

半导体偏微分方程引论

张凯军 胡海丰 著



科学出版社

现代数学基础丛书 164

半导体偏微分方程引论

张凯军 胡海丰 著



科学出版社

北京

内 容 简 介

从研究生培养的研究式教育模式视角,本书对半导体偏微分方程领域的一些相关内容,特别是半导体宏观模型的推导、半导体超晶格载流子量子传输的 SHE 模型建立、半导体流体动力学 HD 模型和量子流体动力学 QHD 模型的数学分析,以及半导体模型的渐近极限等内容进行了较为系统的介绍。

本书可供数学及应用数学专业的高年级本科生、研究生、青年教师和广大的应用数学爱好者阅读参考。

图书在版编目(CIP)数据

半导体偏微分方程引论/张凯军,胡海丰著. —北京:科学出版社,2016.4
(现代数学基础丛书;164)

ISBN 978-7-03-048035-4

I. ①半… II. ①张… ②胡… III. ①半导体-偏微分方程
IV. ①O47②O175.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 072888 号

责任编辑:李 欣/责任校对:彭 涛
责任印制:张 倩/封面设计:陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

三河市骏杰印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016 年 4 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2016 年 4 月第一次印刷 印张:21 1/2

字数:416 000

定价:128.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

《现代数学基础丛书》编委会

主 编：杨 乐

副主编：姜伯驹 李大潜 马志明

编 委：（以姓氏笔画为序）

王启华 王诗晟 冯克勤 朱熹平

严加安 张伟平 张继平 陈木法

陈志明 陈叔平 洪家兴 袁亚湘

葛力明 程崇庆

《现代数学基础丛书》序

对于数学研究与培养青年数学人才而言，书籍与期刊起着特殊重要的作用。许多成就卓越的数学家在青年时代都曾钻研或参考过一些优秀书籍，从中汲取营养，获得教益。

20世纪70年代后期，我国的数学研究与数学书刊的出版由于文化大革命的浩劫已经破坏与中断了10余年，而在这期间国际上数学研究却在迅猛地发展着。1978年以后，我国青年学子重新获得了学习、钻研与深造的机会。当时他们的参考书籍大多还是50年代甚至更早期的著述。据此，科学出版社陆续推出了多套数学丛书，其中《纯粹数学与应用数学专著》丛书与《现代数学基础丛书》更为突出，前者出版约40卷，后者则逾80卷。它们质量甚高，影响颇大，对我国数学研究、交流与人才培养发挥了显著效用。

《现代数学基础丛书》的宗旨是面向大学数学专业的高年级学生、研究生以及青年学者，针对一些重要的数学领域与研究方向，作较系统的介绍。既注意该领域的基础知识，又反映其新发展，力求深入浅出，简明扼要，注重创新。

近年来，数学在各门科学、高新技术、经济、管理等方面取得了更加广泛与深入的应用，还形成了一些交叉学科。我们希望这套丛书的内容由基础数学拓展到应用数学、计算数学以及数学交叉学科各个领域。

这套丛书得到了许多数学家长期的大力支持，编辑人员也为其付出了艰辛的劳动。它获得了广大读者的喜爱。我们诚挚地希望大家更加关心与支持它的发展，使它越办越好，为我国数学研究与教育水平的进一步提高做出贡献。

杨 乐

2003年8月

前 言

目前国际上关于半导体模型方程的数学名著主要有以下三部:

(1) Markowich P A, Ringhofer C A, Schmeiser C. *Semiconductor Equations*. Vienna: Springer-Verlag, 1990.

(2) Jüngel A. *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations. Progress in Non-linear Differential Equations and their Applications*, 41. Basel: Birkhäuser-Verlag, 2001.

(3) Jüngel A. *Transport Equations for Semiconductors. Lecture Notes in Physics*, 773. Berlin: Springer-Verlag, 2009.

上述著作只对模型建立和相关物理描述进行主要阐述,基本上不涉及半导体模型方程的数学理论分析内容.撰写一部有关半导体模型的数学分析方面的著作成为了我们写书的初衷之一.此外,应用数学的内涵问题和研究生培养的研究式教育模式问题也是我们成书的力量之源.

固体是由大量原子所结合成的固态物质.原子排列呈现周期性的固体称为晶体,不是周期性排列的称为非晶体,而介于前两者之间的具有准周期结构的就是准晶体.晶体结构数学上可以抽象为在周期排列的格点空间集合成晶格上的原子分布.晶体结构的周期性是德国物理学家 Laue 的 1914 年晶体 X 射线衍射现象的诺贝尔奖工作.

