиг. 3.6 сравнява решенията с директни и индиректни пресмятания на концентрацията по модела на Levinson за 175 фемтосекунди. Кривата с индиректно пресметнатите резултати е вече нефизическа. Резултатът не се променя от точността на пресмятане в отделните точки, ако мрежата се държи фиксирана. Това показва, че функцията на Вигнер, Фиг. 3.7, става все по-осцилираща и съответно трябва да се вземат повече точки за една по-точна оценка. Кривата от модела на Barker-Ferry, означена с плътната линия на Фиг. 3.6, е получена по директния начин. Сравнението с тази на Barker-Ferry показва ефективно забавяне (CR) на еволюцията в резултат от експоненциалния фактор в ядрото. Разликата между двата модела се очаква да става по-голяма с времето. За съжаление и изчислителната трудност нараства експоненциално с еволюционното време. Сравняването на решения за по-няколкофемтосекунди е важна, но неизпълнима в момента задача. Фиг. 3.8 показва началната концентрация на носителите, разположени симетрично като функция на позицията z . Тя се разделя на два пакета електрони, които се движат в положителната и отрицателна посоки на жицата. Концентрацията след 50 фемтосекунди е представена от плътната линия. Сравнението с балистичната крива (пунктирната линия) показва, че в началото транспортът е практически балистичен - без влияние от страна на разсейването, което има пренебрежим ефект. Изключение се наблюдава в централната част, в която се появяват електрони забавени в резултат от взаимодействието с фо-



Фигура 3.9: Концентрация на електроните след 175 фемтосекунди еволюция. Най-бързите според класическия модел електрони се намират във фронтите участващи на балистичната крива (непрекъснатата линия). Най-бързите електрони от моделите на Levinson (плътна линия) и Barker-Ferry (прекъснатата линия) покриват по-голямо разстояние от началото, което довежда до ефекта UST.

ноните. Ситуацията се променя при нарастване на времето: Фиг. 3.9 сравнява еволюцията на балистичната концентрация с тази, получена от двата модела след 175 фемтосекунди от началото на транспорта. Фронтите части на балистичната крива, разположени над 200 и под -200 нанометра, са формирани от най-бързите електрони, които биха се получили при едно 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



Фигура 3.10: Начална (непрекъсната линия), Levinson (плътна линия) и Barker-Ferry (прекъсната линия) разпределения на средната енергия на частица след 175 фемтосекунди.

още по-далече от началото. Това е съвсем нов ефект, който е наречен утрабърз трансвер в пространството (UST) [89]. 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.

Това предположение се потвърждава от разпределението на средната енергия на частица.

$$e(z, t) = \int dk_z \epsilon(k_z) f(z, k_z, t) / n(z, t).$$

Фиг. 3.10 показва $e(z, t)$ за същото време $t = 175$ фемтосекунди. Началното разпределение служи за сравнение с разпределението по енергии на балистичните електрони.

Извън 200 нанометровата област около началото квантовите електрони са много по-горещи от балистичните такива. Разликата в разпределението по енергия на двата модела е вече добре видима в централната част на графиката. Кривата от модела на Barker-Ferry е по-близо до началното разпределение, което се свързва с допълнителното забавяне на еволюцията, дължащо се на експоненциалния фактор в оператора на взаимодействие.

3.1.8 Интегрален вид

Интегралната форма на уравнение (3.2) се получава като се следват същите стъпки, водещи до уравнения (2.24) и (2.88). Използват се характеристиките на оператора на Лиувил, които в случая са едномерни Нютонови траектории:

$$z(t') = z - \frac{1}{m} \int_{t'}^t p_z(\tau) d\tau, \quad p_z(t') = p_z - eE(t - t'). \quad (3.44)$$

инициализирани от (z, p_z) в момент t . Уравнението съдържа явно началното условие $f_0(z, p_z, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, 0)$. Тъй като фононните координати остават неза-сегнати от трансформацията, е удобно те да останат неявни:

$$\begin{aligned} f_w(z, p_z, \cdot, t) = & f_0(z(0), p_z(0), \cdot, 0) e^{-i/\hbar(\epsilon(\{n_{\mathbf{q}}\}) - \epsilon(\{n'_{\mathbf{q}}\}))t} + \int_0^t dt' e^{-i/\hbar(\epsilon(\{n_{\mathbf{q}}\}) - \epsilon(\{n'_{\mathbf{q}}\}))(t-t')} \\ & \times \sum_{\mathbf{q}'} F(\mathbf{q}') \left\{ G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q'_z}{2}, \cdot, t') \right. \\ & - G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} f_w(z, p_z(t') + \frac{\hbar q'_z}{2}, \cdot, t') \\ & - G(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{iq'_z z(t')} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'}} f_w(z, p_z(t') + \frac{\hbar q'_z}{2}, \cdot, t') \\ & \left. + G^*(\mathbf{q}'_{\perp}) e^{-iq'_z z(t')} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(z(t'), p_z(t') - \frac{\hbar q'_z}{2}, \cdot, t') \right\} \quad (3.45) \end{aligned}$$

Интегралната форма може да бъде доказана като се вземе производната по време от (3.45), която трябва да доведе до (3.2). 3.45 е от вида:

$$f(z, p_z, t) = f(z(0), p_z(0), 0)e^{\lambda t} + \int_0^t dt' K(z(t'), p_z(t'))e^{\lambda(t-t')} f(z(t'), p_z(t'), t'), \quad (3.46)$$

което може да бъде разширено до:

$$f(z(t''), p_z(t''), t'')|_{t''=t} = f(z(0), p_z(0), 0)e^{\lambda t''}|_{t''=t} + \int_0^{t''} dt' K(z(t'), p_z(t'))e^{\lambda(t''-t')} f(z(t'), p_z(t'), t')|_{t''=t}.$$

Записано по този начин уравнението напомня за траекторията: първо се взема производната по t'' и след това се полага $t'' = t$ в крайния резултат. В лявата страна се получава операторът на Лиувил $\mathcal{L}$, действащ на f , докато дясната страна дава $\lambda f(z, p_z, t) + K(z, p_z)f(z, p_z, t)$:

$$(\mathcal{L} - \lambda)f(z, p_z, t) = K(z, p_z)f(z, p_z, t). \quad (3.47)$$

Уравнение (3.46) може да бъде формулирано и по друг начин, при условие че $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$:

$$f(z, p_z, t) = f(z(0), p_z(0), 0)e^{\lambda_1 t} + \int_0^t dt' (K(z(t'), p_z(t')) + \lambda_2)e^{\lambda_1(t-t')} f(z(t'), p_z(t'), t'). \quad (3.48)$$

Еквивалентността между (3.46) и (3.48) често се използва при извода на модели, които апроксимират (3.2). Също трябва да се отбележи, че (3.46) и (3.48) остават валидни и ако λ зависи от времето. Тогава аргумента на експонентата (от вида $\lambda(t - t_1)$, $t_1 = 0, t'$) се замества с $\int_{t_1}^t \lambda(\tau) d\tau$. Също така се отбелязва че $p_z(t') + \hbar q_z$ и $(p_z + \hbar q_z)(t')$ са еквивалентни.

3.1.9 Класическа граница на фононното взаимодействие

Интересуващият ни интеграл I се преформулира като $f_w(..., t'..)$ се преименува на $\phi(t')$ и се въвеждат относителните времена $t_1 = t' - t''$, $\tau_1 = \tau - t''$:

$$\begin{aligned} I &= \int_{t''}^t dt' e^{i \int_{t''}^{t'} \frac{(\Delta\epsilon(\tau) + \hbar\omega) d\tau}{\hbar}} \phi(t') = \\ &= \int_0^{t-t''} dt_1 e^{i \int_0^{t_1} \frac{(\Delta\epsilon(\tau_1 + t'') + \hbar\omega) d\tau_1}{\hbar}} \phi(t_1 + t'') \\ &= \int_0^{t-t''} dt_1 e^{i \left\{ \Delta\epsilon(t'') + \hbar\omega + \frac{\hbar^2 q_z^2 e E t_1}{2m} \right\} t_1} \phi(t_1 + t''). \end{aligned}$$

Интегрирането по време в последния ред беше извършено с помощта на дефиницията на траектория (3.44) и явния вид на израза $\Delta\epsilon$. С α и β се съответно означават скалите по енергията и времето и се въвежда безразмерната величина $t^\beta = t/\beta$. Предполага се, че α е общата скала за електронната и фононната енергии, а също и за члена, определен от електричното поле:

$$\epsilon = \epsilon^\alpha \alpha; \quad \epsilon_{ph} = \hbar\omega = \epsilon_{ph}^\alpha \alpha; \quad \epsilon_E = \frac{\hbar^2 q_z^2 e E \beta}{2m} = \epsilon_E^\alpha \alpha.$$

Въвежда се нова интеграционна променлива

$$x = \frac{t_1 \alpha}{\hbar} = \frac{t_1^\beta \beta \alpha}{\hbar} = \frac{t_1}{\hbar_\alpha} = \frac{t_1^\beta}{\hbar_{\alpha\beta}},$$

където $\hbar_\alpha = \hbar/\alpha$ и $\hbar_{\alpha\beta} = \hbar/(\alpha\beta)$. Освен това ще бъде използвано означението $T = (t - t'')/\hbar_\alpha = (t - t'')^\beta/\hbar_{\alpha\beta}$. Сега интегралът се записва като:

$$I = \hbar_\alpha \int_0^T dx e^{i \{ \Delta\epsilon^\alpha + \epsilon_{ph}^\alpha + \epsilon_E^\alpha x \hbar_{\alpha\beta} \} x} \phi(\beta x \hbar_{\alpha\beta} + t'').$$

Предполага се, че скалите по време и енергия са достатъчно големи за границата $\hbar_{\alpha\beta} \rightarrow 0$. Тогава $T \rightarrow \infty$, докато членът с полето клони към нула. Интегралът

по време в I става Фурие трансформацията на функцията на Хевисайд $\theta(t)$, която се изразява чрез обобщени функции както следва:

$$I = \hbar_\alpha \int_0^\infty dx e^{i\{\Delta\epsilon^\alpha + \epsilon_{ph}^\alpha\}x} \phi(t'') = \hbar \left(\pi \delta(\Delta\epsilon + \hbar\omega) + v.p. \frac{i}{\Delta\epsilon + \hbar\omega} \right) \phi(t'').$$

3.2 Йерархия кинетични уравнения

Йерархията кинетични модели, представена на Фиг. (1.3), може да бъде изведена с помощта на същите подходи, използвани за получаването на уравненията за еволюция в квантова жица. Шестмерният еквивалент на обобщеното уравнение (3.2) изцяло използва оценките за фононната подсистема, изведени в секция (3.1.2). Единствено линейният потенциал $-eEz$ на едномерното електрично поле сега се заменя с най-общ триизмерен в реалното пространство потенциал, което налага използването на оценките от секция (1.6.3) и по-специално уравнения (1.41) и (1.42) за електронната подсистема. Така води до появата на члена с V_w в дясната страна на уравнението:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \right) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) = & \quad (3.49) \\ \frac{1}{i\hbar} \left(\epsilon(\{n_{\mathbf{q}}\}) - \epsilon(\{n'_{\mathbf{q}}\}) \right) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) & \\ + \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t) & \\ + \sum_{\mathbf{q}'} F(\mathbf{q}') \left\{ e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}} \sqrt{n_{\mathbf{q}'} + 1} f_w\left(\mathbf{r}, \mathbf{p} - \frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t \right) \right. & \\ - e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}} \sqrt{n_{\mathbf{q}'}} f_w\left(\mathbf{r}, \mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, \{n'_{\mathbf{q}}\}, t \right) & \\ \left. - e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'}} f_w\left(\mathbf{r}, \mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^-, t \right) \right\} & \end{aligned}$$

$$+ e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}} \sqrt{n'_{\mathbf{q}'} + 1} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p} - \frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n'_{\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}'}^+, t) \Big\}.$$

Последните два члена във фигурните скоби може да бъдат получени от първите два чрез следната операция.

- сменя се знакът на i ;
- броят фонони в състоянието, определено от сумационния индекс $(\mathbf{q}')$, се сменя в десния вместо в левия базис;
- $n_{\mathbf{q}'}$ се заменя с $n'_{\mathbf{q}'}$ в квадратните скоби.

За удобство по-нататък в изложението членовете, получени с тази операция, се означават с *i.c..*

Съответно анализът на зависимостта от фононните координати е същият както в случая на квантова жица: уравнението свързва един елемент $f_w(\dots, \{n\}, \{m\}, t)$ с четири съседни елемента, имащи по един фонон в повече или по-малко в състоянието определено от сумационния индекс $\mathbf{q}'$ в левия или десен базис. $n_{\mathbf{q}}$ Освен това за всяко състояние броят фонони $n_{\mathbf{q}}$ може да бъде всяко натурално число, което прави невъзможно решаването на уравнението в общия случай. От първостепенен интерес обаче са диагоналните елементи по фононните координати,

$$f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{\{n_{\mathbf{q}}\}} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \{n_{\mathbf{q}}\}, \{n_{\mathbf{q}}\}, t) \quad (3.50)$$

сумирането по които дава информация за електронното състояние чрез редуцираната функция на Вигнер в съответствие с (3.3). Диагоналните елементи имат един и същ базис фонони $\{n_{\mathbf{q}}\}$ от ляво и дясно, *FOD* елементите имат по един фонон разлика между десния и левия базис и така нататък, което дава възможност да се систематизират елементите по отношение на отдалечеността им от диагоналните елементи. Тази структура се прекъсва на ниво *FOD* елементи, като се повторят всички приближения и допускания, направени за фононната

система в предишния случай, и в частност тези за слабо взаимодействие и равновесни фонони. В резултат а зависимостта от $\{n_{\mathbf{q}}\}$ се замества равновесното число фонони в състоянията $n(\mathbf{q})$.

3.2.1 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 функциите f_1 и f_2 :

$$f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_w(\mathbf{r}(\mathbf{p}, 0), \mathbf{p}, 0) + \int_0^t dt' \left[\int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t'), \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t'), \mathbf{p}', t') + \sum_{\mathbf{q}'} F^2(\mathbf{q}') \left\{ e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}(\mathbf{p}, t')} f_1(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t'), \mathbf{p}^-, t') - e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}(\mathbf{p}, t')} f_2(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t'), \mathbf{p}^+, t') + cc \right\} \right], \quad (3.51)$$

$$f_1(\mathbf{r}', \mathbf{p}^-, t') = \int_0^{t'} dt'' e^{-i\omega_{\mathbf{q}'}(t' - t'')} \left[\int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}'^-(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p}' - \mathbf{p}^-) f_1(\mathbf{r}'^-(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p}', t'') - e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}'^-(\mathbf{p}, t'')} \left\{ (n(\mathbf{q}') + 1) f_w(\mathbf{r}'^-(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p}, t'') - n(\mathbf{q}') f_w(\mathbf{r}'^-(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p} - \hbar\mathbf{q}', t'') \right\} \right], \quad (3.52)$$

$$f_2(\mathbf{r}', \mathbf{p}^+, t') = \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{\mathbf{q}'}(t' - t'')} \left[\int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}'^+(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p}' - \mathbf{p}^+) f_2(\mathbf{r}'^+(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p}', t'') - e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}'^+(\mathbf{p}, t'')} \left\{ n(\mathbf{q}') f_w(\mathbf{r}'^+(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p}, t'') - (n(\mathbf{q}') + 1) f_w(\mathbf{r}'^+(\mathbf{p}, t''), \mathbf{p} + \hbar\mathbf{q}', t'') \right\} \right] \quad (3.53)$$

където

$$\mathbf{p}^\mp(\tau) = \mathbf{p}^\mp = \mathbf{p} \mp \frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}; \quad \mathbf{r}'^\mp(\mathbf{p}, t'') = \mathbf{r}' - \int_{t''}^{t'} \frac{\mathbf{p}^\mp(\tau)}{m} d\tau, \quad (3.54)$$

като $\mathbf{r}(\mathbf{p}, t')$ формално отговаря на случая $\mathbf{q}' = 0$ и интегриране в границите t и t' . Уравненията (3.52) и (3.53) съответстват на усреднените по равновесни

фонони уравнения (3.9). Основната разлика е, че при последните потенциалът е линеен, докато сега се разглежда случай за потенциал от най-общ характер. Това води до форма на уравнения на Фредхолм от втори род с ядра V_w и свободни членове, представяни от изразите във фигурните скоби. Съответно (3.54) е аналог на (3.8), като импулсите не се променят с времето поради липса на ускоряваща сила.

