

Ladungsträgertransport in Halbleiter-Quantenbauelementen



Von der Fakultät für
Elektrotechnik und Informationstechnik
der Universität Dortmund
genehmigte Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften

von
Dipl.-Ing. Marco Wiedenhaus

Dissertation eingereicht am 09.09.2004
Tag der mündlichen Prüfung: 18.01.2005
Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. E. Voges
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. K. Goser

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Resonante Tunneldioden	5
2.1	Resonantes Tunneln und die Funktionsweise von RTDs	5
2.2	Anwendungen resonanter Strukturen in der Elektronik	9
2.3	Parameter	15
2.4	Technologie	16
3	Verfahren zur Simulation und Modellierung	17
4	Ladungsträger im Halbleiter	24
4.1	Die Maxwell-Gleichungen	24
4.2	Die Poisson-Gleichung	25
4.3	Die Kontinuitätsgleichungen	25
4.4	Ladungsträgerdichten	26
4.5	Rekombinations- und Generationsraten	27
5	Grundlagen der Transporttheorie	30
5.1	Einleitung	30
5.2	Gemischte Zustände, Quantenstatistik	31
5.3	Der Dichtematrix-Formalismus	33
5.4	Kinetische Theorien	35
5.4.1	Das hydrodynamische Modell in der Momentenentwicklung	39
5.4.2	Das hydrodynamische Modell im Dichtematrixformalismus	41
5.5	Zusammenfassung	41
6	Das quantenhydrodynamische Modell	42
6.1	Die Wigner-Funktion	43
6.2	Die Momentenmethode	45
6.3	Das Bohm-Potenzial	50
6.4	Gemittelte Quanten-Potenziale	53
6.5	Zusammenfassung	57
7	Näherungen der Verteilungsfunktion	58
7.1	Systemzustände	59
7.2	Erwartungswerte und Erhaltungsgleichungen bei linearer Antwort	60
7.2.1	Boltzmann-Statistik	62
7.2.2	Fermi-Statistik	65

8 Die Implementierungsgleichungen	70
8.1 Implementierung der Poisson-Gleichung	70
8.2 Kontinuitätsgleichung	71
8.2.1 Mögliche Variablensätze	72
8.2.2 Linearisierung der Stromgleichungen	73
8.2.3 Formulierung der Kontinuitätsgleichungen	75
8.2.4 Das Fermi-Integral	75
8.3 Formulierung der Energiegleichung	76
8.4 Randbedingungen	77
8.5 Implementierung des Bohm-Potenzials	78
8.6 Untersuchungen mit den hydrodynamischen Modellen	79
8.7 Implementierung des geglätteten Quantenpotenzials	83
8.7.1 Wahl der Simulationsparameter	84
8.7.2 Berechnung des effektiven Potenzials	87
8.7.3 Einfluss der effektiven Massen	91
9 Quantenmechanische Analyse mit der Dichtematrix	94
9.1 Selbstkonsistente Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung	95
9.1.1 Quantum Transmitting Boundary Method	95
9.1.2 Einfallende, resonante und gebundene Zustände	96
9.1.3 Quantenmechanische Bestimmung der Elektronendichte	97
9.1.4 Selbstkonsistente Potenzialbestimmung	99
9.2 Berechnung der Dichtematrix	100
9.2.1 Die Liouville-Gleichung für Elektronen	101
9.2.2 Lösung im Gleichgewicht	103
9.2.3 Lösung im Ungleichgewicht	104
9.3 Simulationsergebnisse	108
9.3.1 Thermodynamisches Gleichgewicht	108
9.3.2 Ungleichgewicht, transientes Verhalten	110
10 Spinabhängiger Transport in MRAM-Speichern	118
11 Ausblick	124
A Mathematische Hilfen	125
A.1 Relativkoordinaten	125
A.2 Einsteinsche Summenkonvention	125
A.3 Kugelkoordinaten	126
A.4 Fermi-Integrale	126
B Zeitabhängige Probleme	127
C Übersicht Quantenkorrekturen	128
D Formelzeichen und Abkürzungen	129
Literaturverzeichnis	134

1 Einleitung

Die Welt wird nicht nur schneller, sie wird auch kleiner. Doch während wir Menschen mit den Entwicklungen der modernen Zivilisation Schritt zu halten suchen, entdecken Elektronen in kleinsten Chipstrukturen ungeahnte Fähigkeiten. Als Teilchen mit quantenmechanischem Charakter verhalten sie sich tatsächlich nicht mehr so, wie die Miniaturisierung von Halbleiterchips dies eigentlich vorsieht. Das Bestreben, durch eine höhere Packungsdichte die Leistungsfähigkeit von Prozessoren zu erhöhen, muss deshalb durch gänzlich neue Konzepte erfüllt werden, die die Quantenmechanik berücksichtigen.

Derzeit sind kleinste Silizium-Schaltelemente der Größenordnung 100 nm Breite möglich, doch kann die Silizium-Technologie bis 20 nm eingesetzt werden. Dabei sind durchaus dünnere Schichten herstellbar. Doch nicht alleine die feine Strukturierung macht Chips leistungsfähiger, auch die quantenmechanischen Eigenschaften sorgen für ultraschnelle Prozesse. So konzentriert sich die Forschung vor allem auf die molekulare Elektronik, welche in Form von Kohlenstoffröhrchen (Nanotubes) den Weg in die Medien gefunden hat. Bisher ist die Herstellung jedoch sehr aufwändig, da hierbei sowohl leitende als auch halbleitende Röhrchen entstehen, die mühevoll getrennt werden müssen, denn letztlich sind die halbleitenden Nanotubes von Interesse. Ein weiteres Problem ist die Verdrahtung der Röhrchen mit der Außenwelt. Auch hier ist eine einfache Lösung nicht gefunden, Experimente mit DNS-Strukturen laufen.

So wird schnell deutlich, dass aktuell die Kohlenstoffröhrchen noch nicht zur Miniaturisierung beitragen können. Während in der Grundlagenforschung nach anderen Molekülverbindungen gesucht wird, etwa organische Verbindungen mit Benzolringen, muss sich die Technik weiterhin verstärkt mit Quantenstrukturen aus Silizium (Si) und Halbleiterverbindungen wie Gallium-Arsenid (GaAs) oder Indium-Phosphid (InP) beschäftigen. Von größtem Interesse ist dabei das Verhalten der Elektronen in diesen Quantenstrukturen - dieses stellt deshalb die Aufgabenstellung der vorliegenden Arbeit dar.