原子是由电子与原子核组成的事实导致了晶体是一个含有大量电子和原子核的多粒子系统.在粒子间的相互作用下,这个复杂系统的 Hamilton 量不好写出,更无法求解.在原子结合成晶体之后,稳定的内层电子与原子核常被视为离子实,于是晶体又可以看成是由大量的外层价电子和离子实组成的复杂系统.复杂系统的近似技术是现代物理学的重要理论工具之一,也是应用数学的数学模型观念的有效体现形式.作为半导体理论基础之一的绝热近似(也称 Born-Oppenheimer 近似)就是一个著名的物理学近似技术.把电子的运动与离子实的运动分开来处理的想法是 1927 年 Born 和 Oppenheimer 提出的,进而产生了著名的 Born-Oppenheimer 近似.这样一来,固体物理中的电子在晶格中的运动规律研究就形成了固体电子论的研究领域.

晶体之所以可以分为导体、半导体和绝缘体在于晶格中电子与离子实以及电子之间的相互作用.通过绝热近似技术,可以把晶体复杂系统视为一个离子实静止在晶格平衡位置上,而电子则在离子实所产生的具有晶格周期性的电位场作用下运

动, 并且电子之间拥有相互作用的复杂系统. 再把这个多电子系统的 Hamilton 量简化为若干个独立单电子 Hamilton 量之和, 那么就是把多电子问题简化为单电子问题的单电子近似方法了. 通过单电子的薛定谔方程, 半导体的载流子在外部电场作用下的漂移运动就会体现半导体导电性的传输本质了.

半导体是一种通过掺杂杂质的现代工艺技术可调控导电性的固体材料. 直到 20 世纪 30 年代能带理论出现之后, 半导体的许多特殊物理性质才得到合理解释. 1948 年晶体管的发明 (1956 年的诺贝尔奖工作) 极大地推进了现代工业的发展步伐, 以至于半导体材料依然是今天现代工业技术的基石之一.

半导体偏微分方程的理论研究主要始于 20 世纪 90 年代. 半导体与超晶格的数学模型理论或称偏微分方程方法是现代半导体工业界和国际应用数学界的重要研究课题之一, 其重要的理论价值和应用背景深刻地影响着半导体微电子学、等离子体物理、光电子学、超流体、超导电性和红外辐射探测技术等诸多高新技术领域研究水平的最新发展.

半导体模型的理论与数值研究有着量子力学、统计力学、偏微分方程、泛函分析、随机分析、几何测度论和各种现代数值技术等各数学物理分支学科相互渗透的鲜明特色. 同时, 在半导体工业 (计算机芯片等) 微型化的潮流和纳米技术突飞猛进的新时代, 它也是一个极富挑战性的国际应用数学主流研究方向. SHE 模型 (Spherical Harmonic Expansions Model) 和 QHD 模型 (Quantum Hydrodynamic Model) 就是这一领域的杰出代表. SHE 模型是一类带有碰撞算子和传输项的扩散方程, 其首次被建立于标准半导体材料松弛碰撞算子的一些特殊情形, 后来在所有弹性碰撞算子情形也被导出. Degond 和张凯军在超晶格框架下建立了 SHE 模型.

超晶格是一种具有材料周期增长排列构成关系的新型半导体材料. 自 1970 年 Esaki 和 Tsu 首次建议人工合成超晶格以来, 半导体超晶格量子结构物理学领域取得了诸如 Wannier-Stark 寻向和 Bloch 振荡的成功实现及超晶格微能量带传输等一些著名问题的重要进展. 半导体材料的电性质主要来自电子能量带的存在这一量子力学事实. Bloch 能量带理论是纯粹产生于固体晶格中原子正规排列所生成的周期电位的一种量子力学效应, 它为超晶格能量带始源于超晶格周期电位的 Bloch 带理论提供了理论保障. Esaki 和 Tsu 认识到了传输过程中的电子碰撞现象不可避免, 并且电子将从一个 Bloch 轨道向另一个跃迁这些事实, 而建立了超晶格电子传输的第一个数量模型. 随着这一开创性工作的出现, 超晶格电子传输本质的数学模型理论已成为国际学术界的前沿研究领域.

在过去三十多年中, 半导体宏观数学模型的研究工作取得了一系列进展. DD 模型 (Drift Diffusion Model) 是形式最简单和使用最广泛的早期半导体宏观模型, 其数学视角属于抛物型方程范畴. 后来由于亚微型半导体超限速度和弹道效应等一些 DD 模型所不能解释的新现象之出现, 人们又考虑建立更有效的 HD 模

型 (Hydrodynamic Model). HD 模型是一种非线性 Euler-Poisson 方程组, 其数学属性是双曲占优的, 因而相应的数学研究工作难度较大. 随着半导体器件微型化趋势的日益发展, 半导体电子传输现象中的量子力学效应势在必行. HD 模型的一种量子扰动模型, 即所谓的 QHD 模型由此应运而生. QHD 模型是一种 Madelung 型方程, 它由含有 Bohm 位势项的 Euler 方程和静电位的 Poisson 方程耦合而成, 其数学研究给人们带来了新的挑战.