Интегралната форма позволява явно да се изрази физическото допускане за слабо взаимодействие, водещо до нулеви начални условия. Преходите започват от диагонален елемент и завършват в такъв, така че следващият преход започва отново от една разделена електрон-фононна система съгласно с условието (3.11). Свободните членове в (3.52) и (3.53) зависят от f_w , като итерациите с ядрото V_w описват корелациите между електричния потенциал и процесите на разсейване.

Тази система може да се сведе до едно уравнение за f_w чрез приближения в уравненията (3.52) и (3.53) по два начина. Първият е да се използва класическата граница (1.46) 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 има квантов характер. Вторият изцяло пренебрегва V_w в уравненията за допълнителните функции, което води до уравнението на Вигнер-Болцман.

3.2.2 Основно уравнение за редуцираната функция на Вигнер

Удобно е двете помощни уравнения първо да се запишат в интегро-диференциален вид и след това да се използва класическата граница, водеща до заместването на потенциалния член с член, съдържащ класическата сила $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$. Последният се прехвърля в ляво както при уравнение (3.7), което от своя страна води до появата на ускоряваща сила в (3.54):

$$\mathbf{p}(\tau) = \mathbf{p} - e\mathbf{E}(t - \tau), \quad \mathbf{r}^\mp(\mathbf{p}, t') = \mathbf{r} - \int_{t'}^t \frac{\mathbf{p}^\mp(\tau)}{m} d\tau = \mathbf{r}(\mathbf{p}, t') \pm \frac{\hbar \mathbf{q}'}{2m}(t - t').$$

Новополучените уравнения за f_1 и f_2 могат да бъдат решени явно. След това $\mathbf{q}'$ в уравнението за f_1 се сменя с $-\mathbf{q}'$, като се използва това, че $n(\mathbf{q})$ и $\omega_{\mathbf{q}}$ са симетрични функции на аргумента си, и се въвежда променливата $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \hbar\mathbf{q}$. Следва заместването на двете уравнения в интегро-диференциалната форма на (3.51). В резултат се получава:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}\right) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int d\mathbf{p}' V'_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t') + \int_0^t dt' \int d\mathbf{p} \left(S(\mathbf{p}', \mathbf{p}, t, t') f_w\left(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t') + \frac{\hbar\mathbf{q}}{2m}(t - t'), \mathbf{p}'(t'), t'\right) - S(\mathbf{p}, \mathbf{p}', t, t') f_w\left(\mathbf{r}(\mathbf{p}, t') + \frac{\hbar\mathbf{q}}{2m}(t - t'), \mathbf{p}(t'), t'\right) \right), \quad (3.55)$$

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

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

Това уравнение обобщава както хомогенното уравнение на Левинсон, така и съответстващото му в квантова жица уравнение (3.5) 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 (3.55) сега е нелокалността на разсейването в реалното пространство. Това може да се види от едно сравнение 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. Поради квантовия характер на взаимодействието с фонони, решението на (3.55) получава приноси и от други точки на фазовото пространство. Наистина, нека разгледаме следния процес. В дадена точка на

фазовото пространство в момент t'' нека да бъде определена една частица с тегло стойността на f_w в тази точка и момент. Взаимодействието започва в t'' , като частицата абсорбира половината от импулса $\hbar \mathbf{q}'/2$ на фонона. Промяната в последният води до промяна и на компонентата на траекторията в реалното пространство. След движение по тази траектория до момент $t' \leq t$, частицата попада на реалната част на β . Това е моментът на приключване на взаимодействието, когато втората част на импулса на фонона се абсорбира от частицата. Частицата сега има правилните позиция и момент, които ѝ гарантират движение по β до $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ в момент t . Това е случай на реална абсорбция на фонон в $\mathbf{q}'$. Алтернативно, при виртуалната абсорбция частицата губи обратно половината от фононния импулс.

Трябва да се отбележи, че следващото взаимодействие започва чак след като текущото взаимодействие приключи. Това се дължи на направеното предположение за слабо взаимодействие. Последното е в основата на пространствената нелокалност на квантовия транспортен процес. 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, представяща закона за запазване на енергията, се получава в резултат от граничен преход, при който взаимодействието става моментално.

3.2.3 Класическа граница: уравнение на Вигнер-Болцман

Към уравнение (3.55) ще бъде приложена границата, дискутирана в секция (3.1.9), като всички предположения за физичните скали, необходими за граничния преход, се приемат за верни и тук. Тоест и тук предполагаме, че скалите по енергия и време са такива, че тяхното произведение е много по-голямо от $\hbar$. Формално границата се записва в термините на обобщени функции:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty d\tau e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon \tau} \phi(\tau) = \phi(0) \left\{ \pi \delta(\epsilon) + i \mathcal{P} \frac{1}{\epsilon} \right\}. \quad (3.56)$$

Тя може да бъде приложена към уравнение интеграла в уравнение (3.55) с вид:

$$\int_0^t d\tau e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\tau} \phi(\tau) \quad (3.57)$$

Същият резултат ще се получи, ако тази граница се вземе първо в уравнения (3.52) и (3.53) от главния модел и след това полученото се замести в (3.51).

След прилагането на границата получените главни стойности $\mathcal{P}$ удобно се канцелират една друга. Това се дължи на факта, че уравнение (3.55) съдържа само реални членове. 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.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \right) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t') \\ &+ \int d\mathbf{p}' (f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) - f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) S(\mathbf{p}, \mathbf{p}')), \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned} S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= \frac{V}{h^3} \frac{2\pi}{\hbar} \left\{ |\mathcal{F}(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) n(\mathbf{q}) \right. \\ &+ \left. |\mathcal{F}(-\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon(\mathbf{p}') + \hbar\omega_{-\mathbf{q}}) (n(-\mathbf{q}) + 1) \right\}, \end{aligned}$$

където $\mathbf{q} = \frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar}$ и $|\mathcal{F}|^2 = \hbar^2 F^2$ е електрон-фононния матричен елемент. Както беше дискутирано в началото на тази глава, първият оператор е актуален за размери на полупроводниковите структури, характеризирани от нанометровата скала, докато вторият оператор изисква еволюционни времена, мерени в пикосекунди.

Класическата граница в потенциалния член възстановява уравнението на Болцман. С това завършваме получаването на различните модели, обединени в йерархията на Фиг. 3.1.

Стохастични подходи за решаването на това уравнение и прилагането му към актуални физични задачи ще бъдат дискутирани в следващата секция.

3.3 Модел на Вигнер-Болцман: Монте Карло подход

Уравнението на Вигнер-Болцман, бидейки, както видяхме, актуално за един широк клас от практически физични и инженерни задачи на наноелектрониката, поставя проблема за намиране на ефективни числени подходи за решаването му.

Разработват се както детерминистични, така и стохастични методи, като и двата подхода имат своите предимства и особености.

Детерминистичните методи като правило първо намират решението, а след това функционалите от него оценяват средните от физичните величини. Тези методи предлагат висока точност в оценката на решението, което е особено важно в областите на итерференция, където функцията на Вигнер силно осцилира. От друга страна, бързите вариации водят до проблем с дискретизацията на дифузия член $\nabla_{\mathbf{r}} f_w$ във фазовото пространство: въпреки че широко се използват дискретизационни схеми от втори порядък, това не винаги е правилно, тъй като е показано, че дори схеми от четвърти порядък водят до съществени разлики във волт-амперните ($I - V$) характеристики на резонансно-тунелни диоди [108]. В случая на нано-транзистори са необходими схеми от трети порядък за адекватно описание на подпраговия режим на работа на прибора [109],[110]. Още от самото начало на прилагането на детерминистичните подходи става ясно, че увеличаване на размерността на задачата, което е по-реалистично предвид на това, че модерните прибори се управляват от двумерни и тримерни процеси, е невъзможно поради непосилните изисквания за оперативна памет, факт, който остава верен даже и за съвременните компютри. Наистина, въпреки развитието на детерминистичните методи за решаване на Болцмановото уравнение, които вече успешно атакуват тримерни проблеми, ситуацията с квантовия му аналог остава непроменена. Основната причина е, че за разлика от матрицата на класическия оператор на разсейване, която е относително разрежена благодарение на законите за запазване на енергията и импулса, матрицата, съответстваща на

оператора на Вигнер, е плътна.

Известно е, че стохастичните методи могат да се справят със задачи с големи размерности като редуцират изискваната за оперативна памет за сметка на времето на симулация.

Първите разработки на стохастични методи за Вигнеров транспорт са отпреди почти две десетилетия [111, 112, 16]. Насърчени от големия успех на Монте Карло методите за решаване уравнението на Болцман, те експлоатират формалната аналогия с уравнението на Вигнер, като въвеждат идеята за числени квантови частици. Първоначалната евристична представа за Монте Карло метода като за класически частици, управлявани от физични процеси с ясна вероятностна интерпретация, еволюира в посока формално прилагане на стохастични числени методи.

Стохастични модели, използващи частици за изчисляване на стойности на физични величини, се разработват в рамките на различни квантово-кинетични теории [113], [85], [105]. Понякога тези въведени с чисто изчислителни цели модели може да бъдат използвани за интерпретация и анализ на основополагащите физични процеси и явления. Ето някои примери.

Методът на ефективния потенциал за отчитане на квантизационни ефекти [114] се базира на движещи се в ефективен потенциал класически частици, чиито траектории може да бъдат интерпретирани като траектории на Bohm [115]. В едно обобщение на този подход ефективният потенциал, получен в резултат от действието на псевдо-диференциален оператор върху електричния потенциал, става функция на импулсите на класическите частици [116, 117].

Ултрабързи процеси в оптично възбудени полупроводници се описват от система уравнения, където електроните и междוזонната поляризация се явяват като независими променливи. Разработен е Монте Карло метод, който успешно решава системата, [113]. Забележително е че в рамките на метода един частичен модел се съпоставя на междוזонната поляризация - комплексна квантова величина, свързана с кохерентността на фотогенерационния процес.

Създаден е модел, според който действието на Вигнеровия потенциал, който е антисиметрична функция на фазовите координати, съответства на Марков процес на разсейване на частици, еволюиращи във фазовото пространство, [17]. Вигнерови траектории могат да се дефинират от модифицирани уравнения на Хамилтон, формулирани с помощта на квантова сила, [112]. Последната е определено нелокална в пространството величина, изразяваща се чрез функцията и потенциала на Вигнер и техните производни по импулса. Квантовата сила има сингулярности в точките около екстремумите по импулс на функцията на Вигнер. В такива точки траекториите може да бъдат създавани и унищожавани, [112]. Този модел на Вигнерови траектории и съответно частици дава нагледно описание на еволюцията на една квантова система и в частност на процеса на тунелиране, [118, 119]. От изчислителна гледна точка обаче моделът е само едно помощно средство, защото изисква познаване на функцията на Вигнер, която всъщност се търси. Изключение правят почти равновесните системи, където функцията се апроксимира от равновесното разпределение. В този случай квантовата сила е дефинирана навсякъде освен в точката на максимума, и води до ефективно намаляване на потенциалните бариери. Увеличаването на потока частици се асоциира с процеса на тунелиране, [111].

Друг стохастичен модел въвежда път на Вигнер, [99], [120, 101]. Той се базира на анализ, показващ, че една фазова точка от функцията на Вигнер еволюира, като пренася стойността и по класическа траектория, [100]. Действието на потенциала на Вигнер се интерпретира като разсейване, което заедно с разсейването от фонони свързва части от класически траектории в път на Вигнер. Взаимодействието с фонони е напълно квантово-механично, както при обобщеното уравнение на Вигнер, (1.23). Тоест, взаимодействието с фонони започва с обмяната на половината импулс на фонона и завършва след краен интервал от време. При това, през този интервал могат да започнат или завършат произволен брой други взаимодействия. За сравнение, както беше показано, уравнението на Levinson разглежда единични взаимодействия с крайна продължителност, докато в уравнението на Болцман то е мигновено. По време на еволюцията по

такива пътища частиците акумулират тегло, което носи квантовата информация за системата и се отчита при оценката на физическите средни. Този модел има голямо значение за анализ и разбиране на квантовия транспорт, но изчислителните проблеми са такива, че практически може да бъде приложен за изследване на първите няколко десетки фемтосекунди от еволюцията.

За да се избегнат огромните изчислителни предизвикателства, е необходимо да се търси опростяване на физичния модел в дискутираната йерархията уравнения.

Както вече дискутирахме, от централно значение за съвременното моделиране на наноструктури е уравнението на Вигнер-Болцман. За него са създадени два стохастични метода на еволюция на числени частици.

При първия метод квантовата информация се пренася от безразмерна величина, наречена афинност [121], [122]. Използва се метод на разделяне на променливите. Уравнението се дискретизира по време, като решението се представя като линейна комбинация от δ функции - частици във фазовото пространство с коефициенти, които определят афинността на частиците. Последната се актуализира с приноса от потенциала на Вигнер на всяка стъпка по време.

При втория метод квантовата информация се пренася от теглото или алтернативно от знака на частицата [123]. Той ще бъде изведен по-надолу с помощта на итерационния подход. Най-общо Монте Карло методи за квантов транспорт може да бъдат изведени, като се използват и двата начина, описани в подсекция 1.7: Може в съответствие с (1.50) да се търси решение на уравнението в дадена точка, което осигурява контролирана точност на оценката. В този случай прилагането на Монте Карло алгоритмите е съвсем формално и не се търси физическа или вероятностна интерпретация, защото еволюцията е обратно във времето. Симулационните резултати, използвани за анализ на уравненията на Levinson и Barker-Ferry в първата част на тази глава, са получени именно по този начин: самите уравнения и без това са лишени от физическа прозрачност. Към уравнението на Вигнер-Болцман е подхождено по алтернативния начин. Във

втората част на тази глава е изведено съответното на (1.53) спрегнато уравнение, функционал от решението на което се търси с помощта на (1.54). Това води до обръщане посоката на еволюция в съответните алгоритми. Вероятностният характер на оператора на разсейване на Болцман вече може да се разпростре и към квантовия му аналог. В частност, един строго квантов процес, каквото е взаимодействието с потенциала на Вигнер, може да се интерпретира и обясни изцяло в класически понятия, а именно като генерация и аниhilация на частици с различен знак [123].

Така съответстващият на уравнението на Вигнер-Болцман транспортен процес се състои от явления на дрейф, на разсейване на генерация и на аниhilация на такива частици.