Es muss klar sein, dass hier ein recht komplexes Feld beschritten wird, das in den Grundzügen von der Physik dargelegt wurde, für welches aber kaum praktische Methoden entwickelt sind. Die Herausforderung liegt deshalb an der Schnittstelle zwischen der Physik und den Ingenieurwissenschaften. Es gilt, die Quantenmechanik in ihrer Auswirkung auf Nanostrukturen elektronischer Bauelemente zu erfassen und sie in handhabbare Algorithmen zu verwandeln. Hier gibt es einigen Handlungsbedarf, da dieses Gebiet noch in den „Kinderschuhen“ steckt.

Speziell die Resonante Tunneldiode (RTD) mit ihren herausragenden Eigenschaften hat immer wieder eine starke Faszination ausgeübt. Sie gilt als Referenz aller Bemühungen, quantenmechanische Effekte in Halbleiterbauelementen auszunutzen. Während in der Herstellung doch einige Fortschritte gemacht wurden, steht die Simulation dem einiges nach. In der Speichertechnologie revolutionieren so genannte MRAMs (Magnetoresistive Speichermedien) den Markt. Auch diese Bauteile basieren wesentlich auf Quantentransportphänomenen, die von Magnetfeldern gesteuert werden.

Ein genaues Wissen der Quantenmechanik ist ebenso Voraussetzung für deren Untersuchung wie die Kenntnis numerischer Verfahren, die eine effiziente Behandlung mithilfe des Computers erlauben. Natürlich ist dies nur sinnvoll, wenn das Ziel, Bauelemente mit ihren wichtigen technischen Kenngrößen zu beschreiben, nicht aus den Augen verloren wird. Diese sehr unterschiedlichen Ausgangspunkte verdeutlichen die Komplexität des Themas, in welches hier ein wenig Ordnung gebracht werden soll. Dabei besteht die begründete Hoffnung, die Grundlage für ein sehr zukunftsträchtiges Gebiet der Datenverarbeitung zu schaffen, welches die Nanoelektronik nutzt. Dies ist eindeutig über anfängliche Visionen hinausgewachsen und nähert sich der kommerziellen Nutzbarkeit.

Der Schlüssel zum Verständnis von Halbleiterbauelementen liegt in der Transporttheorie. Diese wird ausführlich dargestellt, da der Leser ohne diese physikalische Grundlage nicht die Voraussetzungen für die gemachten Näherungen einschätzen könnte. Die Transportphänomene können über zwei Wege behandelt werden. Zum einen besteht die Möglichkeit, für sehr einfache Gegebenheiten eine möglichst exakte Rechnung zu vollziehen, die dann als Vergleichsmöglichkeit genutzt werden kann. Andererseits, und das ist das eigentliche Ziel, kann über geeignete Annahmen eine Vereinfachung der Transporttheorie erreicht werden, die dann als Methode zur Bestimmung der Eigenschaften komplexerer Bauelemente verwandt wird. Hierbei ist klar zu definieren, unter welchen Umständen diese Algorithmen gültig sind. Dies gehört zu den schwierigsten Aufgaben, da schon die Ausgangspunkte vieler Veröffentlichungen Annahmen enthalten, die dort häufig nicht erwähnt werden, in speziellen Fällen dennoch wichtig sein können. Gerade hier zeigt sich, dass eine sorgfältige Vorgehensweise wichtig ist.

Das Ziel muss immer die gute Übereinstimmung mit praktischen Ergebnissen sein. Diese sind zum gegenwärtigen Zeitpunkt allerdings häufig selbst noch mit vielen Ungewissheiten behaftet, die notwendige Genauigkeit in der Prozesstechnologie ist nur sehr unzureichend gegeben. Andererseits hat die Nanotechnologie in den letzten Jahren immense Fortschritte gemacht, was vor allem auf die große Erfahrung bei der Verwendung von Technologien wie der MBE (Molecular Beam Epitaxy) und der MOVPE (Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy) zurückzuführen ist.

So wird hier aber das Augenmerk zusätzlich auf die Effizienz der Methode gelegt werden. Vergleiche einfacher Strukturen mit quantenmechanischen Rechnungen ermöglichen außerdem eine Bewertung der verwendeten Methoden. Dennoch ist ihr Wert letztlich nur an den tatsächlichen Realisierungen zu messen.

In dieser Arbeit wird ein Simulationsverfahren vorgestellt, welches das *quantenhydrodynamische* (QHD) Modell nutzt. Dieses entsteht wie das klassische hydrodynamische Modell (HDM) aus der Momentenmethode. Sie wird aber nicht auf die klassische Verteilungsdichte angewandt, sondern auf die Wigner-Funktion, welche die notwendigen quantenmechanischen Informationen zur Verfügung stellt, die zur Beschreibung von Tunnelprozessen und Quantisierungen notwendig sind. Dabei entstehen in den Momentengleichungen zusätzliche Terme, die Quantenkorrekturen. Im Gegensatz zur Simulation von Elektroabsorptions-Modulatoren reicht es nicht aus, die Momentenhierarchie der hydrodynamischen Gleichungen nach der zweiten Ordnung abzurechnen, da so nur die Impulserhaltung berücksichtigt würde. Der Einfluss der Quantisierung in RTDs kann nur durch die Energieerhaltung erfasst werden, die die Berücksichtigung der nächsthöheren Momentengleichung erfordert. Der Vorteil dieses Verfahrens liegt darin, dass es somit möglich ist, klassische und quantenmechanisch bestimmte Gebiete in einen Formalismus zu integrieren, in dem dann die

Korrekturterme entweder einfach zugeschaltet werden - oder auch nicht. Es kann deshalb ein umfangreicheres System von Halbleiterschichtstrukturen berechnet werden, welches dünne Quantenstrukturen enthält, wozu z.B. eine resonante Doppelbarrierenstruktur zählt.

Das QHD-Modell ist ein sehr effizientes Verfahren, dies setzt allerdings einige Vereinfachungen voraus. Dabei müssen folgende Probleme berücksichtigt werden:

- **Entartung:**

In der Herleitung des hydrodynamischen Modells müssen Korrekturen eingeführt werden, die den Übergang von der Boltzmann-Statistik zur Fermi-Statistik beschreiben. Dazu gibt es im HDM einige bekannte Ansätze [1, 2], welche hier verwandt werden. Allerdings gelten die Quantenkorrekturen weiterhin unter der Voraussetzung, dass sich das System durch die Boltzmann-Statistik beschreiben lässt. Hier wird angenommen, dass dies aber keinen großen Einfluss haben dürfte, da die Korrekturterme vor allem dort einen großen Anteil haben, wo quantisierte Zustände und Barrieren vorhanden sind. Die entarteten, hoch dotierten Zonen liegen abseits davon.