量子宏观半导体模型的历史可追溯到 1927 年 Madelung 首次提出 Schrödinger 方程电子波函数流体动力描述的 Madelung 方程. 20 世纪 90 年代, 人们分别从微观量子模型 Wigner-Boltzmann 方程和混合态 Schrödinger-Poisson 方程组出发, 对量子半导体器件 (如 Resonant Tunneling Diodes) 建立了 QHD 模型. QHD 模型在量子阱设计、超流体和超导电性等许多领域都有重要的应用价值. QHD 模型的主要困难在于其比 HD 模型又增添了非线性三阶导数项的处理和电子密度函数的正下界估计等新问题.

QHD 模型的第一个数学分析结果属于 Zhang Bo 和 Jerome, 他们在不规则的物理边条件下, 通过获得电子密度函数的正下界先验估计, 并结合 Leray-Schauder 不动点定理而得到了一维 QHD 模型平衡解的存在性. 随后在规则物理边条件下 Gyi 和 Jüngel 又建立了一维 QHD 模型平衡解的存在性. 高维 QHD 模型的无旋位势流平衡方程可化为一个带有梯度二次增长项的非线性退化椭圆型方程组, Jüngel 运用 Stampacchia 截断技术和 Leray-Schauder 不动点原理证明了该方程组解的存在性. Jüngel 等通过将 QHD 模型化为非线性 Schrödinger-Poisson 方程组并结合算子半群理论证明了有界区域上高维 QHD 模型暂态弱解的局部存在性. 经过十余年的研究, 目前半导体 QHD 模型的数学分析工作已经取得了丰硕的成果.

值得一提的是宏观模型较微观模型有着计算量小、造价便宜和半导体器件的有界区域上合理的物理边条件容易确定等诸多优点. 因而半导体宏观数学模型的理论及计算研究在国际学术界所密切关注的热点课题中显得十分重要.

本书共 5 章: 第 1 章介绍半导体宏观数学模型的建模研究工作, 主要是 Pierre Degond 等的著名工作. 1.1 节是引言部分; 1.2 节介绍半导体 Boltzmann 方程; 1.3 节介绍弹性散射占优假设下的半导体 Boltzmann 方程到 SHE 模型的扩散极限; 1.4 节介绍电子-电子散射占优假设下的 SHE 模型到 ET 模型的扩散逼近; 1.5 节介绍光学声子散射占优假设下的 SHE 模型到 PSHE 模型的扩散逼近. 第 2 章对半导体超晶格载流子量子传输问题, 介绍 Degond 与本书第一作者的合作工作. 2.1 节主要介绍超晶格一维波矢框架下的量子散射矩阵模型到 SHE 模型的大量细胞极限; 2.2 节主要介绍超晶格高维波矢框架下的量子散射矩阵模型到 SHE 模型的大量细胞极限; 2.3 节关于 SHE 模型提出若干有待研究的数学问题. 第 3 章 ~ 第 5 章主要用来介绍半导体偏微分方程数学理论分析方面的工作. 第 3 章主要针

对 HD 模型进行介绍, 我们首先给出一般形式的 HD 模型方程组并介绍相关的研究历史及现状. 3.1 节详细介绍单极 HD 模型弱解存在性的补偿列紧方法和光滑解适定性的能量估计方法等涉及的一些相关研究结果; 3.2 节详细介绍双极 FHD 模型的初边值问题和初值问题光滑解的适定性与大时间行为; 3.3 节关于 HD 模型提出若干有待研究的数学问题. 第 4 章主要针对 QHD 模型介绍由能量估计方法所得到的一些数学分析结果. 我们首先给出一般形式的 QHD 模型方程组并介绍相关的研究历史及现状. 4.1 节详细介绍一维单极 (双极) QHD 模型在各种不同边值条件下光滑解的适定性和大时间行为; 4.2 节详细介绍高维双极 QHD 模型初值问题整体光滑解的适定性和大时间行为; 4.3 节关于 QHD 模型提出若干有待研究的数学问题. 第 5 章对半导体宏观数学模型之间的渐近极限问题进行介绍, 特别是 HD 模型的零松弛极限、拟中性极限, 以及 QHD 模型的半经典极限等一些相关内容. 最后, 5.4 节提出若干有待研究的渐近极限问题.

本书包含第一作者和一些相关合作者的部分研究工作, 以及第二作者的博士学位论文的部分工作. 半导体偏微分方程的研究工作已经非常丰富, 许多著名的相关研究工作, 特别是一些中国数学家的相关重要工作可能没有纳入本书. 撰写本书的宗旨主要是强调半导体偏微分方程研究领域的重要性, 并能够更好地为培养相关领域的研究生服务. 通过一些具体的研究论文的呈现方式, 推动研究生培养的研究式教育模式, 是作者的高等教育改革梦想.

衷心感谢中国科学院数学研究所肖玲研究员对本书的写作的支持与建议, 也非常感谢加拿大麦吉尔大学梅茗教授、法国克莱蒙大学彭跃军教授、首都师范大学李海梁教授和北京工业大学王术教授的多方面关心与帮助. 本书得到国家自然科学基金项目 (No.11371082) 的资助.