3.3.1 Формулировка на задачата

Разглежда се случай на стационарен транспорт, където физическите условия на контактите определят поведението на разглеждания прибор. Последният обменя електрони с два или повече резервоари чрез тези контакти, означавани с b . Граничните условия на контактите се дават от функцията на Максвел-Болцман $f_b(\mathbf{r}_b, \mathbf{p})$, която в сравнение с (1.16). Зависи и от позицията, например чрез плътността на легиращите примеси [13]. Средните стойности на физическите величини се определят от функционали на решението $f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ на уравнението на Вигнер-Болцман. Средната стойност $\langle A \rangle$ на физичната величина A представяна от функцията $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ - например като изразите за скорост плътност или енергия, се определят от функционала (f_w, A) :

$$\langle A \rangle = \int_D d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (f_w, A) . \quad (3.59)$$

където D е областта на прибора. Така за оценка на средната стойност уравнението (3.59) изисква познаването на решението f_w . Алтернативна формулировка на израза за средната стойност $\langle A \rangle$ се получава с помощта на спрегнатото уравнение. Изводът на това уравнение започва с формулировката на стационарното

уравнение с помощта на някои удобни за Монте Карло анализа величини.

3.3.1.1 Стационарно уравнение на Вигнер-Болцман

Стационарното уравнение има вид:

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d\mathbf{p}' V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}') + \int d\mathbf{p}' f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}') S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) - f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \lambda(\mathbf{p}). \quad (3.60)$$

където $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \hbar \mathbf{p} / m$ и m са скоростта и ефективната маса на електрона. $S(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ е вече въведената честота на разсейване от състояние $(\mathbf{r}, \mathbf{p}')$ в състояние $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, докато $\lambda(\mathbf{p}) = \int S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') d\mathbf{p}'$. Ще бъде използвана също антисиметричността на потенциала на Вигнер:

$$V_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\hbar(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{s} \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}) \left(V(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2}) - V(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2}) \right). \quad (3.61)$$

Характеристики на така редуцирания оператор на Лиувил в лявата страна на (3.60) са

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r} + \mathbf{v}(\mathbf{p})t, \quad \mathbf{p}(t) = \mathbf{p}. \quad (3.62)$$

Стационарната траектория $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ се инициализира от точката $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ в момент, който съгласно с твърдение (2.3.1) може да бъде избран 0.

Уравнение (3.60) може да бъде преформулирано, като потенциалът на Вигнер се разложи на две допълващи се части:

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

Така функцията V_w^+ е равна на V_w , ако потенциалът на Вигнер е положителен, и е нула в противен случай. Това може да се запише и така:

$$V_w^+ = V_w \xi(V_w),$$

където ξ е функция на Хевисайд. Физичната интерпретация на функцията γ е дискутирана в следващата секция. След добавяне на $\gamma(\mathbf{r})f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ към двете страни на (3.60), уравнението може да се формулира по следния начин:

$$(\mathbf{v}(\mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mu(\mathbf{r}, \mathbf{p})) f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d\mathbf{p}' \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{p}') f_w(\mathbf{r}, \mathbf{p}'), \quad (3.63)$$

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}', \mathbf{p}) = V_w^+(\mathbf{r}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}) - V_w^+(\mathbf{r}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') + S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) + \gamma(\mathbf{r})\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (3.64)$$

$$\mu(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \lambda(\mathbf{p}) + \gamma(\mathbf{r}). \quad (3.65)$$

В съответствие с Уравнение (3.63) се трансформира в интегрално уравнение по същият начин както (2.44).

3.3.1.2 Интегрален вид

Интегралната форма на уравнението на Вигнер-Болцман се записва с помощта на параметризираната обратно във времето траектория $(\mathbf{r}(t'), \mathbf{p}(t'))$, инициализирана от $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \quad (3.66)$$

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

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

Това уравнение може да бъде интерпретирано по аналогия с интегралната форма на уравнението на Болцман. Последното се получава като формално се положи потенциалният член да бъде равен на нула. Тогава експонентата в (3.66) става вероятност за дрейф без разсейване за интервал от време $(t', 0)$ по правилната траектория $\beta(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, която минава през $(\mathbf{r}, \mathbf{p}), 0$. Разграничават се два

приноса към стойността на решението f в тази точка $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. f_0 е частта от граничната функция f_b , която остава върху β въпреки процесите на разсейване. Другият член дава натрупаните от предишни времена t' приноси на f в точка $\mathbf{r}(t')$, разсеяни съгласно S от навсякъде в пространството на импулсите в правилния за β импулс $\mathbf{p}(t')$. Конкретните стойности fS са умножени след това с експонентата, за да отчете частта, която ще бъде изведена от траекторията в резултат на разсейването от фонони. Тази картина може да бъде запазена и след обратното включване на потенциала на Вигнер. Тогава V_w^+ в (3.64) има ясна интерпретация на разсейване в резултат от потенциала на Вигнер. Функцията γ тогава има смисъл на сумарната честота на разсейване от потенциала на Вигнер, в пълна аналогия на сумарната честота на разсейване от фонони λ . Тогава $\gamma\delta$ става функция на саморазсейване. Основната разлика между S и Γ обаче идва от факта, че докато първата е неотрицателна функция, то във втората има член със знак минус, (3.64). Този минус изключва директна вероятностна интерпретация на уравнението в термините на класически частици.

След тази стъпка граничните условия f_0 се появяват явно в уравнението. f_0 заедно с решението g на едно уравнение, спрегнато на (3.66), водят до търсения израз очакваните стойности на физическите средни.

3.3.2 Спрегнатото уравнение

Теорема 3.3.1 *Спрегнатото на (3.66) уравнение, съответстващо на физичната задача (3.59), има вид:*

$$g(\mathbf{r}', \mathbf{p}') = \int d\mathbf{p} \int_0^\infty dt \theta_D(\mathbf{r}') \Gamma(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p}) \times \exp\left(-\int_0^t \mu(\mathbf{r}'(y), \mathbf{p}(y)) dy\right) g(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}(t)) + A(\mathbf{r}', \mathbf{p}') . \quad (3.67)$$

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

Доказателство: Уравнение (3.66) може да бъде формално записано като уравнение на Фредхолм от втори вид:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{r}', \mathbf{p}') K(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{r}, \mathbf{p}) + f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) . \quad (3.68)$$

Ядрото K е увеличено с делта функция по позицията, за да се прибави интегриране по $\mathbf{r}'$:

$$K(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int_{-\infty}^0 dt' \Gamma(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p}(t')) \times \exp\left(-\int_{t'}^0 \mu(\mathbf{r}(y), \mathbf{p}(y)) dy\right) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}(t')) \theta_D(\mathbf{r}') . \quad (3.69)$$

Функцията θ_D , която е индикатор на симулационната област, осигурява правилната стойност $t_b^-(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ в долната граница на интеграла по време.

Спрегнатото уравнение има същото ядро като (3.68), но интегрирането се провежда по непримованите променливи. Съгласно с (1.53) свободният член се избира да бъде функцията, отговаряща на физичната величина A :

$$g(\mathbf{r}', \mathbf{p}') = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} K(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{r}, \mathbf{p}) g(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + A(\mathbf{r}', \mathbf{p}') . \quad (3.70)$$

Решението g зависи от свободния член A , което не е записано явно за простота на означенията. Това уравнение все още съдържа обратна параметризация на траекториите. Нормална параметризация напред във времето се въвежда първо чрез смяна на интеграционните променливи от $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ на

$$\mathbf{r}'' = \mathbf{r}(t'), \quad \mathbf{p}'' = \mathbf{p}(t')$$

обратно във времето по траекторията, инициализирана от $\mathbf{r}, \mathbf{p}$. С помощта на (1.20) спрегнатото уравнение (3.70) се получава в нормална параметризация. Интегрирането по $\mathbf{r}''$ може да бъде изпълнено благодарение на делта функцията в K . Заместването на $\mathbf{p}''$ с $\mathbf{p}$ и $-t'$ с t позволява уравнението да се изрази в компактен вид (3.67): Уравнението има желаните качества да съдържа интегриране по крайните състояния и променливата по време да е положителна.

■

Решението на (3.67) може да бъде изразено в ред на Нойман в резултат от итеративно заместване на уравнението в себе си. Удобно е първо да се използва редът за нормално параметризираното уравнение (3.70), което води до (3.67) след интегриране по пространствената променлива. Като се въведе точката $Q = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$, уравнението се записва формално като:

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

със съответният ред на Нойман:

$$\begin{aligned} g(Q) &= \int dQ' (\delta(Q - Q') + \sum_{n=1}^{\infty} K^n(Q, Q')) A(Q') \\ &= (I - K)^{-1} A, \end{aligned} \quad (3.71)$$

където I е единичният оператор, и

$$K^n(Q, Q') = \int dQ_1 K(Q, Q_1) K^{n-1}(Q_1, Q').$$

Итеративният ред за (3.67) е еквивалентен на (3.71), с единствената разлика, че всички пространствени интегрирания в последователните членове са вече изпълнени. Причината за избора на (3.71) е, че пространственото интегриране водещо до (3.67), свързва независимите променливи и така прави невъзможно формулирането на удобна рекурсивна връзка между последователните членове на итеративния ред на това уравнение. По тази причина ще използваме факта, че последователните членове от реда на Нойман за (3.67) са равни на съответните членове в (3.71),

$$g(Q) = \sum_{n=0}^{\infty} K^n A = (I - K)^{-1} A , \quad (3.72)$$

Ядрото в (3.67) може да се запише в явен вид като $K(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p}, t)$, което води до следния запис на втората итерация на (3.72):

$$K^{(2)} A = \int dt_1 \int d\mathbf{p}_1 \int dt_2 \int d\mathbf{p}_2 K(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p}_1, t_1) K(\mathbf{r}_1(t_1), \mathbf{p}_1(t_1), \mathbf{p}_2, t_2) A(\mathbf{r}_2(t_2), \mathbf{p}_2(t_2)). \quad (3.73)$$

Уравнение (3.73) дава възможност за анализ на еволюцията на пространствената координата $\mathbf{r}$, която е пасивна променлива не взимаща участие в интегрирането: траекторията $(\mathbf{r}_1(t), \mathbf{p}_1(t))$, инициализирана от $(\mathbf{r}', \mathbf{p}_1)$, преминава в траектория $(\mathbf{r}_2(t), \mathbf{p}_2(t))$, инициализирана от $(\mathbf{r}_1(t_1), \mathbf{p}_2)$. Този факт ще бъде използван по-долу при физическата интерпретация на извеждания Монте Карло метод.

3.3.3 Итерационно представяне на физичните средни

Съгласно с (1.54) е вярно равенството $(f, A) = (f_0, g)$. По такъв начин очакваната стойност на физичната величина A се представя чрез граничните условия f_0 и решението на (3.67),

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int_D d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f_b(\mathbf{r}(t_b^-), \mathbf{p}(t_b^-)) \times \\ &\exp\left(-\int_{t_b^-}^0 \mu(\mathbf{r}(y), \mathbf{p}(y)) dy\right) g(\mathbf{p}, \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.74)$$

където t_b^- заедно с обратната във времето траектория $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ са определени от $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$.

Понеже f_b е дефинирано само върху границата ∂D , и тук както и в случая на стационарен класически транспорт е необходима трансформация, която превръща обемния интеграл в интеграл по границата. Условието за теорема (2.3.2) са валидни и в този случай, така че направо може да бъде използван резултатът (2.52):

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \oint_{\partial D} d\sigma(\mathbf{r}_b) \int_{P_+} d\mathbf{p}_b \int_0^\infty dt_0 |v_\perp(\mathbf{p}_b)| f_b(\mathbf{r}_b, \mathbf{p}_b) \times \\ &\exp\left(-\int_0^{t_0} \mu(\mathbf{r}_b(y), \mathbf{p}_b(y)) dy\right) g(\mathbf{r}_b(t_0), \mathbf{p}_b(t_0)). \end{aligned} \quad (3.75)$$

Заместването на g със съответния ред на Нойман (3.72) води до следното ите-

рационално представяне на $\langle A \rangle$:

$$\langle A \rangle = (b, (I - K)^{-1}A) = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - \tilde{K})^{-1}\tilde{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \langle A \rangle_i . \quad (3.76)$$

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 следващият $\tilde{K}$. По този начин $\tilde{A}$ се получава като към последния множител, A , се аташира експонентата в ляво. Така членът от нулев порядък $\langle A \rangle_0 = (\mathbf{v}_\perp f_b, \tilde{A})$ се дава от дясната страна на (3.75), с $A(\mathbf{r}_b(t_0), \mathbf{p}_b(t_0))$ на мястото на g . Първият член е:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_1 = & \oint_{\partial D} d\sigma(\mathbf{r}_b) \int_{P_+} d\mathbf{p}_b \int_0^\infty dt_0 \int d\mathbf{p}_1 \int_0^\infty dt_1 |v_\perp(\mathbf{p}_b)| f_b(\mathbf{r}_b, \mathbf{p}_b) \times \\ & \exp\left(-\int_0^{t_0} \mu(\mathbf{r}_b(y), \mathbf{p}_b(y)) dy\right) \theta_D(\mathbf{r}_b(t_0)) \Gamma((\mathbf{r}_b(t_0), \mathbf{p}_b(t_0), \mathbf{p}_1) \times \\ & \exp\left(-\int_0^{t_1} \mu(\mathbf{r}_1(y), \mathbf{p}_1(y)) dy\right) A(\mathbf{r}_1(t_1), \mathbf{p}_1(t_1)) , \end{aligned} \quad (3.77)$$

като траекторията $(\mathbf{r}_1(t), \mathbf{p}_1(t))$ е инициализирана от $(\mathbf{r}_b(t_0), \mathbf{p}_1)$. Следващият член $\langle A \rangle_2$ се извежда с помощта на (3.73). Формално той се получава, ако (3.77) се увеличи с интеграл по $\mathbf{p}_2$ и t_2 , и A се замени с $\theta\Gamma$. Произведението

$$\tilde{A}_2 = \exp\left(-\int_0^{t_2} \mu(\mathbf{r}_2(y), \mathbf{p}_2(y)) dy\right) A(\mathbf{r}_2(t_2), \mathbf{p}_2(t_2)), \quad (3.78)$$

се появява в края на израза за $\langle A \rangle_2$ като интегранд на времето t_2 . Следващите членове в (3.76) се извеждат последователно като се прилагат същите правила. Представянето (3.76) е основен резултат при третиране на проблеми за електронен транспорт, определени от гранични условия. То показва, че познаването на условията по границата е достатъчно, за да бъдат определени обемни интегрални, дефинирани чрез (3.59) и по такъв начин да се определи еднозначно $\langle A \rangle$. Както и в случай на класически транспорт, само подпространството P_+ на граничните състояния $\mathbf{p}_b$, имащи компонента на скоростта $\mathbf{v}_\perp$, сочеща навътре в областта

D , се отчитат в (3.75), и така те определят граничните условия. Останалата част от състоянията не е известна предварително и се определя от процеса на транспорт в областта.

Редат (3.76) ще бъде анализиран в термините на вероятностни плътности.

3.3.4 Монте Карло анализ на $\langle A \rangle$

Ще бъде показано как формалното прилагане на теорията на Монте Карло методите води до алгоритъм, съответстващ на процес на еволюция на частици, който е общ и за квантовата, и за класическата компоненти на електронния транспорт. За целта е необходимо интегралите в получения ред за $\langle A \rangle$ да бъдат представени като произведения на вероятностни плътности и случайни величини. Голямо предимство за такова представяне е структурата на интегралите, съставени от граничен член b , итерации на ядрото $\tilde{K}$ и завършващи с $\tilde{A}$. Достатъчно е да бъде отделени от всяка от тези величини подходящи членове, които да имат смисъл на вероятностни плътности и после да се анализира възможността за обединяването им в процес, който има физична интерпретация. Тези величини участват в уравнение (3.77), към което ще се реферираме често в изложението по-нататък.

