

Broyden 算法在薛定谔方程和泊松方程 自洽求解中的应用

孙 霖 杨文伟 向采兰 余志平 田立林

(清华大学微电子学研究所, 北京 100084)

摘要: 利用 Broyden 算法,通过自洽求解一维半导体量子线的电子浓度分布和电势分布,和常用的牛顿法以及逐次超松弛(SOR)法相比较,确认了 Broyden 算法的收敛结果正确,并减少了达到收敛的迭代步数,是对于薛定谔方程和泊松方程组成的非线性方程组系统自洽求解的有力工具.

关键词: Broyden 算法; 薛定谔方程; 泊松方程; 自洽求解

EEACC: 2530F; 2560B

中图分类号: TN3 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2005)12-2344-06

1 引言

根据最新的 2004 年国际半导体技术蓝图 (ITRS)^[1] 预测,2005 年微处理器 (microprocessor unit, MPU) 的物理栅长为 32nm,而 2010 年仅为 18nm. 器件的尺度已经接近或小于电子的平均自由程. 电子的输运可以看作是弹道输运 (电子无散射地穿过器件) 或准弹道输运 (电子在穿过器件时只散射一次或几次)^[2].

这种量子输运将使纳米半导体器件具有与通常半导体器件不同的特性,电子的波动特性必须加以考虑,在电磁波 (包括光波) 中常见的干涉、相干的现象也会在电子的输运中表现出来. 因此基于量子力学的数值模拟技术在量子器件性能的求解与计算机辅助设计方面正起着愈来愈大的作用. 量子输运模型和计算机模拟对新器件概念的理解与开发新纳米功能器件有着重大的指导意义.

量子效应的引入,不仅使器件物理机制更加复杂,也显著增加了数值计算的复杂性. 对薛定谔方程的处理常伴随着大规模稀疏复杂矩阵运算,矩阵特征值和特征向量的求解,使得数值模拟时间和空间的复杂性有明显增加. 同时自洽求解的收敛性也将直接影响模拟的速度和精度,特别是当势垒分布较

为复杂、初始猜解和收敛结果相差较远时,易出现薛定谔方程和泊松方程的耦合出现很大的迭代误差,甚至造成发散而使求解失败的现象.

因此提高自洽求解薛定谔和泊松非线性方程组的可靠性与速度,对于量子器件的模拟具有十分重要的意义. 国内外针对此问题进行了许多研究,例如,利用变尺度的方法加快收敛性^[3]. 近来国外有学者^[4]利用文献[5~7]中的 Broyden 算法来研究薛定谔和泊松非线性方程组耦合求解器件输出电流. 本文首次利用 Broyden 算法来研究一维纳米线的电中性问题. 完成了电中性条件下一维量子线的泊松和薛定谔的加速求解,为二维弹道输运量子器件模拟提供了良好的边界条件.

2 Broyden 算法描述

牛顿迭代法是求解非线性方程组常用的迭代算法,它的思想在于将非线性方程组逐步线性化,从而将非线性方程组求解转换为线性方程组的求解. 在牛顿法中,需要计算雅可比矩阵及其逆,但是其逆矩阵可能不存在,使得牛顿法无法进行. 而且,牛顿算法初始点的选取只能在真实解的适当领域内,否则算法产生的点列可能不收敛. 因此通过对雅可比矩阵引入修正,用适当正定的矩阵代替原有的雅可比

孙 霖 男,1980 年出生,硕士研究生,研究方向为纳米量子器件的弹道输运.

2005-05-10 收到,2005-07-20 定稿

矩阵,由此产生的算法称为拟牛顿法.拟牛顿法的修正公式有秩 1 修正和秩 2 修正等较为简单的情形.它们中有著名的 DFP 修正公式、BFGS 修正公式和 Broyden 算法族等.其中 Broyden 算法是对迭代的雅可比矩阵加上一个秩为 1 的修正矩阵^[8].