- **Potenzialsprünge:**

Die Potenzialsprünge an Heteroübergängen sind ein zentrales Thema dieser Arbeit. Da im hydrodynamischen Modell, aber auch im QHD-Modell, davon ausgegangen wird, dass das Potenzial in eine Taylor-Reihe entwickelbar ist, verlieren diese Modelle ihre Gültigkeit, sofern Sprünge im klassischen Potenzial vorhanden sind. So wird ein neuer Ansatz angewandt, der nicht mehr von der Entwickelbarkeit des Potenzials ausgeht. Dazu dient ein geglättetes Quantenpotenzial, das aus der Mittelung des klassischen Potenzials über der Temperatur und einer Gauss-förmigen Mittelung über den Ort entsteht. Dieses effektive Potenzial ermöglicht ein wesentlich besseres numerisches Verhalten der Momentengleichungen, als dies im herkömmlichen QHD-Modell der Fall ist.

- **Streuungen:**

Streuungen, vor allem Phononen-Streuungen, sind ein wichtiger Mechanismus in RTDs. Das ideale Simulationsverfahren für dieses Phänomen ist ein Formalismus, der Green-Funktionen nutzt. An erster Stelle ist hier das Programm NEMO [3] zu nennen, welches hervorragend die hier entwickelten Ansätze ergänzen dürfte, zurzeit jedoch leider aus rechtlichen Gründen noch unter Verschluss ist. Im QHD-Modell muss darauf vertraut werden, dass diese Streuungen ausreichend mit einem Relaxationszeitansatz erfasst werden.

Kapitelübersicht:

Zunächst soll in Kapitel 2 die Resonante Tunneldiode in ihrem Aufbau, ihrer Funktionsweise und ihren Anwendungsmöglichkeiten vorgestellt werden. Verschiedene Verfahren, die Eigenschaften von Resonanten Tunneldioden numerisch zu erfassen, werden im Kapitel 3 gezeigt, dem die grundlegenden Halbleitergleichungen in Kapitel 4 folgen. Es wird in Kapitel 5 ein Überblick über die Grundlagen der Transporttheorie gegeben, bevor in Kapitel 6 das quantenhydrodynamische Modell und entsprechende Quantenkorrekturen vorgestellt werden. Die für die Implementierungsgleichungen eingeführten Näherungen

begründet Kapitel 7, in dem Informationen über das lokal gestörte Gleichgewicht gewonnen werden. Die Implementierung der grundlegenden Gleichungen und Berechnungen zum QHD-Modell sowie zu den Quantenkorrekturen folgen in Kapitel 8. Die quantenmechanische Dichtematrixrechnung zeigt das Kapitel 9. Abgeschlossen wird diese Arbeit durch grundlegende Erweiterungen des Modells zur Simulation des spinabhängigen Transports in MRAM-Strukturen in Kapitel 10. Als Hilfe steht im Anhang D ein Verzeichnis der verwendeten Formelzeichen und Abkürzungen zur Verfügung.

2 Resonante Tunneldioden

Überblick: Die Resonante Tunneldiode (RTD) wird wesentlich durch Streuprozesse bestimmt, so dass das Grundprinzip des **resonanten** Tunnelns alleine die Funktionsweise nicht erklärt. Ein **sequenzieller** Tunnelvorgang, der die Berücksichtigung von **Impuls- und Energieerhaltung** beim Übergang eines dreidimensionalen in ein zweidimensionales (Quantentopf) System fordert, dient deshalb als Modell. Der beobachtete **negative differenzielle Widerstand** der RTD kann damit beschrieben werden.

RTDs können im Wesentlichen in zwei wichtigen Bereichen eingesetzt werden: zum einen in **logischen Schaltungen**, da die Eigenschaft des negativen differenziellen Widerstandes (NDW) eine deutliche **Vereinfachung** logischer Schaltungsaufbauten ermöglicht, zum anderen in der Hochfrequenztechnik aufgrund ihrer sehr hohen Schaltgeschwindigkeiten. Schließlich wird auf wichtige **Parameter** eingegangen.

2.1 Resonantes Tunneln und die Funktionsweise von RTDs

Die Idee, das Tunneln von Elektronen praktisch auszunutzen, entstand, als man bei sehr stark dotierten pn-Übergängen das Tunneln der Ladungsträger durch die Bandlücke, also Übergänge *zwischen* den Bändern, untersuchte. Im Gegensatz zu diesem Phänomen nutzen Resonante Tunneldioden (RTDs) den Transport von Ladungsträger durch Barrieren *innerhalb* eines Bandes. Hierzu werden typischerweise zwei Barrieren verwandt, die eine dünne Schicht einschließen, welche die Teilchen in einer Dimension beschränkt, so dass sich diskrete Zustände ausbilden. Diese dünne Schicht ist eine so genannte „Quantum Well“-Schicht (QW, Quantentopf), deren resonante Zustände den Tunnelvorgang durch die Doppelbarrierenstruktur ermöglichen.

Im Folgenden wird etwas näher auf diesen Mechanismus eingegangen, der die negativen differenziellen Widerstand (NDW) aufweisenden Strom-Spannungs-Kennlinien hervorruft. Diese Kennlinie ist der Grund für die herausragende Bedeutung, die RTDs in zukünftigen Anwendungen der Nanoelektronik spielen könnten. Die Ausführungen folgen dabei im Wesentlichen Capasso et al. [4], der wiederum den wichtigen Beitrag Luryis [5] aufnimmt und den Vorrang des sequenziellen Tunnelns vor dem resonanten Tunneln betont.

Die Geschichte der resonanten Tunnelstrukturen begann 1973, als Tsu und Esaki an Übergitterstrukturen mehrerer gekoppelter Quantentöpfe (Multiple Quantum Wells, MQW) die Regionen negativen differenziellen Widerstandes errechneten [6] und diese ein Jahr später auch nachwiesen [7]. Sie gehen davon aus, dass die einzigen Streuungen, die auf die Ladungsträger (ausschließlich Elektronen) einwirken, an den Potenzialbarrieren auftreten,

so dass der einbezogene Tunnelprozess ein resonanter Prozess ist. Unter dieser Voraussetzung reicht es, die Wellenfunktionen der eingestreuten Teilchen an den Schichtgrenzen stetig differenzierbar zu machen, um die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit zu gewährleisten.