限于作者水平, 本书可能存在不足之处, 敬请读者批评指正.

作 者

2015 年 12 月于长春

目 录

《现代数学基础丛书》序

前言

第 1 章 半导体宏观数学模型	1
1.1 引言	1
1.2 Boltzmann 方程	3
1.3 第一宏观尺度: “球”谐展开模型	6
1.3.1 尺度化	6
1.3.2 Q_0 的性质	7
1.3.3 Hilbert 展开 (1.15)–(1.17) 的重新求解	9
1.3.4 扩散矩阵的性质	11
1.4 电子–电子碰撞驱动的第二宏观尺度: 能量传输模型	13
1.4.1 尺度化	13
1.4.2 S_e 和 $D_{F_0} S_e$ 的性质	14
1.4.3 Hilbert 展开 (1.56)–(1.57) 的重新求解	16
1.4.4 扩散矩阵 D 和能量松弛项 $W(\mu, T, T_L)$ 的性质	17
1.4.5 第三宏观尺度: 漂移扩散模型	18
1.5 光学声子碰撞驱动的第二宏观尺度: “周期球”谐展开模型	19
1.5.1 尺度化	19
1.5.2 S_{op} 和 $D_{F_0} S_{op}$ 的性质	20
1.5.3 Hilbert 展开 (1.83) 和 (1.84) 的重新求解	24
1.5.4 第三宏观尺度: 漂移扩散模型	26
第 2 章 半导体超晶格的数学模型	29
2.1 微观散射模型与宏观 SHE 模型: 一维波矢	29
2.1.1 引言	29
2.1.2 工作概要	30
2.1.3 超晶格散射矩阵模型	32
2.1.4 尺度化	37
2.1.5 扩散极限	40
2.1.6 扩散模型 (2.30)–(2.31) 的评论	41
2.1.7 例子: 方井或壁垒	42

2.1.8 结论	44
2.2 微观散射模型与宏观 SHE 模型: 高维波矢	48
2.2.1 引言	48
2.2.2 超晶格微观散射矩阵模型	50
2.2.3 反射-透射系数	57
2.2.4 扩散模型	59
2.2.5 例子与结论	64
2.3 一些问题	71
第 3 章 半导体 HD 模型的数学理论	75
3.1 单极模型	81
3.1.1 HD 模型的 IBVP: 整体弱解	81
3.1.2 HD 模型的 IBVP: 局部光滑解	101
3.1.3 带黏性 FHD 模型的 IBVP: 整体光滑解	106
3.2 双极模型	123
3.2.1 FHD 模型的 IBVP: 欧姆接触型边界	124
3.2.2 FHD 模型的 IVP: 重组-增生现象	148
3.3 一些问题	183
第 4 章 半导体 QHD 模型的数学理论	186
4.1 一维模型	188
4.1.1 单极稳态 QHD 模型的边值问题	188
4.1.2 双极 QHD 模型的 IBVP: 量子消失型边界	196
4.2 高维模型	223
4.3 一些问题	235
第 5 章 半导体模型方程的渐近极限	237
5.1 零松弛极限	237
5.1.1 单极 HD 模型的 IBVP: 绝缘型边界	237
5.1.2 双极 HD 模型的 IBVP: 欧姆接触型边界	246
5.2 拟中性极限	272
5.3 半经典极限	289
5.3.1 一维双极 QHD 模型的 IBVP	289
5.3.2 高维双极 QHD 模型的 IVP	302
5.4 一些问题	312
参考文献	314
索引	323
《现代数学基础丛书》已出版书目	326

第 1 章 半导体宏观数学模型

在本章中将介绍半导体中电子传输的各种模型, 主要参考 Ben Abdallah 和 Degond 在文献 [3] 中的工作来展开介绍. 在已有文献中, 这些模型通过扩散逼近的方法彼此建立联系. 在弹性散射占优的假设下, Ben Abdallah 和 Degond 首先给出半导体 Boltzmann 方程到所谓的球谐展开 (Spherical Harmonics Expansion, SHE) 模型的扩散极限. 同时, 该模型还可以分别通过电子-电子散射或声子散射占优的扩散逼近与能量传输 (Energy Transport, ET) 模型或周期球谐展开 (Periodic Spherical Harmonics Expansion, PSHE) 模型建立联系, Ben Abdallah 和 Degond 还提供各种扩散极限所诱导的 Hilbert 展开的数学严格化验证.

1.1 引言

首先, 从 Boltzmann 方程出发推导半导体球谐展开模型. 其次, 考察该模型与已有的宏观模型之间的联系. 例如, ET 模型、漂移扩散 (Drift Diffusion, DD) 模型和 PSHE 模型. 实际上, 给出半导体中热电子的一个可靠且计算成本又低的刻画是工业上的重要课题. 本章就将解释清楚目前已有的各种半经典电子传输模型间的关系.