本文中要介绍的 Broyden 算法是指由 Broyden^[5]首先提出,经过 Johnson^[6]和 Eyert^[7]改进的一种算法,特点是将求解非线性方程组的牛顿迭代过程看成一个黑盒子,在黑盒子的输入和输出矢量上根据每一步迭代误差进行修正,黑盒子内部的计算过程并不改变.黑盒子内部的计算方法可以是通常所说的 Broyden 算法或者其他算法.

Broyden 算法的主要步骤为:

输入变量和迭代参数:迭代过程本步结果 x_{out} , 上步结果(或初始值) x_{in} , 预备使用历史记录的最大值 $M > 0$, 松弛系数 $0 < \omega < 1$.

算法的内部变量初始化分配:

(1) 列向量 f , $2M$ 组列向量 f_1, \dots, f_M 和 x_1, \dots, x_M , 维数等于 x_{in} .

M 维列向量: $b = [b_1, \dots, b_M]^T$; $p = [p_1, \dots, p_M]^T$; $w = [w_1, \dots, w_M]^T$;

(2) $M + 1$ 维列向量: $w = [w_0, \dots, w_M]^T$;

(3) $M \times M$ 维矩阵 $A = \{a_{i,j}\}$;

(4) 标量 $m = 1$, 代表从上次清零以来算法执行次数;标量 $n = 0$, 用作 f 和 x 的下标, 表示最近的记录写入位置.

算法描述:

(1) 将迭代过程看成“黑盒子”, 本步迭代造成 $x_{in} \rightarrow x_{out}$;

(2) if $n > 0$, $f_n = (x_{out} - x_{in}) - f$;

(3) $f = x_{out} - x_{in}$;

(4) 开始计算 Broyden 算法的输出: $x_{out} = x_{in} + f$;

(5) 如果需要清零重置, 则令 $m = 1, n = 0$;

(6) $k = \min(m - 1, M)$ (代表使用的历史纪录的数量);

(7) $k = 0, w_k = 0$; $k > 0, w_k = 1$;

(8) if $k > 0$, 则按如下步骤完成计算 Broyden 算法的输出:

(a) 初始化: $A = 0, b = 0$;

(b) for $1 \leq i, j \leq k, a_{i,j} = a_{i,j} + w_i w_j (f_{pi} \cdot f_{pj})$;

(c) for $1 \leq i \leq k, b_i = b_i + w_i (f_{pi} \cdot f)$;

(d) for $1 \leq i \leq k, a_{i,i} = a_{i,i} + (w_0)^2$;

(e) 求解 $k \times k$ 阶线性方程组 $A \cdot b = b$;

(f) for $1 \leq i \leq k, x_{out} = x_{out} - w_i b_i (x_{pi} + f_{pi})$;

(9) if $M > 0$,

(a) $n = n + 1$;

(b) if $n > M$, for $i = 1, 2, \dots, M - 1, p_i = p_{i+1}$;

(c) $p_{\min(n, M)} = n$;

(d) $x_n = x_{out} - x_{in}$;

(10) if $|x_{out} - x_{in}| < \epsilon$, 则收敛退出; else $m = m + 1, x_{in} = x_{out}$, 返回步骤(1).

如果每次都执行算法第(5)步, 那么 Broyden 算法就是松弛系数为 ω 的逐次超松弛(SOR)法. $x_{out} = x_{in} + \omega(x_{out} - x_{in})$. Broyden 算法本身的空间复杂度为 $M^2 + (2M + 1)l_x + 4M$, 其中 l_x 为 x_{out} 和 x_{in} 的维数, 如果可以动态分配存储空间, M 只是迭代收敛所用的步数与历史记录总数相比较小值, 一般有 $l_x \gg M$, 所以占用的存储空间通常只与未知量的维数成正比. 算法使用一次的时间复杂度等于 $k \times (k + 1)$ 次矢量乘法运算加上一次 $k \times k$ 阶高斯消元法的规模, 相对于迭代过程几乎可以忽略.

3 一维薛定谔与泊松非线性方程组的 Broyden 算法耦合求解

下面以求解一维半导体量子线自建电势分布来验证 Broyden 算法的效率, 并与牛顿迭代法或逐次超松弛法收敛速度比较.