Luryi [5] hat 1985 allerdings angemerkt, dass Streuprozesse in der Struktur nicht zu vernachlässigen seien. Der Tunnelprozess kann daher nicht mehr ohne weiteres als kohärenter Prozess betrachtet werden, alle Phasenkohärenz ist zerstört, bevor das Partikel den Quantentopf wieder verlässt. So wird der Tunnelprozess ein sequenzieller Tunnelprozess, die Transmissionen der beiden Barrieren können multipliziert werden. Luryi erklärt den NDW allein aus der kleineren Dimensionalität des Quantentopfes und der Erhaltung von Energie und Impuls. Das Problem, Streuungen in den Barrieren zu beschreiben, wird allerdings bei Luryi auch nicht näher thematisiert.

Die Entstehung des negativen differentiellen Widerstandes aus dem sequenziellen Tunnelprozess kann durch die Reduktion der Dimensionalität (3D→2D) erklärt werden. In Abbildung 2.1 ist die Doppelbarrierenstruktur gezeigt. In der schraffierten Fläche befinden sich die Elektronen. Im Gleichgewicht liegt nun das unterste diskrete Energieniveau E_0 im Quantentopf höher als der mit Elektronen gefüllte Bereich. Es können also bei Erhaltung der Energie keine Elektronen in den unbesetzten diskreten Zustand tunneln. Dies schaffen bei geringer Vorspannung mit einer geringen Wahrscheinlichkeit einige thermisch angeregte Elektronen, die über die Barrieren gelangen können und für einen geringen Tal-Strom I_V sorgen. Andere Elektronen kommen durch Streuprozesse durch die Barrieren. Dieser Strom wird aber insgesamt sehr klein sein. Wird die Vorspannung erhöht, steigt die Wahrscheinlichkeit an, dass einige Elektronen bei Erhaltung der Energie den Energiezustand E_0 einnehmen können. Allerdings muss beachtet werden, dass das transversale Moment im Quantentopf k_0 diskret ist. Bei Erhaltung des Impulses muss deshalb das axiale Moment des einfallenden Elektrons $k_z = k_0$ sein.

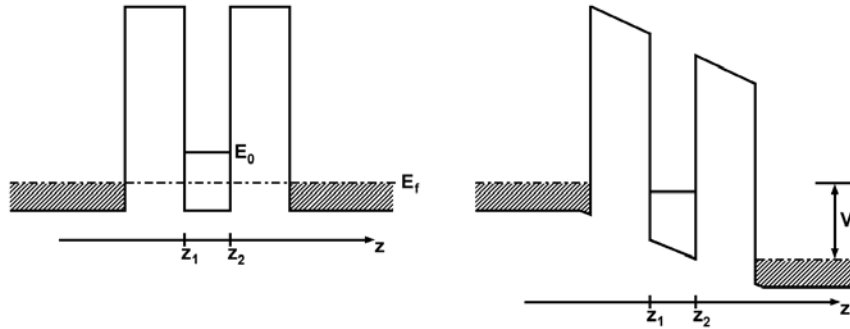


Abbildung 2.1: Links: Leitungsband einer Doppelbarrierenstruktur im Gleichgewicht; Rechts: Leitungsband mit Vorspannung V ; Einige Elektronen im Emitter haben die Energie des nicht besetzten unteren Energieniveaus E_0 im Quantentopf [4].

Eine vereinfachte Formulierung dieses Problems kann folgendermaßen angegeben werden. Die Energie der Elektronen im dreidimensionalen Emitter ist

$$E_{3D} = E_{e,0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} \quad (2.1)$$

mit der Leitungsbandkante $E_{e,0}$ und der effektiven Masse m . k_{\perp} ist die laterale Wellenzahl

$$k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2. \quad (2.2)$$

Hier sind parabolische Bänder angenommen. Im Quantentopf müssen die Teilchen dagegen eine Energie von

$$E_{2D} = E_n + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} \quad (2.3)$$

mit den diskreten Energieniveaus E_n besitzen (s. Abbildung 2.2).

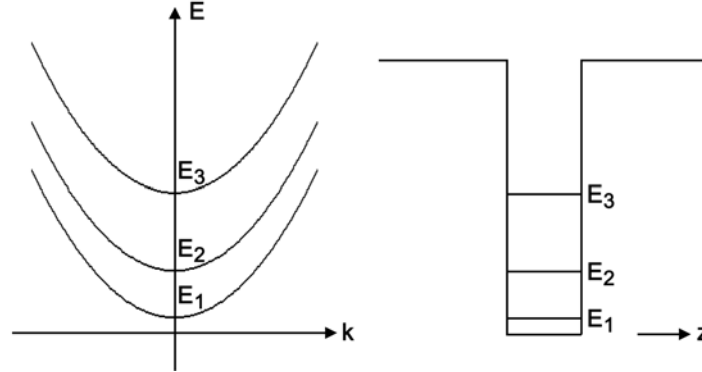


Abbildung 2.2: Diskrete Energieniveaus im Quantentopf; Links: Bandstruktur; Rechts: Bändermodell

Da nun $k_z = k_n$ sein muss, folgt aus diesen Überlegungen die Bedingung

$$k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E_n - E_{e,0}). \quad (2.4)$$

Diese erfüllen mit steigender Vorspannung immer mehr Elektronen des Emitters und der Tunnelstrom steigt an. Ab einer bestimmten Vorspannung jedoch wird das Leitungsband des Emitters über das erste diskrete Niveau des Quantentopfes gehoben, so dass die Elektronen bei den gegebenen Erhaltungseigenschaften nicht mehr tunneln können. Der Strom bricht daraufhin ein, und es folgt die Eigenschaft des negativen differentiellen Widerstandes. Es wird weiterhin einen Tal-Strom geben, da nun noch mehr thermisch angeregte Elektronen über die Barrieren gelangen, aber der große Tunnelstrom bei Resonanz bricht ein.

Mit dieser Erklärung kann man von ähnlichen Verhältnissen immer dann ausgehen, wenn die Dimensionalität eines Systems eingeschränkt wird. Dies gilt auch für Elektronen, die aus einem zweidimensionalen Gebiet durch einen Quantendraht tunneln.