在本章中, 结合宏观极限来列出各种模型间的层级. 每个宏观极限都是由特殊的空间和时间尺度的选取所诱导, 不同的尺度表示不同的碰撞机制占优, 见图 1.1.

在文献 [106] 中最先研究了漂移扩散极限(箭头 1), 接着许多学者做出进一步的研究 [27, 94, 105, 119]. 在模型碰撞算子框架下, 文献 [46],[102] 给出相应的数学理论, 其中假定散射矩阵是光滑的.

在文献 [90],[92],[93] 中提出基于附加由常值能量的光学声子占优散射的 Boltzmann 方程的扩散逼近的新模型(箭头 2). 该新模型也被称为“周期球谐展开模型”(PSHE) 因为它类似于(非周期)球谐展开模型. 数学上严格的逼近定理由文献 [92] 和 [93] 给出, 分析的一部分依赖于文献 [84]–[86] 中证明的光学声子碰撞算子的性质.

能量传输 (ET) 模型由电子密度和温度的扩散方程组成. 该推广的漂移扩散模型可视为忽略掉动量传输方程中的惯性项的流体动力学模型 [5, 10, 111](特别地, 对半导体流体动力学模型的相关介绍可参考文献 [12],[13],[18]). ET 模型最早出现在文献 [115],[116] 中, 后续被广泛地用于数值计算 [10, 50, 107, 111], 大部分是针对带现

象学传输系数的情形. 文献 [21],[60] 介绍了如何从 Boltzmann 方程推导出 ET 模型. 该模型所需的占优散射是电子-电子和弹性碰撞 (箭头 3), 见文献 [5]. 该极限数学上的严格收敛结果可见文献 [41].

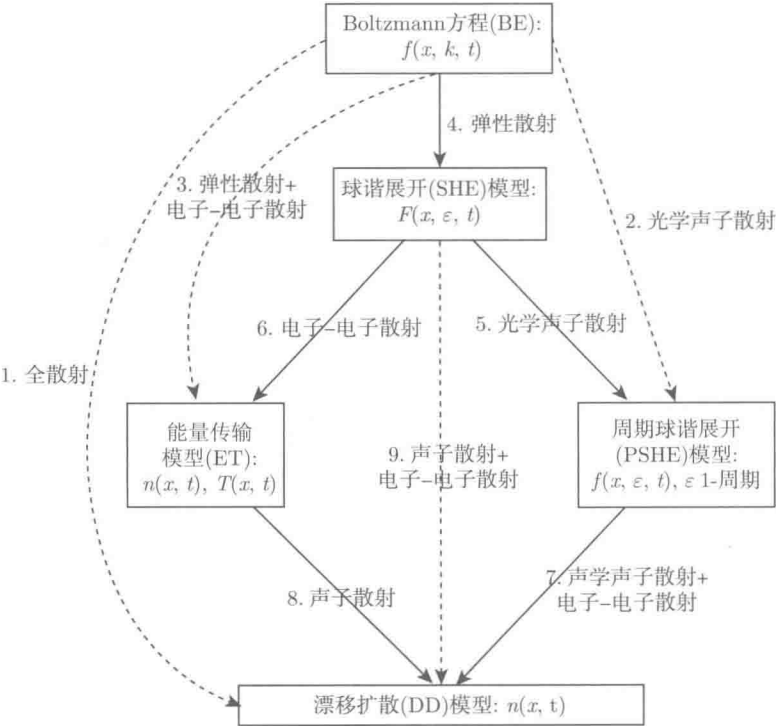


图 1.1 模型之间的层级关系

文献 [90](处理 PSHE 模型) 和文献 [5](处理 ET 模型) 中的方法有若干缺点. 这两种情况都没有假设现实热电子传输过程中的占优散射. 实际上, 文献 [90] 中的基本假设是 (常值) 光学声子能量的数量级是 1. 然而, 在室温下对热电子而言该能量应该认为是很小的并且杂质散射和声子散射都应视为是弹性的. 同样地, 在文献 [5] 中假设电子-电子碰撞算子与弹性算子具有相同的数量级, 这种假设是存疑的. 因此, 在本章中研究的是服从弹性散射占优的 Boltzmann 方程的扩散逼近, 进而得到 SHE 模型 (箭头 4).

文献 [37] 最先研究了上述问题. 文献 [5],[90] 中的另一个不足之处在于该理论提供的扩散常数不是显式的. 我们将会看到 PSHE 模型和 ET 模型都可以通过 SHE 模型的松弛极限来得到 (箭头 5 和 6), 并且这些极限给出相应扩散系数的更显式的表达式 (在最简单情形甚至是解析的).