3.3.4.1 Инжектиране от границата

Благодарение на теорема (2.3.2) граничният член е същият както в случая на класически транспорт, което дава възможност за нормализационни фактори да бъдат използвани изразите (2.61) и (2.62)

$$j_{\perp}(\mathbf{r}_b) = \int_{P_+} d\mathbf{p} |v_{\perp}(\mathbf{p})| f_b(\mathbf{p}, \mathbf{r}_b), \quad \Phi = \oint_{\partial D} j_{\perp}(\mathbf{r}) d\sigma(\mathbf{r}), \quad (3.79)$$

представляващи нормалната компонента на потока електрони навътре в D , както и на целия поток. Така граничният член

$$p_b(\mathbf{r}_b, \mathbf{p}_b) = \frac{j_\perp(\mathbf{r}_b)}{\Phi} \frac{|v_\perp(\mathbf{p}_b)| f_b(\mathbf{r}_b, \mathbf{p}_b)}{j_\perp(\mathbf{r}_b)} = p_{b1}(\mathbf{r}_b) p_{b2}(\mathbf{r}_b, \mathbf{p}_b)$$

е произведение от условни вероятностни плътности, които водят до същите правила, използвани в класическия Монте Карло метод за инжекция на частици от границата. В сила остава и възможността да се замени явното познаване на потока Φ с познаването на плътността на електроните в някоя част на симулационната област, например в контактите, както е дискутирано в края на теорема (2.3.3).

3.3.4.2 Вероятностна интерпретация на $\tilde{K}$

След умножение и деление с μ на $\tilde{K}$ се получава:

$$\tilde{K}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p}, t) = p_t(t, \mathbf{r}', \mathbf{p}') \theta_D(\mathbf{r}'(t)) \frac{\Gamma(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t), \mathbf{p})}{\mu(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t))},$$

$$p_t = \mu(\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t)) \exp\left(-\int_0^t \mu(\mathbf{r}'(y), \mathbf{p}'(y)) dy\right).$$

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 може да бъде записан както следва:

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma(\mathbf{r}', \mathbf{p}', \mathbf{p})}{\mu(\mathbf{r}', \mathbf{p}')} &= p_\lambda(\mathbf{r}', \mathbf{p}') p_{ph}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) + p_\gamma(\mathbf{r}', \mathbf{p}') \times \\ &\left(\frac{1}{3} p_w^+(\mathbf{r}', \mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{1}{3} p_w^-(\mathbf{r}', \mathbf{p} - \mathbf{p}') + \frac{1}{3} p_\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \right) 3 \\ p_\lambda(\mathbf{r}', \mathbf{p}') &= \frac{\lambda(\mathbf{p}')}{\mu(\mathbf{r}', \mathbf{p}')}, \quad p_\gamma(\mathbf{r}', \mathbf{p}') = \frac{\gamma(\mathbf{r}')}{\mu(\mathbf{r}', \mathbf{p}')}, \\ p_{ph}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= \frac{S(\mathbf{p}', \mathbf{p})}{\lambda(\mathbf{p}')}, \quad p_w^\pm(\mathbf{r}', \mathbf{p}) = \frac{V_w^\pm(\mathbf{r}', \mathbf{p})}{\gamma(\mathbf{r}')} . \end{aligned} \quad (3.80)$$

като $p_w^- = p_w^+$ се въвежда за удобство. Съгласно с уравнение (3.65), p_λ и p_γ са две допълващи се вероятности, които могат да се използват да се избере или p_{ph} , или членът в скобите на (3.80). 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 състоянието 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, образувачи $\tilde{K}$, 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^- в (3.80). 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 :

$$K_e = p_t \left(p_\lambda p_{ph} + p_\gamma \left(p_2 p_w^+ - p_2 p_w^- + p_2 p_\delta \right) \right), \quad (3.81)$$

генерираща итеративно възможни събития от еволюцията на една частица.

3.3.4.3 Анализ на $\tilde{A}$

Интегрантът в (3.78) се умножава и дели на μ , с което директно се представя като произведение от вероятностна плътност и случайна величина'

$$\tilde{A} = p_t(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))}{\mu(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))}. \quad (3.82)$$

Случайната величина ψ_A , отговаряща на физичната величина A , е членът A/μ , оценяван в края на свободния полет, генериран от p_t . Трябва да се отбележи, че понеже се интересуваме от средни стойности на физичните величини в дадена подобласт на Ω на симулационната област, то A съдържа неявно индикатора θ_Ω на тази подобласт. Така, ако крайната точка на свободния полет е извън Ω , случайната величина е нула. Алтернативен начин за представяне на ψ_A се получава чрез интегриране по части по времето t на

$$\tilde{A} = p_t(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \int_0^t dy A(\mathbf{r}(y), \mathbf{p}(y)). \quad (3.83)$$

точно както в уравнение (2.74). При това представяне ψ_A се получава като интеграл по траекторията параметризирана от y . Всъщност, поради индикатора θ_Ω , само частта от пътя, принадлежащ на Ω допринася към интеграла.

Двете представяния (3.82) и (3.83) на случайната величина ψ_A водят до обобщаване за случая на смесен транспорт на теореми (2.3.3) и (2.3.4) и съответстващите им алгоритми (2.3.1) и (2.3.2). При смесен транспорт обаче, заедно с ψ_A трябва да се отчита и тегловният фактор w , натрупващ се с всяка итерация на $\tilde{K}$. При класически транспорт такова натрупване няма, защото този фактор е точно единица. Така натрупването на тегло, дължащо се на квантовата компонента на μ , е основна характеристика при смесен или кохерентен транспорт. Затова в изложението по-нататък под ψ_A се разбира който и да е от двата дискутирани в секция (2.3.3) начина на оценка на средната величина, като сега вниманието се фокусира върху теглото: на базата на въведените вероятностни съотношения и случайни величини ще бъдат формулирани два Монте Карло алгоритъма за тази задача. В изложението често ще бъде подчертавана аналогията с частици, които обаче са с характеристики, даващи възможност да се моделират квантови процеси.

3.3.5 Стохастични алгоритми: Числени и физични аспекти

3.3.5.1 Вериги на Марков: квантови тегла

Въз основа на направения стохастичен анализ се извежда следният алгоритъм за оценка на (3.77). Числените траектории се строят с помощта на p_b , p_t и на условните вероятности от $\tilde{K}$. Случайната величина $\psi_1 = \Phi\theta(\pm 3)^i\psi_A$ се пресмята за всяка една траектория. Средната стойност (1.48) върху N построени траектории оценява члена $\langle A \rangle_1$ в (3.76).

Генерализацията за $\langle A \rangle_n$ е директна. 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

$$\psi_n = \Phi \prod_{k=1}^n \theta_{D_k}(\pm 3)^{i_k} \psi_A = \Phi W_n \psi_A, \quad \psi_{\langle A \rangle} = \sum_n \psi_n. \quad (3.84)$$

Оценката (1.48) 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: $\psi_n = 0 \forall n > k$. Въпреки това такива траектории са независими реализации на случайната величина, като се отчитат чрез знаменателя N . Освен това според (3.76) такива оценки трябва да се направят за всяко n и накрая да бъдат събрани. Благодарение на тези факти една траектория може да се използва за оценка на всички членове в (3.76): траектория, започваща и завършваща на границата на симулационната област, става независима реализация на случайната величина $\psi_{\langle A \rangle}$ в (3.84). 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 3.3.1 :

- 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, в съответствие

с (3.82) или (3.83), 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_h 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).

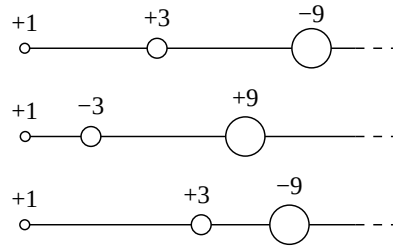
5) Стойността на $\langle A \rangle / \Phi$ се оценява върху N траектории като ν / N .

Стойността на Φ е известна от физичната постановка на задачата или се оценява от други известни физични характеристики както е дискутирано в (3.3.4.1).

3.3.5.2 Класически транспорт и ергодичност

В условията на валидност на класическото приближение, потенциалът на Вигнер допълва оператора на Лиувил с член, отчитащ ускорението от електричната сила. В дясната страна на (3.60) остават само членовете, свързани с фононите, което формално се получава от полагането $\gamma = 0$, ($\mu = \lambda$) в (3.65). Така дясната страна на (3.80) се редуцира до p_{ph} , а еволюцията на частиците се свежда до тази на Болцманови електрони. Наистина инжекцията от границата е една и съща в двата случая, p_t става а класическа вероятностна плътност за свободен полет, разсейването се определя само от S чрез p_{ph} в (3.80), а теглото не се променя. Накрая и ψ_A се отчита по същият начин както в едночастичната техника - стъпка 3) в алгоритми (2.3.1) и (2.3.2).

В частност това обобщава теорема (2.3.4) за случая на стационарен квантов транспорт: ергодичността на системата следва от Монте Карло метода и не е необходимо *a priori* да се предполага еквивалентност между усредняване по ансамбъл и усредняване по време при оценка на очакваните стойности на физическите величини.



Фигура 3.11: На всяка от веригите на Марков съответства по една частица. Абсолютната стойност на теглото на частицата се увеличава след всеки акт на разсейване, а промяната на знака е случайна и се осъществява при реализация на отрицателната компонента на ядрото.

3.3.5.3 Кохерентен транспорт

В кохерентни условия транспортните процеси се ограничават само до квантово взаимодействие между електрона и приложеното електрично поле. Съответно членовете $\lambda = 0$, $\mu = \gamma$ in (3.65) се полагат равни на нула. Съгласно члена в скобите на (3.80), остават явленията на разсейване, които променят статистическите тегла в (3.84). Може да се оцени средното тегло W , което акумулират частиците по време на своята еволюция в симулационната област.

Теорема 3.3.2 *Средното акумулирано тегло W расте експоненциално с времето, прекарвано от частиците в прибора и големината на γ :*

$$W = \exp(2\gamma T) \quad \text{когато} \quad T\gamma \rightarrow \infty. \quad (3.85)$$

Доказателство: Оценката (3.85) е съвсем кратка: 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:

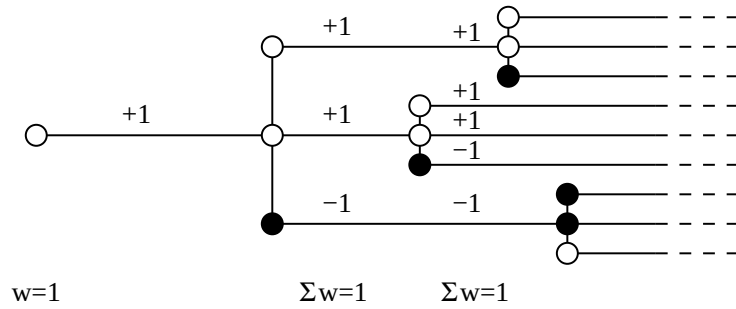
$$W = \pm(3)^n = \left(1 + \frac{2\gamma}{\gamma}\right)^n = \left(1 + \frac{2\gamma T}{n}\right)^n \simeq \exp(2\gamma T).$$



Този резултат е в съгласие с експоненциалния растеж на стандартното отклонение в Монте Карло методи за оценка на интеграли на Файнман [124]. Типични за областта на наноелектрониката размерности са: големина 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, [123]. Следният алтернативен алгоритъм е предложен за решаване на проблема с акумулираното тегло.

3.3.5.4 Разклонени вериги на Марков: Генерация на частици

Генерация В основата на този алгоритъм е идеята за разделяне на частиците, която бе въведена от една от техниките за увеличаване на статистиката, секция (2.1.3), и после използвана в приложенията на самосъгласувания модифициран алгоритъм (2.4.6.1). Сега обаче критерий за разделяне е не навлизането в рядко посещавана област от фазовото пространство, а натрупаното тегло. Предвид свободата на избор за такова разделяне, то може да се съществява след натрупване на дадена избрана абсолютна стойност на теглото, като в граничния случай то може да бъде 1 [125]. В последният случай разделяне става при всяко взаимодействие с потенциала на Вигнер, което формално отговаря на заместване на вероятността $p_2 = 1/3$ в (3.80) с единица. Този подход променя изцяло интерпретацията на квантовото взаимодействие [126]. 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 членовете в (3.80). След взаимодействието една от новите частици съвпада с началната или еквивалентно началната частица оцелява благодарение на делта



Фигура 3.12: Генерация на частици от квантовото взаимодействие. Всяка частица - генерирана или инжектирана от границата, участва със знака си в статистическата оценка.

функцията в скобите на (3.80). 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. От уравнение (3.77) се вижда, че 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 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. 3.12: положителна частица се инжектира от границата. Тя следва постоянна траектория, инициализирана от фазовата точка на инжекция 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,

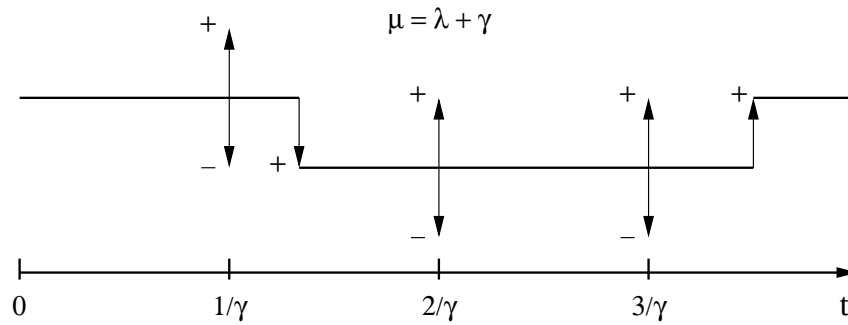
генерирана от p_w^+ (p_w^-), има същия (противоположен) знак на взаимодействащата частица. Последната не усеща взаимодействието и продължава еволюцията по първоначалната траектория. Генерираните частици продължават по траектории, инициализирани от началните им точки, като следват същия процес на еволюция, 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.

Аниhilация 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 плътност¹. Този факт извиква картина на аниhilирани частици, която допълва процеса на кохерентен транспорт. Последният се състои от процеси на генерация, еволюция и аниhilация на положителни и отрицателни частици.

3.3.5.5 Смесен транспорт

Дискутираните гранични случаи за уравнението на Вигнер-Болцман може да бъдат комбинирани като независими компоненти в обща картина на смесен транспорт, където квантови процеси протичат заедно с такива на разсейване и

¹В противния случай трябва да се отчита броят на такива частици, чиито приноси взаимно се унощожават със статистическото усредняване.



Фигура 3.13: 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 .

декохеренция. Взаимодействието с фононите се наслагва в тази картина като повлиява динамиката на частиците. Те не остават върху единствена траектория във фазовото пространство, а се движат по части от траектории, между които биват разсейвани. Според (3.81) 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 3.13. Възможността им да анихилират също остава факт, като следствие от това, че еволюцията има Марков характер: частиците в една и съща фазова точка продължават да имат еднакво вероятно бъдеще и разсъжденията от предишната секция остават в сила. Условие за това е фононите да бъдат моделирани класически: в квантовия случай еволюцията има памет.

Трябва да се отбележи, че представянето на ядрото (3.64), от което следва алгоритъм (3.3.1), както и моделът на генерация на частици, не е единствено. Нека вместо γf_w , към двете страни на уравнение (3.60) се добави αf_w , където α може да варира. Уравнение (3.65) съответно става $\mu = \lambda + \alpha$. Това води до съответна промяна в преходната плътност (3.81), която се обобщава до:

$$K_e = p_t (p_\lambda p_{ph} + p_\gamma p_w^+ - p_\gamma p_w^- + p_\alpha p_\delta). \quad (3.86)$$

Изборът на α дава свобода за модификации на 3.3.1 и на модела на генерация-анихилация, както и създаването на смесени алгоритми, дискутирани от Kosina и Nedjalkov в [127]. Алтернативни интерпретации също са възможни. Например взаимодействието с потенциала на Вигнер може да бъде направено два пъти по-рядко за сметка на 4 генерирани частици. Или друга формулировка на (3.80) може да доведе до събития, където квантовото и фоонното взаимодействие се случват едновременно [127]. Представянето (3.64) обаче има най-ясна и удобна физична интерпретация, която въвежда квантови частици.