Die Entstehung der Kennlinie verdeutlicht noch einmal Abbildung 2.3. Sie ist typisch für ein System mit einem diskreten Zustand. Enthält das System weitere diskrete Zustände, wird die Kennlinie bei höheren Spannungen zusätzliche Einbrüche verzeichnen. Die einzelnen charakteristischen Punkte dieser Kennlinie erklären, wie sie zustande kommen. Im Bild 2.4 ist die prinzipielle Strom-Spannungs-Kennlinie einer RTD dargestellt. Ausgehend von Punkt (a) wird die Spannung schrittweise erhöht, wobei dann ein kleiner Überschussstrom J_{EX} fließen wird, da einige thermisch angeregte Elektronen die Barriere entweder überwinden oder den Weg durch das resonante Niveau finden. Sorgt die Vorspannung dafür, dass die Elektronen sich der Energie des diskreten Niveaus im Quantentopf annähern, so wird zusätzlich ein resonanter Tunnelstrom J_{RT} fließen, der zu dem lokalen

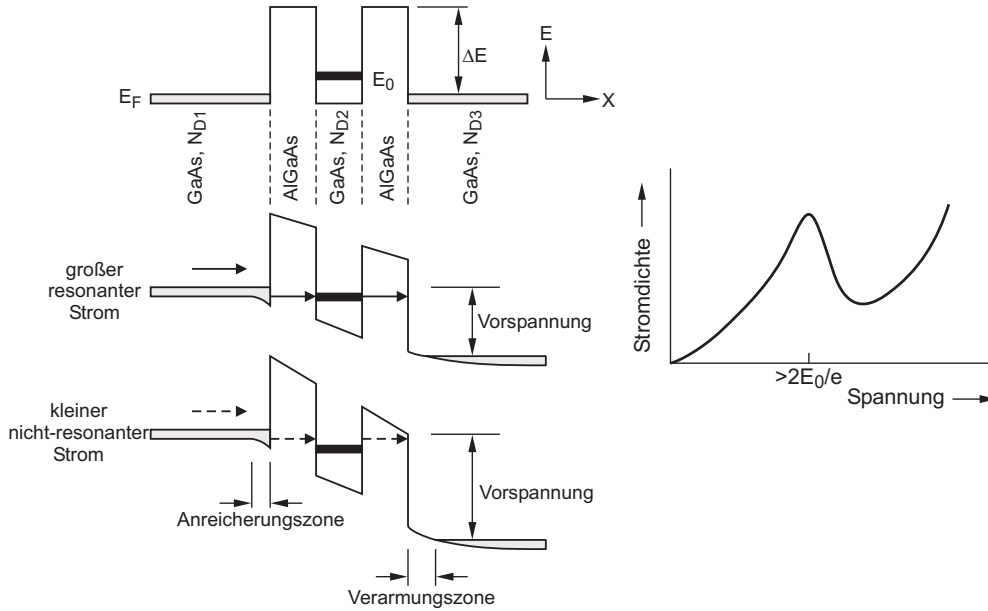


Abbildung 2.3: Bänderdiagramm der Doppelbarriere bei verschiedenen Vorspannungen und entstehende Strom-Spannungs-Kennlinie [4]

Maximum im Punkt (b) führt. Bei noch höherer Spannung bricht der Strom ein (c), da sich die Elektronen oberhalb des diskreten Energieniveaus befinden. Der Gesamtstrom J setzt sich demnach aus zwei Komponenten zusammen, einem Überschussstrom, der im Wesentlichen den Tal-Strom J_V (s. Abschnitt 2.3) bestimmt, und einem resonanten Tunnelstrom, welcher die Höhe des Maximal-Stroms I_P festlegt

$$J = J_{RT} + J_{EX} . \quad (2.5)$$

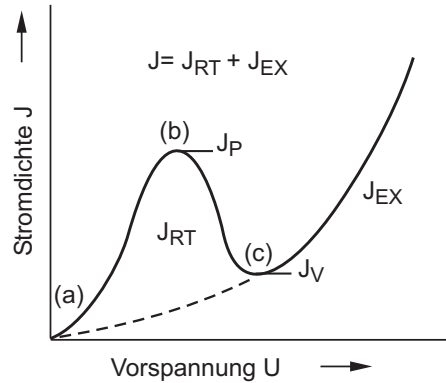


Abbildung 2.4: Qualitative Darstellung der Strom-Spannungs-Kennlinie

Wenn die Erhaltung von Energie und Impuls das Phänomen des NDW beschreibt, muss es möglich sein, mit den Gleichungen des hydrodynamischen Modells, die bis zur dritten Ordnung die Erhaltung der Teilchen, des Impulses und der Energie beschreiben, dies formulieren zu können, sofern die Quantisierung des zweidimensionalen Systems einbezogen wird. Hierauf wird in Kapitel 6 eingegangen, in dem das quantenhydrodynamische (QHD) Modell vorgestellt wird. Das QHD-Modell erlaubt damit die Berechnung der RTD-Eigenschaften und soll in dieser Arbeit vorgestellt werden.

2.2 Anwendungen resonanter Strukturen in der Elektronik

Am Anfang stand die Frage nach den Möglichkeiten, schnellere Koppler, Logik-Gatter oder Frequenz-Vervielfacher zu bauen. Die Weiterentwicklung von Multimedia-Anwendungen und die damit verbundenen großen Datenraten stärken die Nachfrage nach leistungsfähigeren Verarbeitungssystemen.

Mit den in den letzten Jahrzehnten entwickelten Bauelementen ist man diesem Ziel näher gekommen. Ihre entscheidenden Vorteile sind:

1. schnelle Umschaltzeiten
2. geringe Leistungsaufnahme
3. Eigenschaften, die zur Vereinfachung von Schaltkreisen führen.

Bevor die Anwendungen resonanter Strukturen gezeigt werden, sind zur besseren Übersicht die verwendeten Bausteine angegeben. Diese sind Resonante Tunneldioden (RTD), Resonante Tunnel-Bipolartransistoren (RTBT), RTD-Heterostruktur-Feldeffekttransistoren (HFET) und die Uni-Traveling Carrier Photodiode (UTC-PD). Die Kombination dieser Bauelemente führt dann zum so genannten Monostable-Bistable-Transition-Logic Element (MOBILE).

Anschließend werden Anwendungsbeispiele aus weiteren Gebieten vorgestellt: zunächst Logikbausteine, Speicher und komplexere Schaltnetze (Addierer), dann optoelektronische Schaltkreise, eine SRAM-Zelle, ein Frequenzdoppler und die Generation der zweiten Oberschwingung zur Produktion blau-grünen Laserlichts.

