# ALGORITMOS DETERMINISTAS DE COMPUTACIÓN DE OPERADORES DE COLISIÓN EN MÉTODOS DE PARTÍCULAS

Elena Cebrián de Barrio y Francisco J. Mustieles Moreno

Universidad Alfonso X el Sabio. Apartado de Correos 016. 28691 Villanueva de la Cañada (Madrid).

La simulación numérica del sistema de ecuaciones de Vlasov-Poisson-Boltzmann, el cual describe el transporte de carga en dispositivos semiconductores de pequeñas dimensiones [3], debido a su alta dimensionalidad, requiere el empleo de los métodos de partículas que son clásicos en el estudio de las ecuaciones cinéticas. En la mayor parte de los códigos numéricos existentes, la resolución del sistema de ecuaciones de Vlasov-Poisson-Boltzmann se realiza mediante técnicas de Monte-Carlo [5]. Sin embargo, el carácter estocástico de estas técnicas introduce una importante cantidad de ruido numérico, lo que exige el empleo de algoritmos de filtrado temporal, que dificultan la resolución transitoria de las funciones de distribución. Por otro lado, la definición de un proceso estocástico para operadores de colisión no lineales, por ejemplo, en los casos de semiconductores fuertemente dopados, puede ser muy compleja, conduciendo a algoritmos computacionales muy costosos. Para intentar salvar estas dificultades se ha desarrollado el método de partículas ponderado (*'Weighted Particle Method'*) que es un método determinista, basado en una discretización, en partículas con pesos variables, de la función de distribución de los portadores de carga. Cada partícula lleva asociado, en cada instante de tiempo, un peso, un vector de onda, una posición y un volumen de control, de los cuales sólo el volumen permanece constante.

**El modelo cinético semiclásico con geometría axial.**

En el caso semiclásico del modelo cinético de semiconductores, los portadores de carga son descritos mediante funciones de distribución, una para los electrones y otra para los huecos [3]. Como los electrones tienden a los estados de mínima energía, la probabilidad de encontrarlos fuera de los valles energéticos es reducida. Por esta razón, vamos a considerar una función de distribución por cada valle electrónico $f_\nu(x,k,t)$ ($\nu = 1,\ldots,V \equiv$ número de valles equivalentes) además de la función de distribución para los huecos $f_h(x,k,t)$.

El modelo con el que trabajamos es unidimensiomal en posición y tridimensional en vector de onda con simetría axial. Así, consideramos $x \in [0,L]$ ($L$ es la longitud del dispositivo), $k = (k_1,k_2) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$ y $d\Omega(k) = 2\pi k_2 dk_1 dk_2$. Entonces, el sistema de ecuaciones de Vlasov-Poisson-Boltzmann, el cual describe la evolución de las funciones de distribución, con la geometría descrita anteriormente y sin considerar los procesos de generación-recombinación, se escribe:

$$\begin{cases} \partial_t f_\nu + v_\nu \cdot \partial_x f_\nu - \frac{q}{\hbar}[E + \frac{1}{q}\frac{d}{dx}E_c] \cdot \partial_{k_1} f_\nu = Q_\nu(f_\nu) + \sum Q_{\mu\to\nu}(f_\nu, f_\mu) \\ \partial_t f_h + v_h \cdot \partial_x f_h + \frac{q}{\hbar}[E + \frac{1}{q}\frac{d}{dx}E_v] \cdot \partial_{k_1} f_h = Q_h(f_h) \\ f_\nu(x,k,0) = f_\nu^0(x,k) \qquad f_h(x,k,0) = f_h^0(x,k) \end{cases}$$

donde

- $v_K(x,k)$ es la velocidad de los portadores de carga, obtenida de acuerdo a la relación $v_K(x,k) = \frac{1}{\hbar}\partial_{k_1}\varepsilon_K(x,k)$, siendo $\varepsilon_K(x,k)$ el diagrama de bandas.

- $q$ es el valor absoluto de la carga elemental.
- $\hbar$ es la constante de Planck reducida.
- $E(x,t)$ es el campo eléctrico que se deduce de la ecuación de Poisson, el cual está acoplado a las funciones de distribución por la densidad de carga:

$$\begin{aligned} E(x,t) &= -\partial_x \Phi(x,t) \\ -\partial_x^2 \Phi(x,t) &= \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}(n_D(x) - n(x,t) + p(x,t)) \\ \Phi(0,t) &= \Phi_0(t) \qquad \Phi(L,t) = \Phi_L(t). \end{aligned}$$