Анихилацията на частици облекчава ситуацията, но не решава въпроса с експоненциално нарастващия им брой. Прилагането на модела става възможно благодарение на следният алгоритъм.

3.3.5.6 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 $\langle A \rangle$ (3.76) [123]:

Теорема 3.3.3 *Очакваната стойност $\langle A \rangle$ на физичната величина A може да бъде представена в следния ред:*

$$\langle A \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} (\mathbf{v}_{\perp} f_b, \left((I - L)^{-1} M \right)^k (I - L)^{-1} \tilde{A}), \quad (3.87)$$

където L и M са два оператора:

$$L = p_t \theta_D (p_{\lambda} p_{ph} + p_{\gamma} p_{\delta}), \quad M = p_t \theta_D p_{\gamma} (p_w^+ - p_w^-). \quad (3.88)$$

Доказателство: Веднага се вижда, че тези два оператора представляват декомпозиция на ядрото $\tilde{K}$:

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

Вярно е следното уравнение:

$$(I - \tilde{K})^{-1} = (I - L)^{-1} + (I - \tilde{K})^{-1} M (I - L)^{-1}. \quad (3.89)$$

Наистина, след умножаване с $(I - L)$ от ляво и с $(I - \tilde{K})$ от дясно се получава

$$(I - L) = (I - \tilde{K}) + (I - L)^{-1} (I - \tilde{K})^{-1} M (I - L)^{-1} (I - \tilde{K}). \quad (3.90)$$

Следва заместване на M с тъждеството:

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

Това води до верижно съкращаване на обратните оператори в дясната част на (3.90), в резултат на което и до съкращаване на всички членове.

Решението на (3.89):

$$(I - \tilde{K})^{-1} = (I - L)^{-1} \left(I - M (I - L)^{-1} \right)^{-1} \quad (3.91)$$

се замества в (3.76), в резултат на което се получава (3.87). ■

Преформулираният итерационен ред (3.87) 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. Включването или изключването на последния не повлиява траекторията, така че този оператор съответства на класическа еволюция на траекториите. Така първият член $(A)_1 = (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1}A)$ в (3.87) може да бъде оценен класически: $j = 1, 2, \dots, N_1$ частици се инжектират последователно от границата и тяхната еволюция, съответстваща на $n = 0, 1 \dots$ итерации на L . Съгласно с (3.84), частицата j допринася след всяка итерация n към статистическата сума с $\prod_l^n \theta_{Dl}^{(j)} \psi_{An}^{(j)}$. Тук е добре да се напомни, че ψ_{An} е стойността на физичната величина A , която има частицата разсейвания, усреднена по времето на n -тия свободен полет, или по състоянието преди n -тото разсейване съгласно с уравнения (2.74) или (2.68). Произведението от индикаторите на областта става нула при първо напускането на областта D и остава нула дори и при следващо навлизане, което позволява да се премине към симулация на следващата частица. Очакваната стойност за $(A)_1$ се изразява с помощта на (1.48):

$$(A)_1 \simeq \frac{\Phi}{N_1} \sum_{j,n} \prod_l^n \theta_{Dl}^{(j)} \psi_{An}^{(j)} . \quad (3.92)$$

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:

$$\begin{aligned} (A)_2 &= (P_1, (I - L)^{-1}\tilde{A}), \\ P_1(Q) &= (\mathbf{v}_\perp f_b, (I - L)^{-1}M\delta)(Q) . \end{aligned} \quad (3.93)$$

Сега ще бъде показано, 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^-) . Изразът за очакваната стойност на P_1 е същият като (3.92) с единствената разлика, че ψ_δ се появява на мястото на ψ_A . Следва, че P_1 е плътността w_p на акумулираните частици, умножени с Φ/N_1 . Трябва да се отбележи, че това също така формално доказва аниhilацията на две частици с различен знак, които попадат в една и съща фазова точка.

Така интерпретираното като разпределение на частици в D P_1 участва в израза (3.93) 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 . Разбира се изразът за очакваната стойност зависи от плътността p за избор на началните точки Q на траекториите:

$$(A)_2 \simeq \frac{1}{N_2} \sum_{j,n} \frac{P_1(Q^{(j)})}{p(Q^{(j)})} \prod_l \theta_{Dl}^{(j)} \psi_{An}^{(j)} . \quad (3.94)$$

Тук N_2 е броят на използваните за оценката траектории. Удобен избор на p се дава от израза:

$$p(Q) = |P_1(Q)|/||P_1||, \quad ||P_1|| = \frac{\Phi}{N_1} \int |w_p(Q)| dQ .$$

Ако N_2 е избран равен на броя на всички акумулирани частици, даден от горния интеграл, то (3.94) става:

$$(A)_2 \simeq \frac{\Phi}{N_1} \sum_{j,n} \text{sign} P_1(Q^{(j)}) \prod_l \theta_{Dl}^{(j)} \psi_{An}^{(j)}. \quad (3.95)$$

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. Стойността на всеки принос към сумата в (3.95) се пресмята по един от описаните за ψ_A начини и после се умножава по знака на съответната частица.

По същите траектории може да бъде оценена и величината

$$P_2(Q) = (P_1, (I - L)^{-1} M \delta)(Q). \quad (3.96)$$

Същите аргументи, използвани за P_1 , показват, че P_2 има смисъл на плътност на вторично генерирани частици, умножени с Φ/N_1 . Освен това третият член на реда (3.87) може да се представи като интеграл от P_2 : $(A)_3 = (P_2, (I - L)^{-1} A)$ по същия начин както P_1 и $(A)_2$. Тогава стъпките за оценка на $(A)_2$ може да бъдат приложени за оценка на $(A)_3$ и така нататък.

Получава се итеративен алгоритъм, който оценява последователните членове в реда (3.87) чрез начална инжекция на N_1 частици от границата, следвано от последователни стъпки на изваждане и акумулиране на частици в прибора. Понеже оценките за последователните членове в реда трябва да бъдат също сумирани накрая, то е достатъчно да се поддържа обща за последователните стъпки оценка, която дава направо стойността на $\langle A \rangle$. Префакторът $C = \Phi/N_1$, който се появява в началото на всеки един от последователните членове, се пресмята по същия начин както при бе дискутирано при извеждането на алгоритми (2.3.1) и (2.3.2).

Броят N_1 на инжектираните от границата частици трябва да бъде избран достатъчно голям, за да даде надеждна оценка на първия член от реда (3.87).

Оценката на всички останали членове зависи от този избор. За да се избегне началното налучкване на този брой, алгоритъмът може да започне с един малък брой инжектирани от границата частици, като след това се редуват процеси на изпразването на D от акумулирани частици и инжекция от границата. Да разгледаме схемата, при която акумулираните от инжекцията от границата частици може да се добавят към тези, акумулирани от предишната стъпка на изпразване. Ще бъде доказан следният алгоритъм. Последователността от стъпки се резюмира от

Алгоритъм 3.3.2 :

- 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.

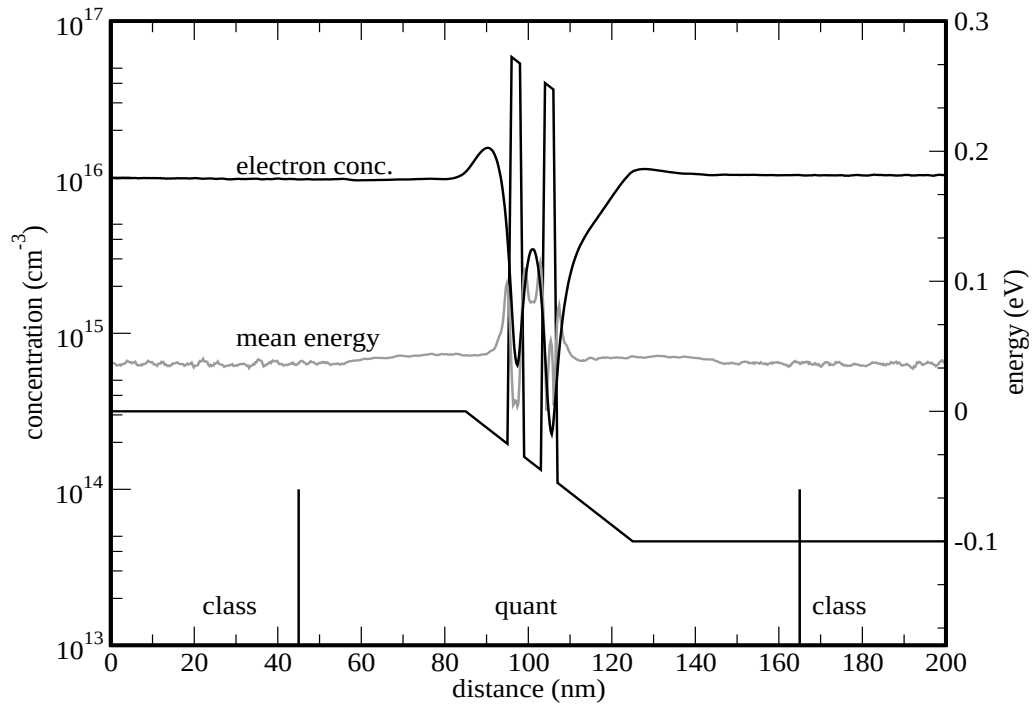
Алгоритъм 3.3.2 може да бъде визуализиран както следва:

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

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 изпразване 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 изпразване 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.

3.4 Симулационни резултати

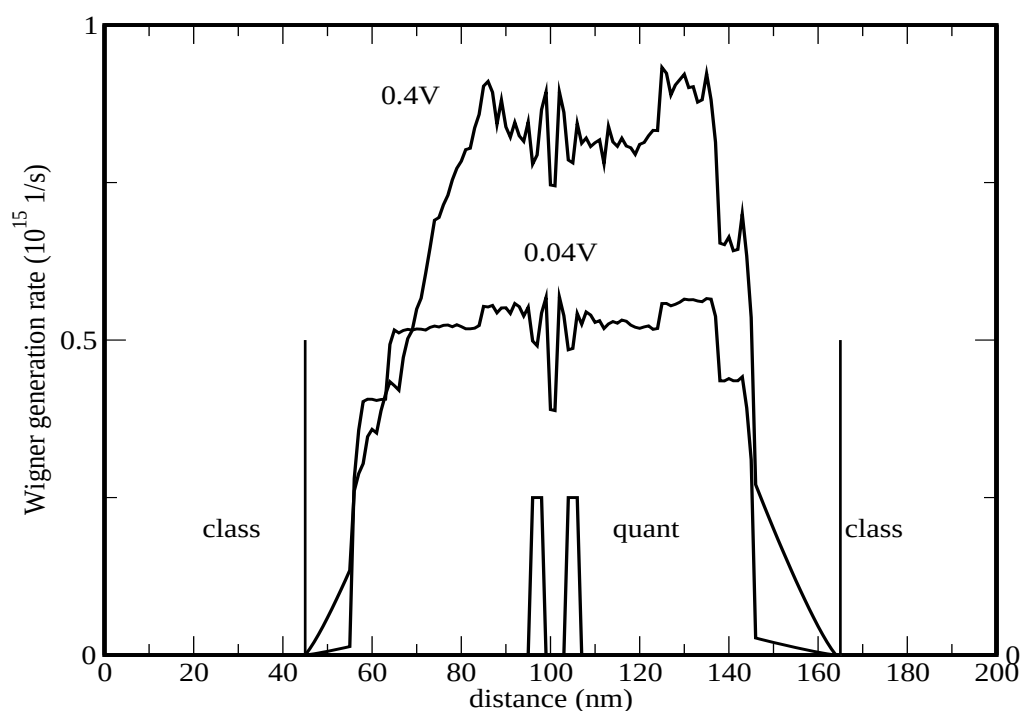
Ще бъдат обсъдени някои симулационни резултати, получени с метода на генерация на частици. Като типични представители на прибори със смесен транспорт, чието поведение се определя и от тунелиране, и от разсейване, са симулирани резонансно-тунелни диоди. Резултатите са сравнени с тези, получени от симулатора NEMO-1D, използващ неравновесни функции на Грийн [127]. 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 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 $0,067m_0$.



Фигура 3.14: Прибор 1: разпределение на потенциала, концентрация на електрони и средна енергия на електрон при $T = 300K$ и $0.1V$ напрежение.

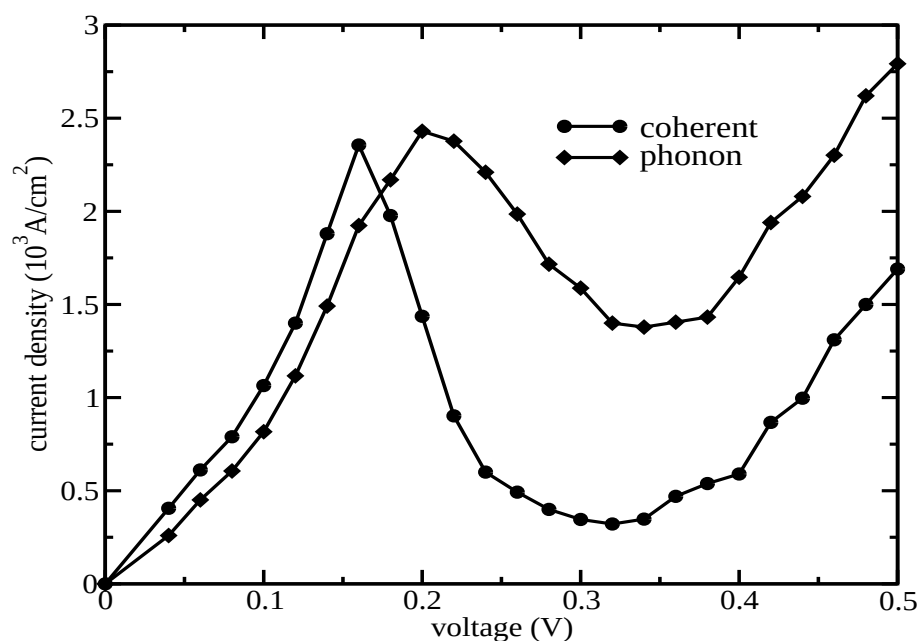
Структурата на Прибор 1, използвана от Shifren *et al.* [128] е показана на Фиг. 3.14. Двете бариери са високи 0.3eV и широки 3nm , ширина на ямата е 5nm . Изменението на потенциала от 10nm преди емитера до 19nm след колектора се смята линейно. Примесната концентрация в контактите е 10^{16}cm^{-3} . Дължината на кохерентност е $L_c = 80\text{nm}$. Скоростта на генерация от потенциала на Вигнер γ за такава структура достига високи стойности (Фиг. 3.15) 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. 3.14, са почти



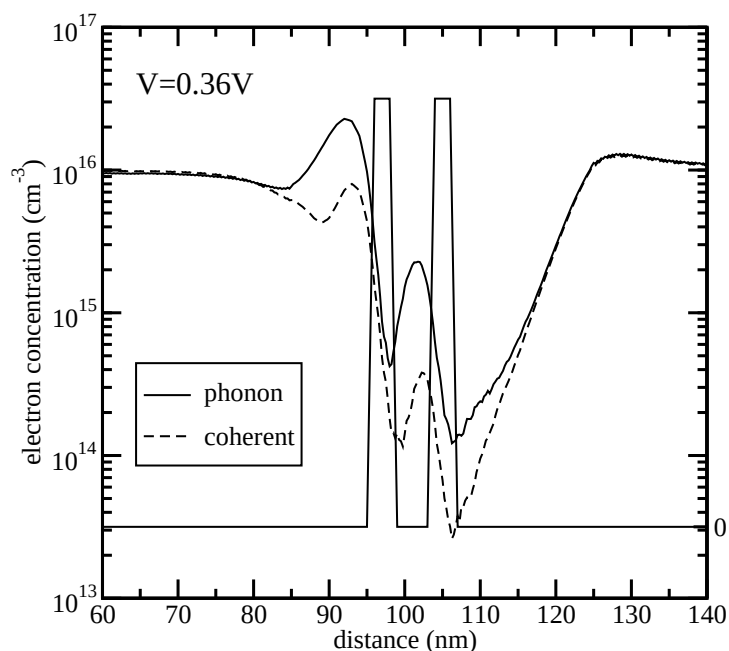
Фигура 3.15: Разпределение на скоростта на генерация $\gamma(x)$ в Прибор 1

константа в контактната област и показват плавно преминаване от класическа към квантова област въпреки силното нарастване на γ , Фиг. 3.15. Фононното разсейване има силен ефект върху характеристиките на прибора, Фиг. 3.16. В сравнение с кохерентния случай разсейването води до повишаване на тока в долината и изместване на напрежението на пиковете. 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. 3.14, което води до изместване в напрежението. Разликата в стойностите на долинния ток е резултат от промяната на електронната концентрация в не-резонансни условия, Фиг. 3.17. Разсейването с фонони води до значително



Фигура 3.16: Прибор 1: Волт-амперни характеристики при кохерентен и смесен режим на транспорт.