Bausteine

Resonante Tunneldiode (RTD)

Für die Anwendung der RTD entscheidend sind ihre (mehrfachen) Strom-Spannungsbereiche mit negativem differentiellen Widerstand (vgl. Abschnitt 2.1).

Resonant Tunneling Bipolartransistor (RTBT)

Der RTBT besteht aus einem Hetero-Bipolartransistor mit einem Quantentopf (symmetrische Doppelbarriere) in der p-dotierten Basisschicht. Der Emitter wird so hoch dotiert, dass der Halbleiter entartet. Damit äquidistant verteilte resonante Ströme auftreten, wird die rechteckige Doppelbarrierenstruktur durch eine parabolische ersetzt. In einigen Experimenten wurden mehr als 16 Resonanzen (und damit 16 Bereiche mit NDW) in einem parabolischen Quantentopf beobachtet [8].

Im Bild 2.5 ist die Struktur eines RTBT dargestellt.

RTD-Heterostructure Field Effect Transistor (RTD-HFET)

Beim RTD-HFET werden in das Source- oder Drain-Gebiet des HFET Resonante Tunneldioden integriert.

Uni-Traveling Carrier Photodiode (UTC-PD)

Die UTC-PD ist ein neues Bauelement [4], das ähnlich einer herkömmlichen Fotodiode ihren differentiellen Widerstand in Abhängigkeit der Lichteinstrahlung ändert. Die Vorteile

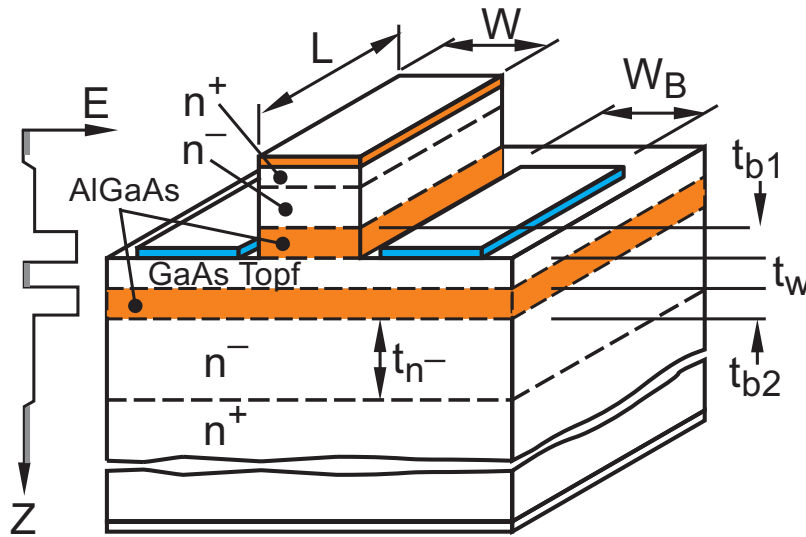


Abbildung 2.5: RTBT [9]

der UTC-PD gegenüber ihren älteren Verwandten besteht in der extremen Schnelligkeit und ihrer großen Bandbreite.

Monostable-Bistable Transition-Logic Element (MOBILE)

Ein MOBILE ist in seiner einfachsten Form eine Serienschaltung zweier resonanter Tunnelstrukturen (z.B. RTDs), gegliedert in Last- und Treiberelement (s. Abb. 2.6). Das Treiberelement (Driver-RTD) wird mit einem weiteren stromsteuernden Bauelement gekoppelt. Zum Beispiel besteht die Möglichkeit, eine UTC-PD parallel, oder einen RTBT in Reihe zu schalten. Die Last-RTD ist an einen Takt gekoppelt, bei dessen HIGH-Zustand das MOBILE von seinem monostabilen, in den bistabilen Zustand wechselt. Welcher der beiden Arbeitspunkte dabei angenommen wird, hängt von der Stromverteilung durch die beiden resonanten Bauteile ab.

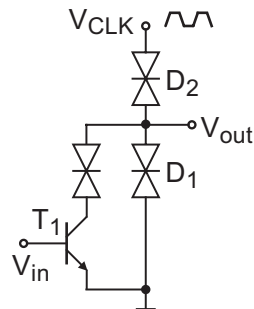


Abbildung 2.6: MOBILE [10]

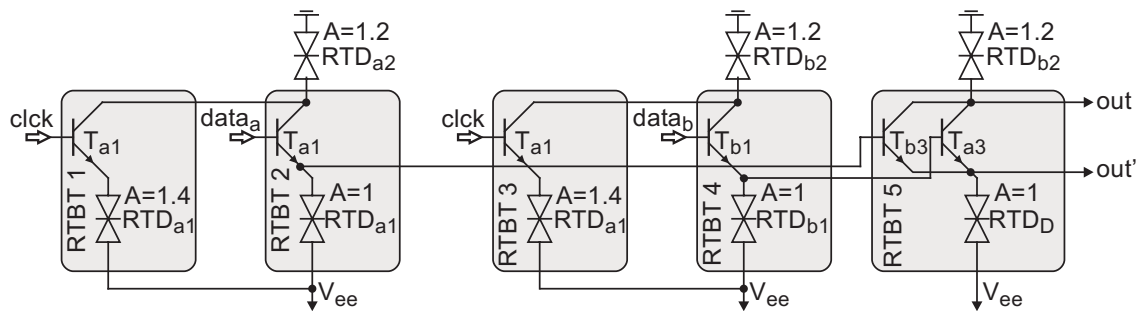
Schaltkreise

- Glösekötter, Pacha und Goser beschreiben einen schnellen *Inverter*, der aus zwei parallel geschalteten RTBTs besteht [9]. Die eine Basis ist an den Timer angeschlossen, die andere bildet den Eingang des Inverters (s. Abb. 2.7). Der RTBT 2 befindet sich so lange im bistabilen Zustand, wie der Strom einen bestimmten Wert

The diagram shows a two-stage current mirror. The first stage, labeled RTBT 1, has a gain $A = 2$ and receives an input current I_{in} . It outputs a current I_{elek} . The second stage, labeled RTBT 2, has a gain $A = 1$ and receives I_{elek} . It outputs a voltage V_{out} . Both stages have a feedback path to V_{ee} . The second stage also has a feedback path to the input of the first stage through a resistor $A = 1.5$ and an RTD3.

Auf ganz ähnliche Weise lässt sich ein *NOR-Gatter* realisieren. Dafür wird ein weiterer RTBT parallel geschaltet. Die logische Funktion dieses Gatters ist dabei vor allem von den Verhältnissen der Anodengebiete der resonanten Struktur abhängig. Simulationen mithilfe eines SPICE-Makro-Modells den Betrieb bei einem Takt von 1 GHz bestätigt.