En estas ecuaciones, $\Phi(x,t)$ es el potencial eléctrico, $n_D(x)$ es la concentración de impurezas iónicas, $n(x,t)$ es la densidad total de electrones, $p(x,t)$ es la densidad de huecos, y $\varepsilon_0$ y $\varepsilon_r$ son, respectivamente, la permitividad dieléctrica del vacío y la relativa a la baja frecuencia del semiconductor.

$$\begin{aligned} n(x,t) &= \sum_{\nu \in V} \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}_+} f_\nu(x,k,t) Z_\nu (4\pi^3)^{-1}\, d\Omega(k) \\ p(x,t) &= \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}_+} f_h(x,k,t)(4\pi^3)^{-1}\, d\Omega(k) \end{aligned}$$

- $E_c(x)$ y $E_v(x)$ son las energías de las bandas de conducción y de valencia.
- $Q_K(f_K)$ y $Q_{\mu\to\nu}(f_\nu, f_\mu)$ son los operadores de colisión intravalles e intervalles.

$$\begin{aligned} Q_{\mu\to\nu}(f_\nu, f_\mu)(x,k,t) = \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}_+} &[\sigma_{\mu\to\nu}(x,k',k) f_\mu(x,k',t)(1 - f_\nu(x,k,t)) \\ &-\sigma_{\nu\to\mu}(x,k,k') f_\nu(x,k,t)(1 - f_\mu(x,k',t))] Z_\mu\, d\Omega(k') \end{aligned} \tag{1}$$

siendo $\sigma_{\mu\to\nu}(x,k,k')$ la sección eficaz de transición reducida de un estado $k$ en el valle $\mu$ a un estado $k'$ del valle $\nu$, en la posición $x$.

**El método numérico.**

En el método de partículas ponderado, las funciones de distribución son aproximadas por combinaciones lineales de masas de Dirac sobre unos determinados puntos que llamaremos partículas. Es decir,

$$f_K(x,k,t) \approx \sum_{i=1}^{N_K} \omega_i^K f_i^K(t) \delta(x - x_i^K(t)) \otimes \delta(k - k_i^K(t))$$

siendo $x_i^K$, $k_i^K$, $f_i^K$ y $\omega_i^K$, respectivamente, la posición, el vector de onda, el peso y el volumen de control de la partícula $i$ del valle $\kappa$. Estas magnitudes evolucionan de acuerdo al siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x_i^K(t) &= v_K(x_i^K(t), k_i^K(t)) & \frac{d}{dt} k_{2,i}^K(t) &= 0 \\ \frac{d}{dt} k_{1,i}^\nu(t) &= -\frac{q}{\hbar}(E_i^\nu(t) + \frac{1}{q}(\frac{d}{dx}E_c)_i^\nu) & \frac{d}{dt} k_{1,i}^h(t) &= +\frac{q}{\hbar}(E_i^h(t) + \frac{1}{q}(\frac{d}{dx}E_v)_i^h) \\ \frac{d}{dt} f_i^\nu(t) &= Q_i^\nu(t) + \sum_{\mu\in V-\nu} Q_i^{\mu\to\nu}(t) & \frac{d}{dt} f_i^h(t) &= Q_i^h(t) \end{aligned} \tag{2}$$

donde $E_i^\kappa(t)$ representa la aproximación del campo eléctrico que actua sobre la partícula $i$ del valle $\kappa$. $Q_i^\kappa(t)$ y $Q_i^{\mu\to\nu}(t)$ son las aproximaciones de los operadores de colisión.

El sistema diferencial (2) puede ser discretizado mediante cualquier esquema clásico. Nosotros utilizamos un esquema mixto: Adams-Bashforth para $x_i^\kappa$ y $f_i^\kappa$, y Euler implícito para $k_{1,i}^\kappa$.

**Cálculo del campo eléctrico.**

Para el cálculo de las aproximaciones del campo eléctrico usamos el método "particle in cell" (PIC) [1] En este método, se considera una malla de nodos fijos $X_m = m\triangle x$, $m = 0, \ldots, M$, y una función de interpolación $W$. Las aproximaciones $n_m$ y $p_m$ de las densidades $n(x,t)$ y $p(x,t)$ sobre los nodos de la malla se calculan mediante un proceso de asignación.

$$n_m = \sum_{\nu\in V}(4\pi^3)^{-1} Z_\nu \sum_{j=1}^{N_\nu} \omega_j^\nu f_j^\nu \frac{1}{\triangle x} W(\frac{x_j^\nu - X_m}{\triangle x})$$

$$p_m = (4\pi^3)^{-1} \sum_{j=1}^{N_h} \omega_j^h f_j^h \frac{1}{\triangle x} W(\frac{x_j^h - X_m}{\triangle x})$$

Con los valores aproximados de las densidades se resuelve la ecuación de Poisson por diferencias finitas sobre la malla para obtener los valores aproximados $\Phi_m$ y $E_m$ de $\Phi(X_m)$ y $E(X_m)$.