Stratton^[113–116] 最先研究了 SHE 模型. 该模型在文献 [42]–[45], [81],[108],[121]

中作为数值方法被引入. 文献 [37] 最先从 Boltzmann 方程的扩散逼近推导出 SHE 模型, 本章中将沿用其方法. 然而, 文献 [37] 的限制是各向同性散射, 而文献 [121] 又限制在球对称能带图. 本章中将在一般的散射下推导该模型并且证明在适当假设下, 即其就是文献 [37] 和 [121] 中的相应模型. 这个更一般的方法可应用到声子碰撞是高度各向异性且能带图非对称的半导体材料上去. 本章中也会提供必要的数学框架来保证这些分析更严格.

在本章中, 将细致研究 SHE 模型到 PSHE 模型 (箭头 5) 和 ET 模型 (箭头 6) 的松弛极限. 在文献 [120] 中, 通过矩量展开法研究了箭头 6 的松弛极限, 但需要现象学封闭关系. 此处的 ET 模型的扩散系数与文献 [115] 相同. 不同的是箭头 5 的研究是新的并且可通过矫顽力估计加以证明 (与文献 [90],[93] 相反, 那里需要重新求解一个递归系统).

为了完整性, 还将列出 PSHE 模型和 ET 模型到 DD 模型的松弛极限 (箭头 7 和 8). 处理箭头 7 是既要考虑声学声子散射也要考虑电子-电子散射. 不同之处在于文献 [90] 中采用的是带有关于第一光学声子能量而言无旋声子能量的第二极性光学声子散射来处理该极限. 值得一提的是, 三个极限 (箭头 7-9) 得到 DD 模型中相同的扩散系数且其表达式与从 Boltzmann 方程中得到的直接极限 (箭头 1) 中的表达式是不同的.

本章的构成如下: 在 1.2 节中介绍 Boltzmann 方程和适当的尺度化. 在 1.3 节中考察 Boltzmann 方程到 SHE 模型的扩散极限 (箭头 4). 在 1.4 节中处理 SHE 模型到 ET 模型的松弛极限 (箭头 6) 并概述 ET 模型到 DD 模型的松弛极限 (箭头 8). 在 1.5 节中, 通过一系列的松弛极限 (箭头 5 和 7) 来执行从 SHE 模型到 PSHE 模型然后再到 DD 模型的类似手续.

1.2 Boltzmann 方程

讨论的起点是半导体导带中电子所满足的 Boltzmann 方程. 令 $f(x, k, t)$ 是依赖于空间坐标 $x \in \mathbb{R}^3$, 波矢 $k \in B$ 和时间 $t \geq 0$ 的分布函数. 布里渊 (Brillouin) 区 B 是倒格子 L^* 的初等晶胞, 等同于环 $\mathbb{R}^3/L^*$. 因此, 任何 k 的函数都将被认为是 L^* 周期的.

根据文献 [60], Boltzmann 方程写作

$$f_t + \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon(k) \cdot \nabla_x f + \frac{q}{\hbar} \nabla_x \phi(x, t) \cdot \nabla_k f = Q_{\text{ld}}(f) + Q_e(f), \quad (1.1)$$

其中 $\varepsilon : k \in B \mapsto \varepsilon(k) \in \mathbb{R}$ 是给定的能带图, $\phi : (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times [0, \infty) \mapsto \mathbb{R}$ 是静电位势, q 是初等电荷, $\hbar$ 是约化 Planck (普朗克) 常数, $Q_{\text{ld}}(f)$ 是由晶格缺陷导致的碰撞

算子, 以及 $Q_e(f)$ 是由于电子-电子碰撞产生的碰撞算子. 在接下来的分析中不必考虑将 ϕ 耦合到 f 的 Poisson 方程, 因此 $\phi(x, t)$ 将视作一个给定的函数.

杂质、声学波和光学波是三种主要的晶格缺陷:

$$Q_{ld}(f) = Q_{imp}(f) + Q_{ac}(f) + Q_{op}(f), \quad (1.2)$$

因为杂质散射的弹性特征, 泡利排斥项在获得和损失项中彼此抵消, 所以有

$$Q_{imp}(f) = \int_B \Phi_{imp}(x, k, k') \delta(\varepsilon' - \varepsilon) (f' - f) dk', \quad (1.3)$$

其中 $\varepsilon = \varepsilon(k)$, $\varepsilon' = \varepsilon(k')$, $f = f(k)$, $f' = f(k')$, δ 是 Dirac(狄拉克) 测度, 以及 $\Phi_{imp}(x, k, k') = \Phi_{imp}(x, k', k)$ 是杂质散射矩阵元素. 对光学波, 有

$$Q_{op}(f)(k) = \int_B \Phi_{op}(x, k, k') \{ [(N_{op} + 1) \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \varepsilon_{op}) + N_{op} \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \varepsilon_{op})] f' (1 - f) - [(N_{op} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \varepsilon_{op}) + N_{op} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \varepsilon_{op})] f (1 - f') \} dk', \quad (1.4)$$

其中 $\Phi_{op}(x, k, k') = \Phi_{op}(x, k', k)$ 是矩阵元素, ε_{op} 是光学波的常数能量, N_{op} 是光学声子数:

$$N_{op} = (e^{\varepsilon_{op}/k_B T_L} - 1)^{-1},$$

其中 k_B 是 Boltzmann 常数, T_L 是晶格温度. 声学波碰撞算子的表达式可类似 (1.4) 给出, 只需将下标 “op” 替换为 “ac”. 声学波散射和光学波散射仅有的区别在于声学波的能量 $\varepsilon_{ac} = \varepsilon_{ac}(k - k')$ 不再是 $k - k'$ 的常值函数.