二维问题无论是薛定谔方程还是泊松方程在器件的开放边界上, 常以一维薛定谔和泊松方程的自治解作为边界条件. 在经典的半导体物理图像中, 均匀掺杂的 n^+ 半导体由于满足电中性条件和热平衡条件, 电子在空间上和施主杂质电离浓度处处相等, 没有自建电势. 而从量子物理角度分析, 当导线宽度变窄, 例如小于 10nm, 由于电子波函数的量子效应, 电中性条件不再点点满足, 而只满足积分形式的电中性条件^[5]. 因此就应该自治求解导线中的泊松方程和薛定谔方程, 得到稳定收敛的自建电势分布、满足电中性条件(积分形式)的电子浓度分布和波函数各能级的驻波等信息, 才能作为二维问题的边界条件.

如图 1 所示, Ω_0 代表二维器件区域, 第 i 根导线 Ω_i 和器件 Ω_0 的交界, 用 Γ_i 表示, 我们的一维自

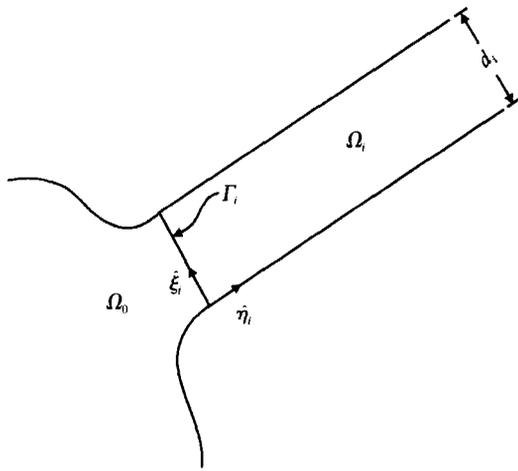


图 1 求解区域和坐标

Fig. 1 Schematic of simulation domain and local coordinates

洽求解在此展开. 在 x_i 处建立本地坐标 (x_i, y_i) . 矢量 \hat{x}_i 平行于导线壁, 沿导线伸长方向. 矢量 \hat{y}_i 垂直于 \hat{x}_i , 可以看成理想的一维半导体量子线. 假设导线为宽度为 d_i 的无限高势垒, 那么波函数在导线和势垒的边界上为零, 也就是 $\psi(x_i=0) = \psi(x_i=d_i) = 0$. 电子的一维定态薛定谔方程就是

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m_i^{*(l)}}\right) \left[\frac{\partial^2 \psi(x_i)}{\partial x_i^2}\right] + V_i(x_i) \psi(x_i) = E \psi(x_i) \quad (1)$$

其中 $m_i^{*(l)}$ 代表 \hat{x}_i 方向上的电子有效质量; l 表示不同有效质量的能谷. 在已知电势能 $V_i(x_i)$ 情况下, 求解方程的特征值, 可以得到本征能级 $E_m^{(l)}$ 和本征波函数 $\psi_m^{(l)}(x_i)$.

在 \hat{x}_i 方向上, 电中性条件可以表示为

$$\int_0^{d_i} \rho(x_i) dx_i = 0 \quad (2)$$

电荷密度是掺杂浓度和载流子浓度的代数和

$$\rho(x_i) = e(N_d^+(x_i) - N_a^-(x_i) + p(x_i) - n(x_i)) \quad (3)$$

对于均匀掺杂、浓度为 N_d^+ 的 n^+ 半导体来说, 可以简化为 $\rho(x_i) = e(N_d^+ - n(x_i))$, e 表示电子电荷. 其中电子浓度可以由波函数和费米分布求出^[19]

$$n(x_i) = \frac{k_B T}{\hbar^2} \sum_l \sum_m \left[g_v^{(l)} \sqrt{m_i^{*(l)} m_z^{*(l)}} \times \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F^i - E_m^{(l)}}{k_B T} \right) \right] / \left| \psi_m^{(l)}(x_i) \right|^2 \right] \quad (4)$$

式中 $g_v^{(l)}$ 代表能谷的简并度; E_F^i 代表导线的费米

能级; $m_i^{*(l)}$ 代表沿着导线方向的有效质量; $m_z^{*(l)}$ 代表垂直于器件所在二维平面方向的有效质量.