$$\Phi_{m+1} - 2\Phi_m + \Phi_{m-1} = -\frac{q(\triangle x)^2}{\varepsilon_0\varepsilon_r}(n_D(X_m) - n_m + p_m) \qquad E_m = -\frac{\Phi_{m+1} - \Phi_{m-1}}{2\triangle x}$$

Finalmente, el campo eléctrico es interpolado sobre la posición de las partículas.

$$E_i^\kappa(t) = \sum_{m=0}^{M} E_m W(\frac{x_i^\kappa - X_m}{\triangle x})$$

**Cálculo de los operadores de colisión.**

Para obtener las aproximaciones del los operadores de colisión utilizamos dos métodos diferentes. En el primer método, deslocalizamos en posición y, a continuación, calculamos la aproximación del operador de colisión (1) sobre cada partícula $i$, $Q_i^{\mu\to\nu}(t)$, mediante una fórmula de cuadratura, donde las propias partículas son consideradas puntos de cuadratura [4]. Es decir,

$$Q_i^{\mu\to\nu}(t) = \sum_{j=1}^{N_\mu}[\sigma^\alpha_{\mu\to\nu}(x_j^\mu, k_j^\mu, k_i^\nu) f_j^\mu(1 - f_i^\nu) - \sigma^\alpha_{\nu\to\mu}(x_j^\mu, k_i^\nu, k_j^\mu) f_i^\nu(1 - f_j^\mu)] Z_\mu \xi_\beta(x_j^\mu - x_i^\nu)\omega_j^\mu$$

con $\xi_\beta$ una regularización de la delta de Dirac y, $\sigma^\alpha_{\nu\to\mu}$ y $\sigma^\alpha_{\mu\to\nu}$ las secciones eficaces regularizadas.

El otro método consiste en aproximar los operadores de colisión sobre una malla fija ( $X_m$ , $K_{1,n}^\nu$ , $K_{2,n}^\nu$ ) [2] y, despues, interpolar para obtener las aproximaciones de los operadores sobre las partículas. Los operadores de colisión sobre los nodos de la malla se aproximan mediante una fórmula de cuadratura.

$$Q^{\mu\to\nu}(X_m, K_n^\nu) \approx \sum_{l=1}^{M_\mu}[\sigma^\alpha_{\mu\to\nu}(X_m, K_l^\mu, K_n^\nu)F^\mu_{m,l}(1-F^\nu_{m,n})$$

$$-\sigma^\alpha_{\nu\to\mu}(X_m, K_n^\nu, K_l^\mu)F^\nu_{m,n}(1-F^\mu_{m,l})]Z_\mu\Omega_l^\mu$$

siendo $K_l^\mu = (K^\mu_{1,l}, K^\mu_{2,l})$, $\Omega_l^\mu = 2\pi K^\mu_{2,l}(\triangle K_1)^\mu(\triangle K_2)^\mu$ y $F^\mu_{m,l}$ las aproximaciones de las funciones de distribución sobre los puntos de la malla.

Cuando empleamos el primer método, al variar la posición y el vector de onda de las partículas, es necesario calcular las secciones eficaces a cada paso de tiempo, por lo que el número de operaciones a realizar es muy elevado. Para disminuir el número de cálculos, se emplea un algoritmo rápido de localización, de forma que sea posible determinar cuales son los pares de partículas que pueden colisionar entre sí y calcular únicamente las secciones eficaces de estas partículas. Aunque con este algoritmo se reduce considerablemente el número de cálculos a realizar, el tiempo de computación sigue siendo muy elevado. Sin embargo, con el segundo método, es posible calcular una sola vez, en la inicialización de la simulación, las secciones eficaces sobre los puntos de la malla y guardarlas en memoria, ya que permanecen constantes al tratarse de una malla fija. Esto, junto con el hecho de que es posible tomar menos puntos de malla que de partículas, hace que el tiempo de computación sea apreciablemente menor.

# References


[1] Hockney, R.W.& Eastwood, J.W.: 'Computer Simulation Using Particles'. McGraw-hill, New York, 1981.

[2] Inamuro, T. & Sturtevant, B. Phys. Fluids A, Vo. 2, No. 12, pp. 2196-2203, 1990.

[3] Markowich, P.A. & al.: 'Semiconductor Equations'. Springer-Verlag Wien New York, 1990.

[4] Mustieles, F.J. & Delaurens, F. Solid-State Electronics, Vo. 36, No. 6, pp. 857-868, 1993.

[5] Venturi, F. & al. IEEE Trans. on Computer-Aided Design. Vol. 10, No. 10, pp.1276-1286, 1991.