根据文献 [5],[104], 电子-电子碰撞算子由下式给出

$$Q_e(f)(k) = \int_{B^3} \Phi_e(k, k_1, k', k'_1) \delta(\varepsilon' + \varepsilon'_1 - \varepsilon - \varepsilon_1) \delta_p(k' + k'_1 - k - k_1) \times [f' f'_1 (1 - f) (1 - f_1) - f f_1 (1 - f') (1 - f'_1)] dk_1 dk'_1 dk'_1, \quad (1.5)$$

其中

$$\delta_p(k' + k'_1 - k - k_1) = \sum_{g \in L^*} \delta(k' + k'_1 - k - k_1 + g). \quad (1.6)$$

在 (1.6) 中, $g \neq 0$ 的项解释了倒逆过程且对于保持关于 k 的周期结构是必要的. 注意到定义 Q_e 的积分是在 B^3 上取的, 所以只需要考虑 (1.6) 中的有限多个项. 矩阵元素 Φ_e 满足 $\Phi_e(k, k_1, k', k'_1) = \Phi_e(k_1, k, k', k'_1) = \Phi_e(k', k'_1, k, k_1)$. 在上述所有的碰撞算子中, 来自动量状态密度的规范化因子 $1/4\pi^3$ 被转移到 ϕ_S 中, 且会在本章的余下部分的论述中略去.

通过引入具有典型代表性的电子密度和电子动能, 可尺度化 Boltzmann 方程 (1.6): n_0 是注入到结构中的典型密度 (如果高注入效应出现, 其可以大于掺杂密

度), ε_0 是电子在结构中能获得的典型动能 ($\varepsilon_0 \approx q\phi_A$, ϕ_A 是应用偏压), k_0 是满足 $\varepsilon(k) = \varepsilon_0$ 的波矢 k 的典型范数. 无量纲参数

$$\eta = \frac{4\pi^3 n_0}{k_0^3}$$

是自然的分布函数尺度并且可用来衡量电子气的简并程度. 速度尺度取为 $v_0 = \varepsilon_0/\hbar k_0$, 时空尺度由 $x_0 = v_0 t_0$ 保持关联. 最后, 位势尺度 ϕ_0 与 ε_0 有关, 即 $q\phi_0 = \varepsilon_0$ (其中 $\phi_0 \approx \phi_A$).

衡量碰撞算子的相对强度的无量纲参数 $\nu_{\text{imp}}, \nu_{\text{op}}, \nu_{\text{ac}}, \nu_e$ 由下式给出

$$\nu_{\text{imp}} = \frac{\Phi_{\text{imp},0} k_0^3}{\varepsilon_0} t_0, \quad \nu_e = \frac{\Phi_{e,0} 4\pi^3 n_0 k_0^3}{\varepsilon_0} t_0,$$

其中 $\Phi_{\text{imp},0}$ 和 $\Phi_{e,0}$ 是 Φ_{imp} 和 Φ_e 的“典型值”, 进一步 ν_{op} 和 ν_{ac} 可由“典型值” $\Phi_{\text{op},0}$ 和 $\Phi_{\text{ac},0}$ 经类似于 ν_{imp} 的表达式给出. 这里 $\Phi_{\text{imp},0}$ 用来在无量纲形式中尺度化矩阵元素 Φ_{imp} , 其他散射机制类似.

最后, 令 $\varepsilon_{\text{ac},0}$ 是声学波能量的数量级, 引入无量纲参数

$$\alpha^2 = \frac{\varepsilon_{\text{op}}}{\varepsilon_0}, \quad \beta^2 = \frac{\varepsilon_{\text{ac},0}}{\varepsilon_0}, \quad \gamma^2 = \frac{k_B T_L}{\varepsilon_0},$$

$\alpha^2(\beta^2)$ 衡量在一个光学 (声学) 声子碰撞过程中典型能量的获得或损失, 而 γ^2 量化电子气的“热度” ($\gamma^2 \ll 1$ 蕴涵热电子效应).