用 $u(x_i)$ 代表电势, 一维泊松方程可以写成

$$-\frac{d}{dx_i} \left[\epsilon(x_i) \frac{du(x_i)}{dx_i} \right] = \rho(x_i) \quad (5)$$

并且满足边界条件 $\left. \frac{\partial u}{\partial x_i} \right|_{x_i=0} = \left. \frac{\partial u}{\partial x_i} \right|_{x_i=d_i} = 0$, 其中 $\epsilon(x_i)$ 为半导体的介电常数, 可以看成常量. 薛定谔方程中电势能 $V_i(x_i) = -u(x_i)e$, 因此 $u(x_i)$ 是自洽求解的基本变量, 也是最后输入 Broyden 算法的迭代结果.

由于势阱和边界条件对称, 因此可以只计算半边的波函数和电势, 然后再对称映射到另一边, 降低计算复杂度. 采用均匀网格和有限差分 (finite difference) 法对泊松方程和薛定谔方程进行离散化, 得到薛定谔特征值方程

$$A_m^{i(l)} \psi_m^{(l)}(x_i) = E_m^{i(l)} \psi_m^{(l)}(x_i) \quad (6)$$

和泊松线性方程组

$$T_i u(x_i) = \rho(x_i) \quad (7)$$

自洽求解是以电势初始猜测开始, 假设电势能 $V(x_i) = 0$, 薛定谔方程 (1) 的解可以按照无限深方势阱解析表示^[10], 能级 E 是分立的, 第 m 级的本征能量为

$$E = E_m^{(l)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 m^2}{2m_i^{*(l)} d_i^2} \quad (8)$$

对应的归一化本征波函数

$$\psi_m^{(l)}(x_i) = \sqrt{\frac{2}{d_i}} \sin \left[\left(\frac{m\pi}{d_i} \right) x_i \right] \quad (9)$$

由 (4) 式计算电子浓度, 若不满足电中性方程 (2) 就调整费米能级 E_F^i , 直到 $\left| \int_0^{d_i/2} \rho(x_i) dx_i \right| < \epsilon$, 再把

$\psi(x_i)$ 代入泊松方程 (5), 求出电势 $u(x_i)$ 再影响电势能 $V(x_i)$, 重新数值求解薛定谔方程 (1) 的本征值和波函数. 如此反复, 直到 $u_{\text{new}} - u_{\text{old}} < \epsilon$, 可以认为得到一维自洽解. 迭代过程中的新旧电势 $u_{\text{new}}, u_{\text{old}}$ 就是 Broyden 算法输入变量.

4 Broyden 算法收敛效果

将以上迭代求解流程加以应用, 我们自洽求解了 1~9nm 的 5 种不同宽度的电势分布和电子浓度分布, 分别使用 Broyden 算法和逐次超松弛法 (包括 $\omega = 1$ 时即牛顿迭代法) 进行收敛速度对比, 采用同样的收敛标准 $\epsilon = 10^{-10}$ V. 各宽度下 Broyden 算法的收敛解与逐次超松弛法的收敛解相比都满足

$UBroyden - USOR < u$, 说明两种算法收敛方向是一致的. 在归一化的线宽坐标内, 图 2、图 3 显示了 $\hat{\Lambda}$ 方向上使用 Broyden 算法收敛的电子浓度分布和导带底电势能 E_c 分布. 随着宽度不同, 分布变化很大. 1nm 的电子浓度分布非常近似于 \sin 函数, 是因为势垒高度仅有 0.0078eV. 随着宽度增大, 中央势垒增高 (见表 1), 同假设偏离的情况越严重, 电子浓度的分布就越复杂, 并最终在两侧形成峰, 中央形成谷. 由于保证电中性和掺杂浓度不变, 图 2 中所有曲线下的面积积分都相等. 在实际线宽坐标下, 将电子浓度做成图 4, 可以明显看出, 当电子浓度形成双峰之后, 峰值离边界的距离基本不变, 都是在 1.4nm 左右, 说明波函数基态峰值偏离边界处的无限高势垒距离趋于稳定, 而且可以从图 3 和表 1 中看出, 趋近 9nm 时自建势垒的高度也趋近极限 0.132eV.