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 забелязва, Фиг. 3.18. Тези ефекти не могат да бъдат отчетени коректно от елементарните 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 [13]. 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.*, [129] 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. Концентра-

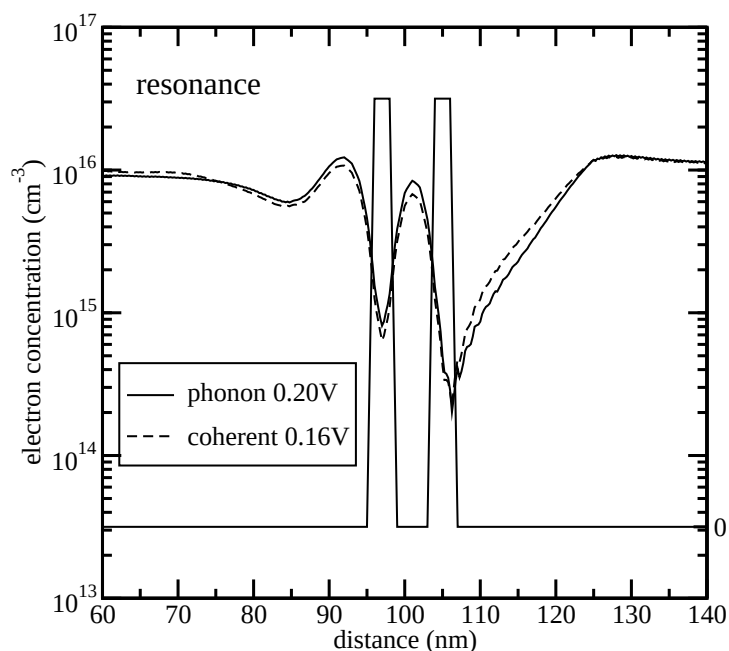


Фигура 3.17: Ефект на разсейването в условия извън резонанс.

цията на примесите в контактите е по-висока: $2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$. Волт-амперните характеристики на този прибор са показани на Фиг. 3.19. Както се очакваше, фононите имат само малък ефект при такъв прибор.

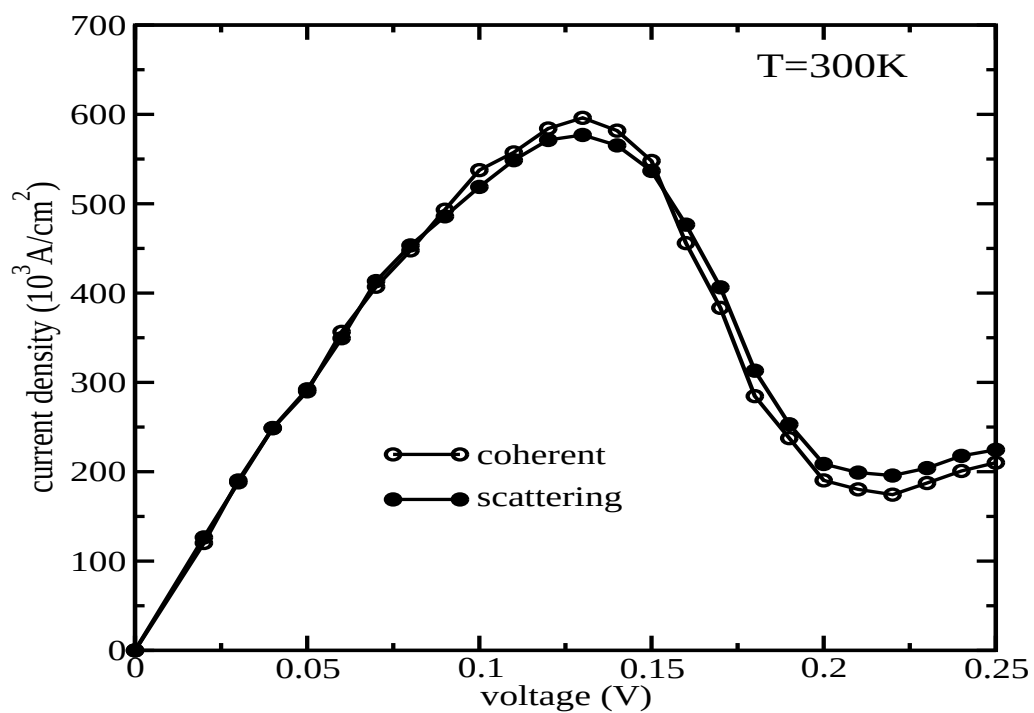
Кохерентните волт-амперни характеристики, получени с Монте Карло метода (QMC) и симулатора NEMO, са показани на Фиг. 3.20. В сравнение с NEMO, малко по-висок пиков ток се получава с метода на частиците. Резултатите показват добро съответствие.

Дължината на кохерентност L_c трябва да се избира внимателно: резултатите на Фиг. 3.21 показват, че само достатъчно големи стойности дават реалистични резултати. Кривата с крайни разлики (FD) е взета от Tsuchiya [129]. Прекалено малка стойност за L_c води до прекалено голяма стъпка на мрежата в моментното пространство и до лоша резолюция за резонансната стойност на енергията.



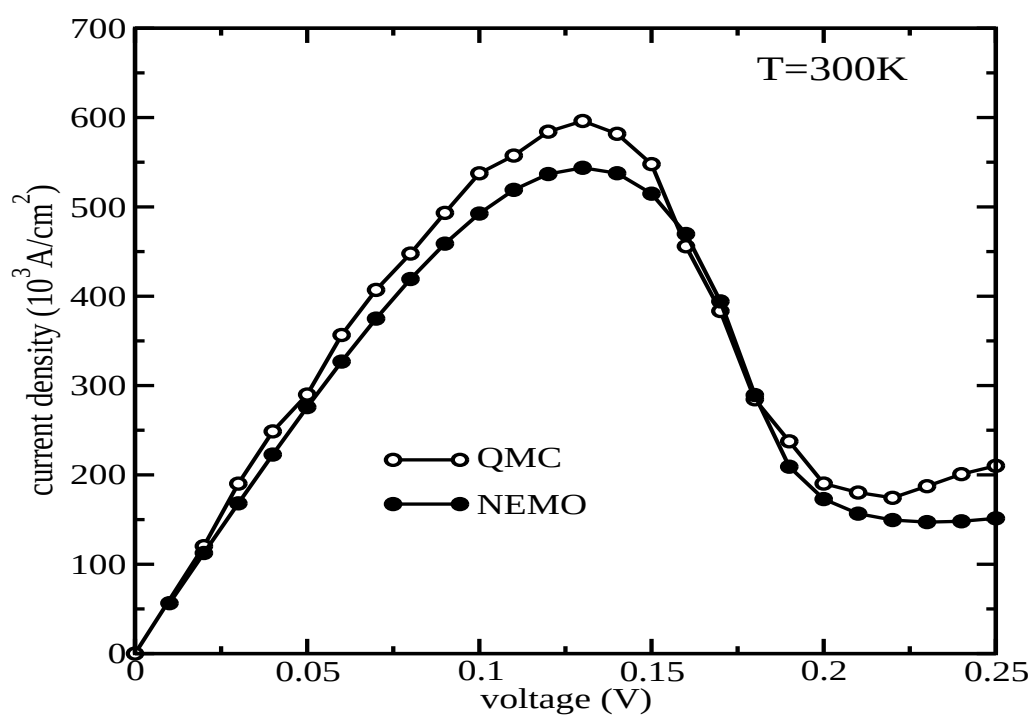
Фигура 3.18: Ефект на разсейването в условия на резонанс.

Фиг. 3.22 показва концентрацията на електрони за различни стойности на напрежението 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.

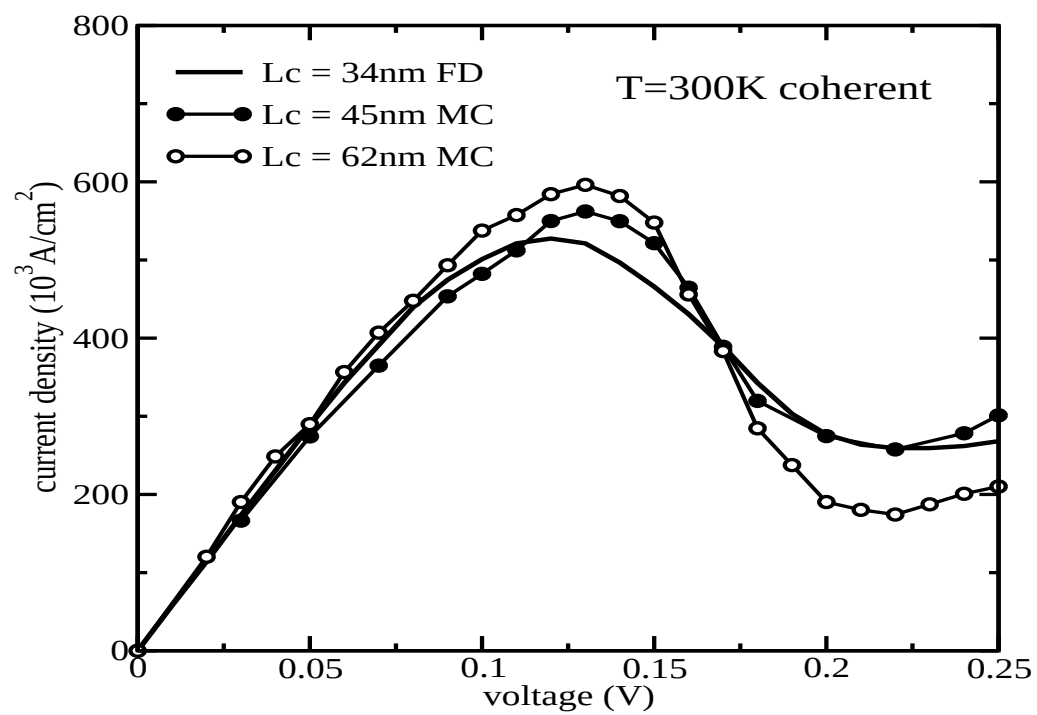


Фигура 3.19: Прибор 2: Волт-амперни характеристики.

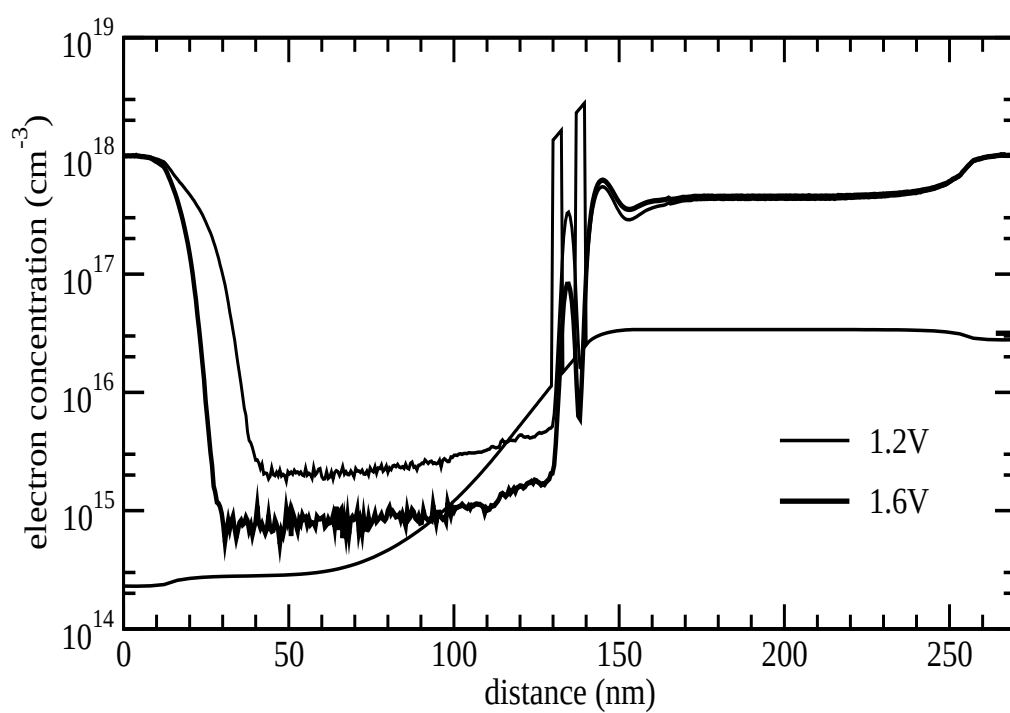
Може да се заключи, че методът на квантовите частици може успешно да се прилага при умерени физични условия в областта между класически и кохерентен транспорт. Ефекти на тунелиране и де-кохеренция от разсейване се отчитат в еднаква степен, като симулационните резултати са в съгласие с други симулационни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



Фигура 3.20: Кохерентни волт-амперни характеристики, получени с квантови частици (QMC) и симулатора NEMO.



Фигура 3.21: Влияние на дължината на кохерентност върху волт-амперните характеристики.



Фигура 3.22: Прибор 3: концентрация на електроните в и извън резонанс.

Глава 4

Авторска справка

4.1 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.

4.2 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 микрорелектроника, TU-Vienna, на които съм много благодарен за плодотворната съвместната работа. Също така и на творческия ентусиазъм 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.

4.3 Цитирани публикации

Публикациите по настоящата дисертация са цитирани 90 пъти. Представени са три избрани публикации: номер едно, пет и двадесет и шест в списъка, които са цитирани съответно 5, 5 и 41 пъти.

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.

Цитирана от:

1. Dollfus, P., Querlioz, D., Saint-Martin, J., Do, V.-N., Bournel, A., Wigner Monte Carlo approach to quantum transport in nanodevices, *Proc. Simulation of Semiconductor Processes and Devices* pp. 277–280, 2008, ISBN: 978-1-4244-1753-7.