Schließlich können auch *Hochgeschwindigkeits-Multiplexer* für die Breitband-Kommunikation zur Verfügung gestellt werden (s. Abb. 2.8). Durch die Möglichkeiten der RTD wird der Schaltungsaufbau erheblich vereinfacht, die Geschwindigkeit erhöht und die Leistungsaufnahme reduziert.



Das Bild 2.8 zeigt den logischen Aufbau eines 2:1-Multiplexers. Es werden zwei RTBT-Inverter verwendet, die in einem abgewandelten RTBT mit zwei Transistoren zusammengeschaltet werden. Wenn einer der beiden Inverter einen LOW-Zustand liefert, hängt der Zustand des anderen Inverters nur von seinem Dateneingang ab. Der Zustand dieses Eingangs ist dann am Ausgang des Multiplexers zu sehen.

Ein Schaltungsdesign mit einem Fan-Out von 3 und einem geeigneten Verhältnis von Spitzenstrom zur Speicherzeit liefert eine maximale Taktfrequenz von 20 GHz bei geringer Leistungsaufnahme. Der Multiplexer hat eine sehr hohe Ausgangs- und eine geringe Eingangsimpedanz.

Schließlich ergibt sich damit die Möglichkeit, einen Parallel-Addierer auf der Basis resonanter Tunnелеlemente zu entwerfen [11, 12].

Durch die Bereitstellung der aufgeführten Logik-Gatter wird eine neuartige Schaltungstechnik zur Realisierung beliebiger logischer Funktionen möglich, die sich durch eine enorme Schaltungsvereinfachung, Verwendung extrem schneller Bauteile und geringe Leistungsaufnahme auszeichnet.

Durch die konsequente Nutzung von „differenzieller Logik“ ist es zum Beispiel möglich, einen Volladdierer zu bauen, der sieben Transistoren weniger benötigt als ein CMOS Logik-Gatter.

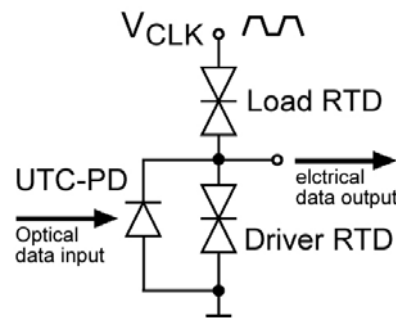


Abbildung 2.9: Delayed Flip-Flop [13]

- Resonante Tunneldioden können zudem in optoelektronischen *D-Flip-Flops* eingesetzt werden. Dabei wird, wie Bild 2.9 zu entnehmen ist, ein MOBILE mit einer UTC-PD als Stromsteuerung benutzt. Bei steigender Taktflanke wechselt das MOBILE abhängig vom Lichteinfall in den LOW- oder HIGH-Zustand. Die Leistungsaufnahme liegt bei 7,75 mW und die Verarbeitungsgeschwindigkeit bei 80 Gbit/s. Die Schaltung wird nach Abb. 2.10 integriert: Die UTC-PD-Schichten werden auf einem InP-Substrat mithilfe der MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition)-Methode aufgebracht. Die p+-InGaAs-Pufferschicht, die InAlAs-Barriere, die AlAs-Maskierung und die RTD-Schicht werden auf die UTC-PD-Schichten dagegen mithilfe der MBE (Molecular Beam Epitaxy)-Methode aufgewachsen. Die Geschwindigkeit des Flip-Flops wird durch die Kapazitäten der Treiber-RTD und der UTC-PD begrenzt. Indem die Größe der Treiber-RTD verringert und eine Fotodiode mit größerer Bandbreite verwendet wird, lassen sich Geschwindigkeiten von 100 Gbit/s erreichen.

Ein kleiner *Hochgeschwindigkeitsempfänger* für optische Netzwerke kann durch einen schnellen Oszillator realisiert werden. Der dazu benötigte Schaltkreis (clock recovery circuit) besteht aus einer RTD, einer dazu parallel geschalteten UTC-PD und einer Übertragungsleitung. Ähnlich der Funktionsweise des oben beschriebenen D-Flip-Flops wird der eigentlich freilaufende RTD-Oszillator durch das digitale optische Signal gesteuert. Dabei ist es möglich, sowohl die Grundschiwingung (11,55 Gbit/s) als

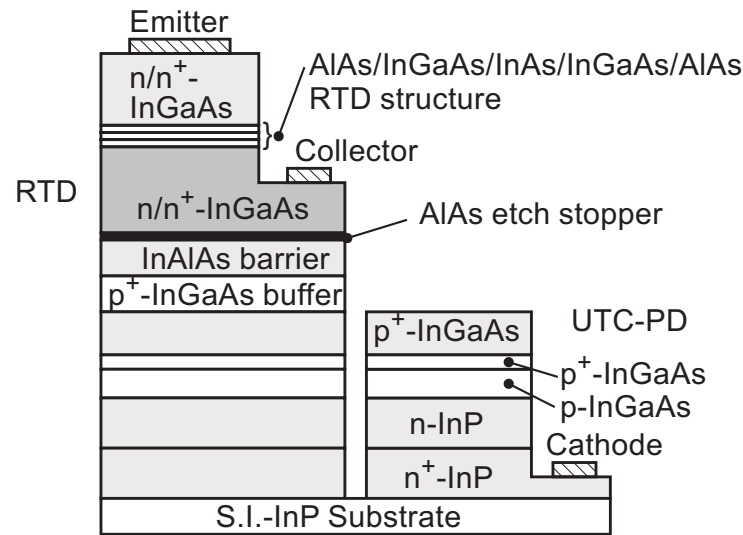


Abbildung 2.10: Monolithisch integrierte RTD und UTC-PD [13]

auch Oberschwingungen (23,1 Gbit/s und 46,2 Gbit/s) zu übersetzen. Die 'locking range' (Fangbereich) liegt bei der Grundschiwingung von 450 MHz und bei der ersten und dritten Oberschwingung bei 600 MHz. Die Leistungsaufnahme beträgt nur 1,3 mW.

Um den Nachteilen der neuen D-Flip-Flops und Demultiplexer, die geringe Fan-Outs haben und keine 50 Ω -Systeme betreiben können, zu begegnen, wird ein SCFL (Source-Coupled FET-Logic)-kompatibler 40 Gbit/s-Selektorkreis vorgestellt [14]. Dieser besteht aus zwei MOBILEs, einem HEMT-NOR-Gatter und einem HEMT-Ausgangspuffer-Schaltkreis.