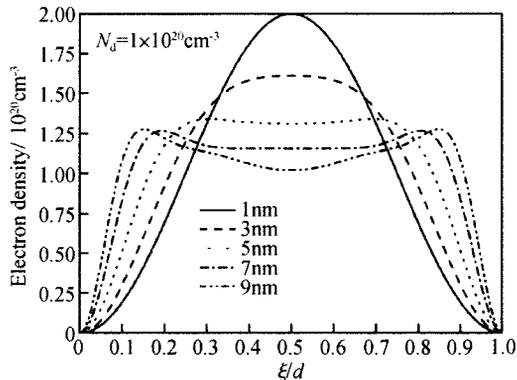


图 2 掺杂相同时, 归一化宽度下的电子浓度分布

Fig. 2 Electron density along the scaled width with the same doping

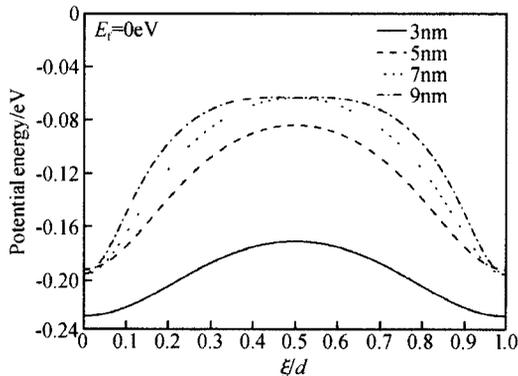


图 3 掺杂相同费米能级的位置也相同时, 归一化的宽度下导带底电势能分布

Fig. 3 Electric potential along the scaled width at $E_f = 0\text{eV}$ with the same doping

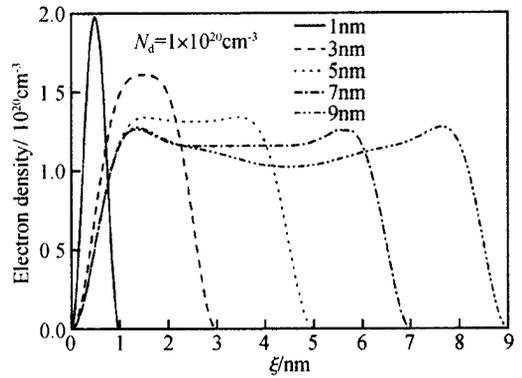


图 4 实际宽度下量子线自洽的电子浓度分布

Fig. 4 Electron density along the real width with the same doping

表 1 不同宽度自建势垒高度以及 Broyden 算法与逐次超松弛法迭代收敛步数比较

Table 1 Heights of the electric potential peak and the total iteration numbers using Broyden method and SOR (Newton) method at different widths

	势垒高度/eV	Broyden 算法	逐次超松弛法(牛顿法)
1nm	0.0078	3	3
3nm	0.056	6	12
5nm	0.108	11	69
7nm	0.132	14(= 0.8)	26(= 0.5)
9nm	0.132	16(= 1/3)	37(= 1/3)

图 5 显示了 Broyden 算法和逐次超松弛法迭代收敛速度. 宽度为 1nm 时由于自建势垒很低, 初始解析解已经很理想, 只需 3 步迭代就能收敛, 因此没有列入. 小于 7nm 时, Broyden 算法的松弛系数 = 1, 和其对应的就是牛顿迭代法. 在宽度为 7nm 和 9nm 时, 初始猜解收敛结果差别较大, 因此无论是采用 Broyden 算法还是逐次超松弛法, 松弛系数都不能等于 1, 否则迭代将会发散. 可以观察到牛顿迭代法和逐次超松弛法都是线性收敛, 5nm 时的收敛速度已经较慢. Broyden 算法以超线性收敛, 20 步以内都可以完成自治求解. 表 1 列出了两种算法收敛步数的比较, Broyden 算法步数只有逐次超松弛法(牛顿法)的一半左右, 自治求解的时间复杂度得以控制. 但 Broyden 算法收敛过程迭代误差并不一定是单调递减的, 图 5 中 7nm 和 9nm 时都出现过短暂的振荡, 如果连续出现迭代误差增大, 累计一定步数就应该执行算法第(5)步, 进行清零重置.