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

2. Damien Querlioz, Huu-Nha Nguyen, Jérôme Saint-Martin, Arnaud Bournel, Sylvie Galdin-Retailleau and Philippe Dollfus, Wigner-Boltzmann Monte Carlo approach to nanodevice simulation: from quantum to semiclassical transport, *Journal of Computational Electronics* Vol 8, Numbers 3-4, pp.324-335, DOI: 10.1007/s10825-009-0281-3 2009
3. Damien Querlioz, Jérôme Saint-Martin, Philippe Dollfus, Implementation of the Wigner-Boltzmann transport equation within particle Monte Carlo simulation, *Journal of Computational Electronics* vol. 9, Numbers 3-4, pp. 224-231, DOI: 10.1007/s10825-010-0319-6
4. Huu-Nha Nguyen, Damien Querlioz, Sylvie Galdin-Retailleau, and Philippe Dollfus Semiclassical and Quantum Transport in CNTFETs Using Monte Carlo Simulation *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 58, NO. 3, 2011
5. Huu-Nha Nguyen, Damien Querlioz, Arnaud Bournel, Sylvie Retailleau and Philippe Dollfus, Ohmic and Schottky Contact CNTFET: Transport Properties and Device Performance Using Semi-classical and Quantum Particle Simulation, *Semiconductor-On-Insulator Materials for Nanoelectronics Applications Engineering Materials*, 2011, Part 2, 215-235, DOI: 10.1007/978-3-642-15868-1-12

M. Nadjalkov, 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.

Цитирана от:

1. Philipp Zedler, Gernot Schaller, Gerold Kiesslich, Clive Emary, and Tobias Brandes, Weak-coupling approximations in non-Markovian transport, *Phys. Rev. B* 80, pp. 045309 2009.
2. F. T. Vasko, A. Hernandez-Cabrera, and P. Aceituno, Transient quantum evolution of two-dimensional electrons under photoexcitation of a deep center, *Phys. Rev. B* 77, pp.075310 2008.
3. I. Knezevic Decoherence due to contacts in ballistic nanostructures, *Phys. Rev. B* 77, pp.125301 2008.
4. Damien Querlioz, Jérôme Saint-Martin, Arnaud Bournel, and Philippe Dollfus, Wigner Monte Carlo simulation of phonon-induced electron decoherence in semiconductor nanodevices, *Phys. Rev. B* 78, pp.165306 2008.
5. I. Knezevic, Decoherence and Quantum Transport in Nanodevices, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* Volume 4, Number 4, pp. 749-760 2007.

M. Nadjalkov, 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.

Цитирана от:

1. Nguyen, H.-N., Querlioz, D., Galdin-Retailleau, S., Dollfus, P. Semiclassical and quantum transport in CNTFETs using Monte Carlo simulation (2011) *IEEE Transactions on Electron Devices*, 58 (3), art. no. 5672399, pp. 798-804.
2. Shao, S., Lu, T., Cai, W. Adaptive conservative cell average spectral element methods for transient wigner equation in quantum transport (2011) *Communications in Computational Physics*, 9 (3), pp. 711-739.
3. Querlioz, D., Saint-Martin, J., Dollfus, P. Implementation of the Wigner-Boltzmann transport equation within particle Monte Carlo simulation (2010) *Journal of Computational Electronics*, 9 (3-4), pp. 224-231.
4. Yoder, P.D., Grupen, M., Smith, R.K. Demonstration of intrinsic tristability in double-barrier resonant tunneling diodes with the wigner transport equation (2010) *IEEE Transactions on Electron Devices*, 57 (12), art. no. 5620965, pp. 3265-3274.
5. Brosens, F., Magnus, W. Newtonian trajectories: A powerful tool for solving quantum dynamics (2010) *Solid State Communications*, 150 (43-44), pp. 2102-2105.
6. Atanassov, E., Karaivanova, A., Gurov, T. Quasi-random approach in the grid application SALUTE (2010) *Lecture Notes in Computer Science* (including subseries *Lecture Notes in Artificial Intelligence* and *Lecture Notes in Bioinformatics*), 6068 LNCS (PART 2), pp. 204-213.
7. Atanassov, E., Dimitrov, D.Sl., Gurov, T. SALUTE grid application using message-oriented middleware (2009) *AIP Conference Proceedings*, 1186, pp. 183-191.
8. Magnus, W., Brosens, F., Sorée, B. Time dependent transport in 1D micro- and nanostructures: Solving the Boltzmann and Wigner-Boltzmann equations (2009) *Journal of Physics: Conference Series*, 193, art. no. 012004, .
9. Querlioz, D., Saint-Martin, J., Dollfus, P. Implementation of the Wigner-Boltzmann transport equation within particle Monte Carlo simulation (2009) *Journal of Computational Electronics*, 8 (3-4), pp. 224-231.
10. Wójcik, P., Spisak, B.J., Wołoszyn, M., Adamowski, J. Self-consistent Wigner distribution function study of gate-voltage controlled triple-barrier resonant tunnelling diode (2009) *Semiconductor Science and Technology*, 24 (9), art. no. 095012, .
11. Querlioz, D., Saint-Martin, J., Dollfus, P. Decoherence due to electron-phonon scattering in semiconductor nanodevices (2009) *Proceedings - 2009 13th International Workshop on Computational Electronics, IWCE 2009*, art. no. 5091101, .
12. Nguyen, H.-N., Querlioz, D., Galdin-Retailleau, S., Bournel, A., Dollfus, P. Wigner Monte Carlo simulation of CNTFET: Comparison between semi-classical and quantum transport (2009) *Proceedings - 2009 13th International Workshop on Computational Electronics, IWCE 2009*, art. no. 5091161
13. Barraud, S. Phase-coherent quantum transport in silicon nanowires based on Wigner transport equation: Comparison with the nonequilibrium-Green-function formalism (2009) *Journal of Applied Physics*, 106 (6), art. no. 063714, . Cited 4 times.

14. Brosens, F., Magnus, W. Carrier transport in nanodevices: Revisiting the Boltzmann and Wigner distribution functions (2009) *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 246 (7), pp. 1656-1661. Cited 4 times.
15. Adessi, C., Avriller, R., Blase, X., Bournel, A., Cazin d'Honincthun, H., Dollfus, P., Frégonèse, S., Galdin-Retailleau, S., López-Bezanilla, A., Maneux, C., Nha Nguyen, H., Querlioz, D., Roche, S., Triozon, F., Zimmer, T. Multiscale simulation of carbon nanotube devices (2009) *Comptes Rendus Physique*, 10 (4), pp. 305-319.
16. Jaud, M.-A., Barraud, S., Saint-Martin, J., Bournel, A., Dollfus, P., Jaouen, H. A Pearson effective potential for Monte Carlo simulation of quantum confinement effects in nMOSFETs (2008) *IEEE Transactions on Electron Devices*, 55 (12), pp. 3450-3458. Cited 3 times.
17. Atanassov, E., Gurov, T., Karaivanova, A. Ultra-fast semiconductor carrier transport simulation on the grid (2008) *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4818 LNCS, pp. 461-469. Cited 1 time.
18. Dollfus, P., Querlioz, D., Saint-Martin, J., Do, V.-N., Bournel, A. Wigner Monte Carlo approach to quantum transport in nanodevices (2008) *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, SISPAD*, art. no. 4648291, pp. 277-280. Cited 2 times.
19. Novakovic, B., Knezevic, I. Effect of contacts on quantum transport in nanostructures (2008) *2008 8th IEEE Conference on Nanotechnology, IEEE-NANO*, art. no. 4617094, pp. 362-365.
20. Wójcik, P., Spisak, B.J., Wołoszyn, M., Adamowski, J. Application of non-classical distribution function to transport properties of semiconductor nanodevices (2008) *Acta Physica Polonica A*, 114 (5), pp. 1431-1436. Cited 2 times.
21. Querlioz, D., Saint-Martin, J., Bournel, A., Dollfus, P. Wigner Monte Carlo simulation of phonon-induced electron decoherence in semiconductor nanodevices (2008) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 78 (16), art. no. 165306, . Cited 8 times.
22. Sangiorgi, E., Palestri, P., Esseni, D., Fiegna, C., Selmi, L. The Monte Carlo approach to transport modeling in deca-nanometer MOSFETs (2008) *Solid-State Electronics*, 52 (9), pp. 1414-1423. Cited 2 times.
23. Knezevic, I. Decoherence due to contacts in ballistic nanostructures (2008) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 77 (12), art. no. 125301, . Cited 1 time.
24. Sangiorgi, E., Palestri, P., Esseni, D., Fiegna, C., Selmi, L. The Monte Carlo approach to transport modeling in deca-nanometer MOSFETs (2008) *ESSDERC 2007 - Proceedings of the 37th European Solid-State Device Research Conference*, art. no. 4430881, pp. 48-57.
25. Vasko, F.T., Hernandez-Cabrera, A., Aceituno, P. Transient quantum evolution of two-dimensional electrons under photoexcitation of a deep center (2008) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 77 (7), art. no. 075310, .
26. Knezevic, I. Contact-induced decoherence in nanodevices (2008) *Journal of Computational Electronics*, 7 (3), pp. 276-279.

27. Cancellieri, E., Bordone, P., Jacoboni, C. Effect of symmetry in the many-particle Wigner function (2007) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 76 (21), art. no. 214301, .
28. Athanassoulis, A.G. Smoothed Wigner transforms and homogenization of wave propagation (2007) *Proceedings of the International Conference Days on Diffraction 2007*, DD, art. no. 4531981, pp. 13-18.
29. Sangiorgi, E., Palestri, P., Esseni, D., Fiegna, C., Selmi, L. The Monte Carlo approach to transport modeling in deca-nanometer MOSFETs (2007) *ESSCIRC 2007 - Proceedings of the 33rd European Solid-State Circuits Conference*, art. no. 4430248, pp. 48-57.
30. Gurov, T., Atanassov, E., Ivanovska, S. A hybrid Monte Carlo method for simulation of quantum transport (2007) *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4310 LNCS, pp. 156-164.
31. Querlioz, D., Saint-Martin, J., Huet, K., Bournel, A., Aubry-Fortuna, V., Chassat, C., Galdin-Retailleau, S., Dollfus, P. On the ability of the particle Monte Carlo technique to include quantum effects in nano-MOSFET simulation (2007) *IEEE Transactions on Electron Devices*, 54 (9), pp. 2232-2242. Cited 24 times.
32. Knezevic, I. Decoherence and quantum transport in nanodevices (2007) *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 4 (4), pp. 749-760. Cited 2 times.
33. Oriols, X., Fernández-Díaz, E., Alvarez, A., Alarcón, A. An electron injection model for time-dependent simulators of nanoscale devices with electron confinement: Application to the comparison of the intrinsic noise of 3D-, 2D- and 1D-ballistic transistors (2007) *Solid-State Electronics*, 51 (2), pp. 306-319. Cited 10 times.
34. Querlioz, D., Dollfus, P., Do, V.-N., Bournel, A., Nguyen, V.L. An improved wigner Monte-Carlo technique for the self-consistent simulation of RTDs (2006) *Journal of Computational Electronics*, 5 (4), pp. 443-446. Cited 15 times.
35. Querlioz, D., Saint-Martin, J., Do, V.-N., Bournel, A., Dollfus, P. Fully quantum self-consistent study of ultimate DG-MOSFETs including realistic scattering using a Wigner Monte-Carlo approach (2006) *Technical Digest - International Electron Devices Meeting, IEDM*, art. no. 4154374, .
36. Do, V.N., Dollfus, P., Lien Nguyen, V. Transport and noise in resonant tunneling diode using self-consistent Green's function calculation (2006) *Journal of Applied Physics*, 100 (9), art. no. 093705, . Cited 10 times.
37. Querlioz, D., Saint-Martin, J., Do, V.-N., Bournel, A., Dollfus, P. A study of quantum transport in end-of-roadmap DG-MOSFETs using a fully self-consistent wigner Monte Carlo approach (2006) *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 5 (6), pp. 737-743. Cited 22 times.
38. Ferrari, G., Bordone, P., Jacoboni, C. Electron dynamics inside short-coherence systems (2006) *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 356 (4-5), pp. 371-375. Cited 4 times.
39. Gurov, T., Atanassov, E., Dimov, I., Palankovski, V. Femtosecond evolution of spatially inhomogeneous carrier excitations part II: Stochastic approach and grid implementation (2006) *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 3743 LNCS, pp. 157-163. Cited 2 times.

40. Smirnov, S., Jungemann, C. A full band deterministic model for semiclassical carrier transport in semiconductors (2006) Journal of Applied Physics, 99 (6), art. no. 063707, . Cited 1 time.
41. Krieger, J.B., Kiselev, A.A., Iafrate, G.J. Quantum transport for a Bloch electron quasiparticle in an inhomogeneous electric field scattering from a random distribution of impurities: A Wigner approach (2005) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 72 (19), pp. 1-10.

4.4 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.

4.5 Декларация

Дисертацията е построена върху оригинални изследователски резултати, получени от автора, или по инициатива и с основно участие на автора, което декларирам с подписа си.

доц. д-р Михаил Недялков

4.6 Научна Автобиография

Mihail Nedjalkov

PERMANENT ADDRESS:

Institute of Information and Communication Technologies - Bulgarian Academy of Sciences

Acad. G.Bontchev str, Bl 25A, 1113 Sofia, Bulgaria

Phone: +359 2 979 2434 Cell: +359 887 202 611 / +43 681 20205575

Email: mixi@parallel.bas.bg, mixi@iue.tuwien.ac.at

PERSONAL DETAILS:

Date and Place of Birth: 02. 03. 1956, Sofia, Bulgaria.

Nationality and Citizenship: Bulgarian

Family Status: divorced, one daughter.

EDUCATION AND DEGREES:

2001 Habilitation in Mathematical Modeling, Institute for Parallel Processing, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia.

1990 Ph.D. in Physics, Bulgarian Academy of Science, Sofia, Bulgaria

1981 M.Sci. in Physics, Physics of Semiconductors; Sofia University, Bulgaria

EXPERIENCE:

Numerical methods, Monte Carlo methods, Solid State Physics, Physics and Theory of Semiconductors and Devices, Quantum Theory of the Optical and Electronic properties of Semiconductors and Nanostructures, Boltzmann and Quantum transport in Semiconductors, Scattering theory, Wigner function.

PROFESSIONAL HISTORY AND MAJOR VISITS:

2009-date Part time FWF fellow, Institute for Microelectronics, TU-Vienna, Austria.

2008 May - November: Österreichische Forschungsgemeinschaft (ÖFG) fellow, Project MOEL273

2008 - May: Institute for Microelectronics, TU-Vienna, Austria.

2007 April - 2008: Österreichische Forschungsgemeinschaft (ÖFG) fellow, Project MOEL239

2005 March - 2007: Senior Researcher, FWF Project START Y247-N13, Institute for Microelectronics, TU-Vienna

2004 - 2005: Visiting research professor, Department of Electrical Engineering, Arizona State University.

1998 - 2003: Senior researcher, Institute for Microelectronics, TU-Vienna, European Community Project NANOTCAD IST1999-10828 and FWF Project P-13333-TEC.

1993 - date: Associate Professor(part time), until 2001 Research Associate I degree, Monte Carlo group, Central Laboratory for Parallel Processing, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria. Participated in research projects supported by Copernicus and NFSR grants.

1990 - 1993: Research Associate III degree, Department of Theoretical Research, Institute of Microelectronics, Sofia.

1985 - 1989: Post-Graduate student, Institute of Microelectronics and Bulgarian Academy of Sciences;

1981 - 1985: Physicist in Dept. MOS-IC Technological Control and Physical Analysis.