用上述单位尺度化之后, 方程写为

$$f_t + \nabla_k \varepsilon(k) \cdot \nabla_x f + \nabla_x \phi \cdot \nabla_k f = \nu_{\text{imp}} Q_{\text{imp}}(f) + \nu_{\text{ac}} Q_{\text{ac}}^\beta(f) + \nu_{\text{op}} Q_{\text{op}}^\alpha(f) + \nu_e Q_e(f), \quad (1.7)$$

其中 Q_{imp} 是将 (1.3) 应用于无量纲量. Q_{op}^α 由 (1.4) 经同样的方法得到, 只需用 α^2 替换 ε_{op} , $(1 - \eta f)$ 替换 $(1 - f)$, $(1 - \eta f')$ 替换 $(1 - f')$. 为得到 Q_{ac}^β , 在 (1.4) 中, 用 Φ_{ac} 的无量纲形式替换 Φ_{op} , N_{ac} 替换 N_{op} , $\beta^2 \varepsilon_{\text{ac}}$ 替换 ε_{op} , $(1 - \eta f)$ 替换 $(1 - f)$. 最后面的代入足以得到 $Q_e(f)$ 的无量纲形式.

方程在伸缩的布里渊区 B/k_0 中提出. 回顾

$$N_{\text{op}} = (e^{\alpha^2/\gamma^2} - 1)^{-1}, \quad N_{\text{ac}} = (e^{\beta^2 \varepsilon_{\text{ac}}/\gamma^2} - 1)^{-1}.$$

接下来, 将以各种各样的时间、长度和能量尺度来分析 (1.7) 的行为. 首先, 感兴趣的是高能尺度 (即, 较大的应用偏压), 在该尺度上电子在一个声子碰撞过程中获得或损失的相对能量是很小的. 因此, 与文献 [5],[37] 一样, 令

$$\alpha^2 \ll 1, \quad \beta^2 \ll 1. \quad (1.8)$$

结合 (1.8), 假设

$$\frac{\alpha^2}{\gamma^2} \approx \frac{\beta^2}{\gamma^2} = O(1), \quad (1.9)$$

这意味着在 高能尺度上, 声学波的能量 $\varepsilon_{ac,0}$ 、光学波的能量 $\varepsilon_{op,0}$, 还有晶格热能 $k_B T_L$ 被认为都在相同的数量级上, 并且与电子能量 ε_0 相比要小得多. 从文献 [104] 中可知, 物理上有 $\varepsilon_{ac,0} < k_B T_L < \varepsilon_{op,0}$, 但是这些能量的数量级的差别只在较长的时间尺度上才能够被探测到. 这一点将在 1.4 节和 1.5 节中阐明.

通过将 $Q_{op}^\alpha(f)$ 和 $Q_{ac}^\beta(f)$ 展开成 α^2 和 β^2 的幂次, 再使用 (1.8), 能够写出总的晶格缺陷碰撞算子 (也可见于文献 [5],[37]):

$$Q_{ld}(f) = (\nu_{imp} + \nu_{ac} + \nu_{op})Q_0(f) + \beta^2 \nu_{ac} Q_{ac,1}^\beta(f) + \alpha^2 \nu_{op} Q_{op,1}^\alpha(f),$$

其中 $Q_0(f)$ 是弹性碰撞算子定义为

$$Q_0(f) = \int \Phi_0(x, k, k') \delta(\varepsilon' - \varepsilon) (f - f') dk', \quad (1.10)$$

$$\Phi_0 = \Phi_{imp} + (2N_{op} + 1)\Phi_{op} + (2N_{ac} + 1)\Phi_{ac},$$

且 $Q_{ac,1}^\beta(Q_{op,1}^\alpha) = O(1)$, 当 $\beta(\alpha)$ 趋于零时. 现在, 选择时间尺度满足 $(\nu_{imp} + \nu_{ac} + \nu_{op}) = 1$. 由 (1.9), 令 $\alpha^2 = \beta^2$ 并假设

$$\nu_e = O(\alpha^2). \quad (1.11)$$

定义

$$Q_1^\alpha(f) = \nu_{ac} Q_{ac,1}^\alpha(f) + \nu_{op} Q_{op,1}^\alpha(f) + \nu_e Q_e(f) = O(1), \quad \text{当 } \alpha \rightarrow 0. \quad (1.12)$$

尺度化 Boltzmann 方程(1.7)的最终形式为

$$f_t + \nabla_k \varepsilon(k) \cdot \nabla_x f + \nabla_x \phi(x, t) \cdot \nabla_k f = Q_0(f) + \alpha^2 Q_1^\alpha(f). \quad (1.13)$$

1.3 第一宏观尺度: “球” 谐展开模型

1.3.1 尺度化

在本节中, 感兴趣的是方程 (1.13) 的扩散尺度. 根据文献 [5],[37], 令

$$x' = \alpha x, \quad t' = \alpha^2 t.$$

这给出了 (1.13) 如下的尺度化版本:

$$f_t^\alpha + \frac{1}{\alpha} (\nabla_k \varepsilon(k) \cdot \nabla_x f^\alpha + \nabla_x \phi \cdot \nabla_k f^\alpha) = \frac{1}{\alpha^2} Q_0(f^\alpha) + Q_1^\alpha(f^\alpha). \quad (1.14)$$