# 半导体 Boltzmann方程的 Monte Carlo 模拟及算法收敛性分析

曹家川

## 摘要

近些年随着半导体器件的尺寸缩小到亚微米尺度，Boltzmann方程也被越来越多地应用于模拟载流子的非平衡输运问题。然而，众所周知由于该方程本身的维度高并且是具有复杂的非线性碰撞项的微分积分方程，其适定性和数值求解都是极具挑战性的问题。大量的数值方法特别是基于半导体Boltzmann方程的直接模拟Monte Carlo(DSMC)方法已经被广泛地应用于半导体材料和器件的模拟中，然而这些数值算法的收敛性及稳定性的研究结果非常有限。本文围绕求解半导体Boltzmann方程的DSMC方法展开一系列的讨论，分析数值方法的一致性及收敛性结果，并且进一步研究它在半导体物理中的典型应用。本论文的结果主要分为以下四个方面：

第一部分，研究半导体Boltzmann方程的解与Markov过程之间的一致性。其中第三章我们构造了对应于线性方程组的Markov过程，并且证明由该Markov过程所确定的概率测度$F_\alpha(t, d\boldsymbol{x}, d\boldsymbol{k})$满足原方程的弱形式，于是在特定的假设下证明了在线性情况下Markov过程与Boltzmann方程解之间的一致性。在第四章中，我们针对非线性方程提出局部线性化方法，并且证明了一系列理论结果，比如证明线性化方程解的适定性以及线性化方法的收敛性。数值算例验证了我们的理论分析结果，并且给出在一系列典型半导体材料和器件（例如GaAs和石墨烯）的应用，验证DSMC算法的有效性和实用性。

第二部分，研究了数值求解半导体Boltzmann方程收敛性。在第五章我们详细讨论了带有多个能谷的空间非均匀半导体Boltzmann方程组的数学理论，我们借助修正的方程组证明了原问题弱解的存在性。并且在第六章提出稳定的半离散格式并给出了该离散格式解的误差估计，最后证明由DSMC算法得到的离散测度在弱拓扑下收敛到原方程组的解。数值算例验证了以上理论分析结果。

第三部分，针对Boltzmann-Poisson方程组，研究了DSMC算法的收敛性。在第七章我们研究了修正Boltzmann-Poisson方程组的适定性，在相对一般的假设条件下证明了修正方程组的解与原方程组解之间的逼近性。在

第八章提出稳定的半离散格式并证明了离散格式解的误差估计，最后类似于第六章的讨论可以证明DSMC算法的收敛性结果。数值算例验证了以上理论分析结果。

在最后一个部分，考虑了带有无界碰撞项的线性半导体Boltzmann方程。在第九章中，通过H定理和矩估计证明原方程弱解$\boldsymbol{f}$的存在性，并且证明了带有截断碰撞项的Boltzmann方程的解与$\boldsymbol{f}$之间的误差估计。

**关键词：**带有多能谷的Bolztamnn方程，Markov 过程，直接模拟Monte Carlo算法，Boltzmann-Poisson系统，半导体材料和器件