PUBLICATION SUMMARY:

Over 100 publications: Peer reviewed journals: 48;
Peer reviewed proceedings: 47, 18 in books, 3 book chapters, 7 invited;
Reviewed abstracts in conference proceedings: 34;
Last 5 years publications cited over 120 times.

LANGUAGES: Bulgarian, Russian, English, German

SCIENTIFIC PROJECTS

Participated in over 10 scientific projects, including funded by: European Commission (2: NANOTCAD and EGEE-GRID), Austria (4: FWF-P13333-TEC, FWF-START-Y247-N13, ÖFG-MOEL239, MOEL273, BMWF-ASO-GRINKO), and USA (NFS-ECS-0218008).

PARTICULAR:

Invited lecturer in the International School of Physics "Enrico Fermi" Varenna (Lake Como), 2004. Member of the Italian Physical Society. Organizer of 6 special sessions in international conferences, Official reviewer of Mathematical Reviews (American Mathematical Society) and Physical Review (American Physical Society).

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. Moore, “Progress in digital integrated electronics,” *IEDM Technical Digest*, vol. 21, pp. 11–13, 1975.
- [3] S. M. Sze and G. S. May, “Fundamentals of Semiconductor Fabrication,” John Wiley and Sons Inc., 2003.
- [4] “SPICE,” (EECS Department of the University of California at Berkeley. USA), Genaral Purpose Circuit Simulation Program.
<http://bwrc.eecs.berkeley.edu/Classes/icbook/SPICE/>.
- [5] G. K. D. Vasileska, S. Goodnick, *Computational Electronics*. CRC Press, 2010.
- [6] S. Selberherr, “Analysis and simulation of semiconductor devices,” Springer, 1984.
- [7] “MEDICI,” (AVANT! Corp. Premont, CA, USA), Two dimensional semiconductor device simulation program, 2000.
<http://lics.ee.ucr.edu/cad/tcad-medici.pdf>.
- [8] J. Carrillo, I. Gamba, A. Majorana, and C. Shu, “A WENO-solver for the transients of Boltzmann-Poisson system for semiconductor devices:

- performance and comparisons with Monte Carlo methods,” *Journal of Computational Physics*, vol. 184, pp. 498–525, 2003.
- [9] S. Datta, “Nanoscale Device Modeling: The Green’s function method,” *Superlattices & Microstructures*, vol. 28, no. 4, pp. 253–278, 2000.
 - [10] A. Svizhenko, M. P. Antram, T. R. Govindan, B. Biegel, and R. Venugopal, “Two-dimensional quantum mechanical modeling of nanotransistors,” *Journal of Applied Physics*, vol. 91, pp. 2343–2354, 2002.
 - [11] A. Svizhenko and M. P. Antram, “Role of scattering in nanotransistors,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 50, pp. 1459–1466, 2003.
 - [12] S. Jin, Y. Park, and H. Min, “A three-dimensional simulation of quantum transport in silicon nanowire transistor in the presence of electron-phonon interactions,” *Journal of Applied Physics*, vol. 99, p. 123719, 2006.
 - [13] W. Frensky, “Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 62, no. 3, pp. 745–789, 1990.
 - [14] 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.
 - [15] N. C. Kluksdahl, A. M. Krivan, D. K. Ferry, and C. Ringhofer, “Self-consistent study of resonant-tunneling diode,” *Physical Review B*, vol. 39, pp. 7720–7734, 1989.
 - [16] 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.

- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] D. Querlioz and P. Dollfus, *The Wigner Monte Carlo Method for Nanoelectronic Devices - A particle description of quantum transport and decoherence*. ISTE-Wiley, 2010.
- [21] B. Ridley, *Electrons and Phonons in Semiconductor Multilayers*. Cambridge University Press, 1997.
- [22] О. Маделунг, *Теория Твердого Тела*. Наука, Москва, 1980.
- [23] R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Wiley and Sons, 1975.
- [24] W. Heisenberg, “Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 33, pp. 879–893, 1925.
- [25] E. Schrödinger, “An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules,” *Physical Review*, vol. 28, pp. 1049–1070, 1926.
- [26] P. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*. Clarendon Press, Oxford, 1930.

- [27] J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, Berlin, 1932.
- [28] E. Wigner, “On the quantum corrections for thermodynamic equilibrium,” *Physical Review*, vol. 40, pp. 749–759, 1932.
- [29] H. Weyl, “Quantenmechanik und Gruppentheorie,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 46, pp. 1–46, 1927.
- [30] J. E. Moyal, “Quantum mechanics as a statistical theory,” *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 45, pp. 99–124, 1949.
- [31] V. I. Tatarskii, “The Wigner Representation of Quantum Mechanics,” *Sov. Phys. Usp.*, vol. 26, pp. 311–327, 1983.
- [32] N. C. Dias and J. N. Prata, “Admissible states in quantum phase space,” *Annals of Physics*, vol. 313, pp. 110–146, 2004.
- [33] I. T. Dimov, “Monte Carlo methods for applied scientists,” World Scientific Publ., 2008.
- [34] K. Kurosawa, “Monte Carlo Calculation of Hot Electron Problems,” in *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 21, (Kyoto), pp. 424–426, J.Phys.Soc.Jpn, 1966. Supplement.
- [35] P. Price, “The theory of hot electrons,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 14, pp. 12–24, 1970.
- [36] H. Rees, “Calculation of Distribution Functions by Exploiting the Stability of the Steady State,” *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 30, pp. 643–655, 1969.
- [37] E. Sangiorgi, B. Ricco, and F. Venturi, “MOS²: An Efficient Monte Carlo Simulator for MOS Devices,” *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 7, pp. 259–271, Feb. 1988.

- [38] 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.
- [39] 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.
- [40] 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.
- [41] P. Lebowitz and P. Price, "Direct Microscopic Simulation of Gunn-Domain Phenomena," *Applied Physics Letters*, vol. 19, pp. 530–533, 1971.
- [42] A. Phillips and P. Price, "Monte Carlo Calculations on Hot Electron Tails," *Applied Physics Letters*, vol. 30, pp. 528–530, May 1977.
- [43] M. Nedjalkov and P. Vitanov, "Monte Carlo Technique for Simulation of High Energy Electrons," *COMPEL: The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering*, vol. 10, no. 4, pp. 525–530, 1991.
- [44] M. Nedjalkov and P. Vitanov, "Modification in the One-Particle Monte Carlo Method for Solving the Boltzmann Equation with Changed Variables," *Journal of Applied Physics*, vol. 64, no. 7, pp. 3532–3537, 1988.
- [45] W. Fawcett, A. Boardman, and S. Swain, "Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties in Gallium Arsenide," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 31, pp. 1963–1990, 1970.
- [46] G. Baccarani, C. Jacoboni, and A. M. Mazzone, "Current Transport in Narrow-Base Transistors," *Solid-State Electron.*, vol. 20, no. 1, pp. 5–10, 1977.

- [47] A. Reklaitis, “The calculation of electron transient response in semiconductors by the Monte Carlo technique,” *Phys.Lett.*, vol. 88A, no. 7, pp. 367–370, 1982.
- [48] J. Socha and J. Krumhansl, “a Study of Electron Transport in Small Semiconductor Devices: the Monte Carlo Trajectory Integral Method,” *Physica B*, vol. 134, p. 142, 1985.
- [49] R. Chambers, “The Kinetic Formulation of Conduction Problems,” *Proc. Phys. Soc. (London)*, vol. A65, pp. 458–459, 1952.
- [50] M. Nedjalkov and P. Vitanov, “Monte-Carlo Methods for Determination of Transport Properties of Semiconductors,” *Solid-State Electron.*, vol. 31, pp. 1065–1068, 1988.
- [51] C. Jacoboni, P. Poli, and L. Rota, “A new Monte Carlo Technique for the Solution of the Boltzmann Transport Equation,” *Solid-State Electron.*, vol. 31, no. 3/4, pp. 523–526, 1988.
- [52] 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.
- [53] 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.
- [54] 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.
- [55] L. Reggiani, *Topics in Applied Physics: Hot-Electron Transport in Semiconductors*. Springer, Berlin, 1985.
- [56] L. Rota, C. Jacoboni, and P. Poli, “Weighted Ensemble Monte Carlo,” *Solid-State Electron.*, vol. 32, no. 12, pp. 1417–1421, 1989.

- [57] 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.
- [58] P. Price, "On the Calculation of Differential Mobility," *J. Appl. Phys.*, vol. 54, no. 6, pp. 3616–3617, 1983.
- [59] L. Reggiani, E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gružinskis, and L. Varani, "Modelling of Small-Signal Response and Electronic Noise in Semiconductor High-Field Transport," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 12, pp. 141–156, 1997.
- [60] V. Gružinskis, E. Starikov, and P. Shiktorov, "Conservation Equations for Hot Carriers – I. Transport Models," *Solid-State Electron.*, vol. 36, no. 7, pp. 1055–1066, 1993.
- [61] E. Starikov and P. Shiktorov, "New Approach to Calculation of the Differential mobility Spectrum of Hot Carriers: Direct modeling of the Gradient of the Distribution Function by the Monte Carlo Method," *Sov. Phys. Semicond.*, vol. 22, no. 1, pp. 45–48, 1988.
- [62] E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gruzinskis, L. Varrani, J. Vaissiere, J. Nougier, and L. Reggiani, "Monte Carlo Calculation of Noise and Small-Signal Impedance Spectra in Submicrometer GaAs $n^{+}nn^{+}$ Diodes," *J. Appl. Phys.*, vol. 79, no. 1, pp. 242–252, 1996.
- [63] 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.
- [64] 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.

- [65] 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.
- [66] 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.
- [67] 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.
- [68] 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.
- [69] 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.
- [70] 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.
- [71] 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.
- [72] 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.

- [73] 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.
- [74] 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.
- [75] 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.
- [76] 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.
- [77] W. Frensley, “Wigner-Function Model of Resonant-Tunneling Semiconductor Device,” *Physical Review B*, vol. 36, no. 3, pp. 1570–1580, 1987.
- [78] 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.
- [79] 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.
- [80] 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.

- [81] 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.
- [82] 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.
- [83] 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.
- [84] F. Rossi and T. Kuhn, “Theory of Ultrafast Phenomena in Photoexcited Semiconductors,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, pp. 895–950, July 2002.
- [85] 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.
- [86] K. Thornber, “High-field electronic conduction in insulators,” *Solid-State Electron.*, vol. 21, pp. 259–266, 1978.
- [87] J. Barker and D. Ferry, “On the Physics and Modeling of Small Semiconductor Devices-I,” *Solid-State Electron.*, vol. 23, pp. 519–530, 1980.
- [88] 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.
- [89] 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.
- [90] H. Haug and S. W. Koch in *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors (3rd ed.)*, Singapore: World Scientific, 1994.

- [91] 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.
- [92] 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.
- [93] 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.
- [94] 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.
- [95] 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.
- [96] 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.
- [97] 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.
- [98] 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.

- [99] 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.
- [100] 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.
- [101] 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.
- [102] 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.
- [103] A. Bertoni, P. Bordone, R. Brunetti, and C. Jacoboni, “The Wigner Function for Electron Transport in Mesoscopic Systems,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 11, pp. 5999–6012, 1999.
- [104] C. Jacoboni and P. Bordone, “Wigner Function Approach to Non-Equilibrium Electron Transport,” *Rep. Prog. Physics*, vol. 67, pp. 1033–1075, 2004.
- [105] 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.
- [106] T. Gurov and P. Whitlock, “An Efficient Backward Monte Carlo Estimator for Solving of a Quantum-Kinetic Equation with Memory Kernel,” *Mathematics and Computers in Simulation*, vol. 60, pp. 85–105, 2002.

- [107] 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.
- [108] K.-Y. Kim and B. Lee, “On the high order numerical calculation schemes for the Wigner transport equation,” *Solid-State Electronics*, vol. 43, pp. 2243–2245, 1999.
- [109] Y. Yamada, H. Tsuchiya, and M. Ogawa, “Quantum Transport Simulation of Silicon-Nanowire Transistors Based on Direct Solution Approach of the Wigner Transport Equation,” *IEEE Trans. Electron Dev.*, vol. 56, pp. 1396–1401, 2009.
- [110] S. Barraud, “Phase-coherent quantum transport in silicon nanowires based on Wigner transport equation: Comparison with the nonequilibrium-Green-function formalism,” *Journal of Applied Physics*, vol. 106, p. 063714, 2009.
- [111] H. Tsuchiya and U. Ravaioli, “Particle Monte Carlo Simulation of Quantum Phenomena in Semiconductor Devices,” *J.Appl.Phys.*, vol. 89, pp. 4023–4029, April 2001.
- [112] R. Sala, S. Brouard, and G. Muga, “Wigner Trajectories and Liouville’s theorem,” *J. Chem. Phys.*, vol. 99, pp. 2708–2714, 1993.
- [113] S. Haas, F. Rossi, and T. Kuhn, “Generalized Monte Carlo approach for the study of the coherent ultrafast carrier dynamics in photoexcited semiconductors,” *Physical Review B*, vol. 53, no. 12, pp. 12855–12868, 1996.
- [114] D. Ferry, R. Akis, and D. Vasileska, “Quantum Effect in MOSFETs: Use of an Effective Potential in 3D Monte Carlo Simulation of Ultra-Schott Channel Devices,” *Int.Electron Devices Meeting*, pp. 287–290, 2000.
- [115] L. Shifren, R. Akis, and D. Ferry, “Correspondence Between Quantum and Classical Motion: Comparing Bohmian Mechanics with Smoothed Effective Potential Approach,” *Phys.Lett.A*, vol. 274, pp. 75–83, 2000.

- [116] S. Ahmed, C. Ringhofer, and D. Vasileska, “An Effective Potential Approach to Modeling 25nm MOSFET Devices,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 2, pp. 113–117, 2003.
- [117] C. Ringhofer, C. Gardner, and D. Vasileska, “An Effective Potentials and Quantum Fluid Models: A Thermodynamic Approach,” *Journal of High Speed Electronics and Systems*, vol. 13, pp. 771–801, 2003.
- [118] K. L. Jensen and F. A. Buot, “The Methodology of Simulating Particle Trajectories Through Tunneling Structures Using a Wigner Distribution Approach,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 38, no. 10, pp. 2337–2347, 1991.
- [119] H. Tsuchiya and T. Miyoshi, “Simulation of Dynamic Particle Trajectories through Resonant-Tunneling Structures based upon Wigner Distribution Function,” *Proc. 6th Int. Workshop on Computational Electronics IWCE6, Osaka*, pp. 156–159, 1998.
- [120] M. Pascoli, P. Bordone, R. Brunetti, and C. Jacoboni, “Wigner Paths for Electrons Interacting with Phonons,” *Physical Review B*, vol. B 58, pp. 3503–3506, 1998.
- [121] L. Shifren and D. K. Ferry, “A Wigner function based ensemble Monte Carlo approach for accurate incorporation of quantum effects in device simulation,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 1, pp. 55–58, 2002.
- [122] D. Querlioz, P. Dollfus, V. N. Do, A. Bournel, and V. L. Nguyen, “An improved Wigner Monte-Carlo technique for the self-consistent simulation of RTDs,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 5, pp. 443–446, 2006.
- [123] 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.

- [124] T. Schmidt and K. Moehring, “Stochastic Path-Integral Simulation of Quantum Scattering,” *Physical Review A*, vol. 48, no. 5, pp. R3418–R3420, 1993.
- [125] 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.
- [126] 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.
- [127] 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.
- [128] L. Shifren and D. Ferry, “Wigner function Monte Carlo,” *Physica B*, vol. 314, pp. 72–75, 2002.
- [129] 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.