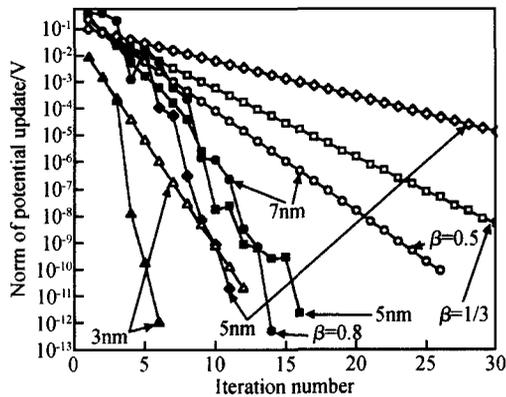


图 5 Broyden 算法(实心黑点线)和逐次超松弛法(牛顿法)迭代(空心点线)收敛速度对比 松弛系数 β 时都在图中注明.

Fig. 5 Convergence behavior of the self-consistent solution using Broyden method (solid dot-line) and SOR (Newton) method (empty dot-line) Indications are given when $\beta = 1$.

5 结论

Broyden 算法本身具有空间复杂度和时间复杂度较低的特点,在加速一维薛定谔方程和泊松方程自洽的数值求解有良好的效果,相比逐次超松弛算法(牛顿法),收敛速度约是后者的一倍,收敛结果也和后者一致,是一种在半导体器件量子模拟中很有前途的算法.

参考文献

- [1] International technology roadmap for semiconductors ,http : public.itrs.net
- [2] Natori K. Ballistic metal-oxide-semiconductor field effect transistor. J Appl Phys ,1994 ,76(8) :4879
- [3] Ma Yutao ,Li Zhijian ,Liu Litian. Solving Schrödinger equation with non-uniform grids by scale transformation method. Chinese Journal of Semiconductors ,2000 ,21(9) :853
- [4] Laux S E ,Kumar A ,Fischetti M V. Analysis of quantum ballistic electron transport in ultrasmall silicon devices including space-charge and geometric effects. J Appl Phys ,2004 ,95(10) :5545
- [5] Broyden C G. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. Mathematics of Computation ,1965 ,19(92) :577
- [6] Johnson D D. Modified Broyden 's method for accelerating convergence in self-consistent calculations. Phys Rev B ,1988 ,38(18) :12807
- [7] Eyert V. A comparative study on methods for convergence acceleration of iterative vector sequences. Journal of Computational Physics ,1996 ,124 :271
- [8] Burden R L ,Faires J D. Numerical analysis. 7th edition. Beijing : Higher Education Press ,2001 (in Chinese) [Burden R L , Faires J D. 数值分析. 第 7 版. 北京 :高等教育出版社 ,2001]
- [9] Stern F. Self-consistent results for n-type Si inversion layers. Phys Rev B ,1972 ,5(12) :4891
- [10] Zeng Jinyan. Quantum theory (Vol 1) . 3rd edition. Beijing : Science Press ,2000 (in Chinese) [曾谨言. 量子力学(卷 1). 第 3 版. 北京 :科学出版社 ,2000]

A Broyden Method for Self-Consistent Solution of Schrödinger and Poisson Equations

Sun Lin , Yang Wenwei , Xiang Cailan , Yu Zhiping , and Tian Lilin

(*Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

Abstract : A Broyden method ,which has been used in the device simulation domain ,is described and used to self-consistently solve the electron density and electric potential of a 1D semiconductor quantum line. Results are compared to those obtained by the SOR method (Newton method) . The convergence rates of these two methods are also compared. The Broyden method yields an accurate results using fewer iteration steps. Thus the Broyden method can greatly accelerate the process of solving Schrödinger and Poisson nonlinear equation systems.

Key words : Broyden method ; Schrödinger equation ; Poisson equation ; self-consistent solution

EEACC : 2530F ; 2560B

Article ID : 0253-4177 (2005) 12-2344-06