Die MOBILEs (hier als Inverter) werden über zwei HEMTs gesteuert und sind an inverse Taktsignale angeschlossen. Dadurch gibt immer nur eines der beiden sein inverses Signal an das NOR-Gatter weiter. Es wird also ein TDM-Signal am Ausgang des NOR-Gatters anliegen.

Der Ausgangspuffer stabilisiert das Ausgangssignal des NOR-Gatters und bereitet es für Breitbandfunktionalität und 50 Ω -Systeme auf. Er besteht aus einem SCFL-Verstärker und einem SCFL-Ausgangstreiber.

- Bild 2.11 zeigt das Schaltbild und die Kennlinie einer RTD-SRAM-Zelle [15]. Diese besteht aus nur zwei RTDs und zwei HFET-Transistoren, was im Vergleich zur klassischen SRAM-Zelle, für die immerhin sechs Transistoren benötigt werden, eine deutlich höhere Packungsdichte ermöglicht.

Da im Ruhezustand nur der Leckstrom des Feldeffekttransistors bereit gestellt werden muss, können RTDs mit sehr niedriger Stromdichte eingesetzt werden. Der daraus resultierende Leistungsverbrauch liegt mit 50 mW etwa um den Faktor 200 unter dem einer klassischen GaAs-SRAM-Zelle.

- Resonante Tunnelprozesse ermöglichen die Erzeugung sehr hoher Frequenzen. Allerdings sind die Ausgangssignale für technische Anwendungen viel zu klein. Die RTD wird dabei in den Last-Bereich eines dreipoligen Elementes integriert, wie z.B. in das Draingebiet eines HFETs. Es entsteht ein rechteckiges Ausgangssignal, welches reich an ungeraden Oberschwingungen ist [16]. Das Diagramm in Abb. 2.12 zeigt rechts

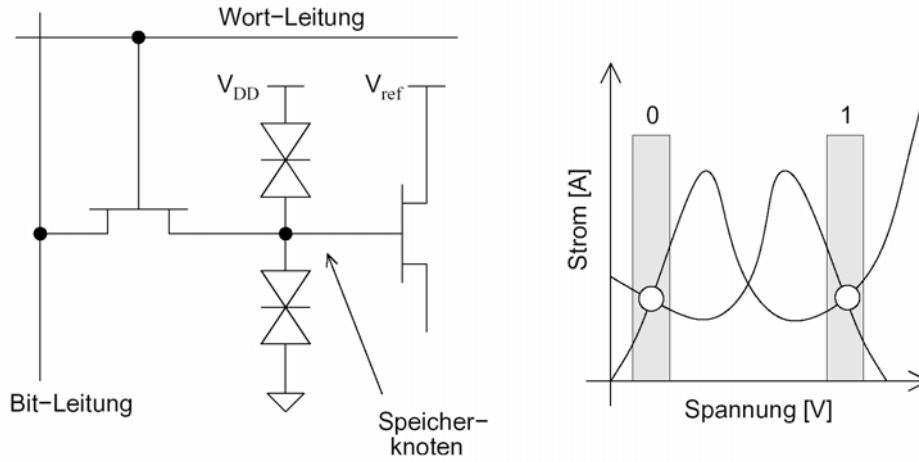


Abbildung 2.11: RTD-SRAM-Zelle und Strom-Spannungs-Charakteristik mit den zwei Strom-Spannungs-Kennlinien der beiden RTDs [15]

das Verhalten der Schaltung für eine Eingangsamplitude von 0,8 V. Die Vorspannung der RTD ist dabei so eingestellt, dass sie sich in einem NDW-Bereich befindet. Durch die abrupten Spannungsänderungen bei ausreichend großen bzw. kleinen Strömen kommt das nahezu rechteckige Ausgangssignal zustande. Der NDW-Bereich selber, welcher Stabilitätsprobleme hervorrufen könnte, wird während des Schaltvorgangs aber nicht genutzt.

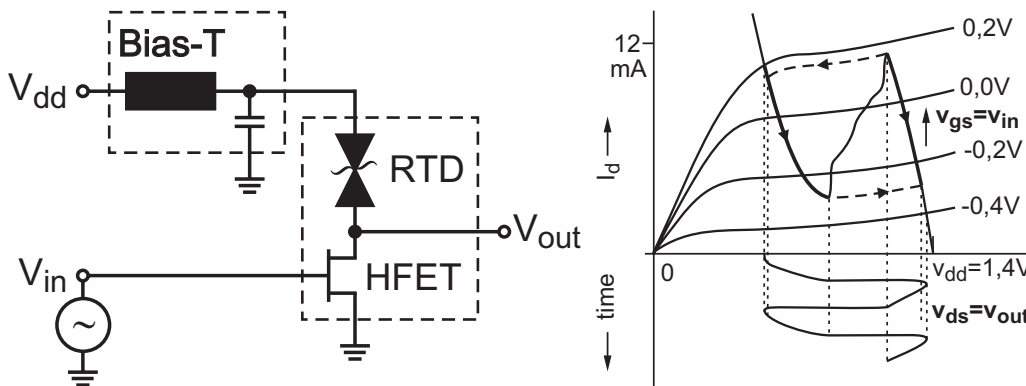


Abbildung 2.12: Links: Frequenzvervielfältiger mit RTD als Last; Rechts: Lastkennlinie und Erzeugung rechteckähnlicher Ausgangsspannung [16]

- Die letzte hier vorgestellte Anwendung ist die Erzeugung von blau-grünem LASER-Licht unter Verwendung eines konventionellen Infrarot-LASERs bei Raumtemperatur [17]. In einer 'micro cavity' (optischer Resonator) mit einer ZnSe-Schicht als Kern des Resonators werden Oberschwingungen der Eingangswelle erzeugt. Dabei werden die nichtlinearen Eigenschaften der verwendeten Halbleiter ausgenutzt. Dieser resonante Effekt ist durch den Einfallswinkel des LASERs so einstellbar, dass Licht zwischen 480 nm und 500 nm emittiert werden kann. Grundlage bilden spezielle, unsymmetrische Quantenbarrieren. Auch diese Strukturen werden mithilfe der MBE-Methode auf Si-dotiertem GaAs-Substrat realisiert.

Prinzipiell sind noch die folgenden Anwendungsgebiete von Bedeutung [4]:

Mehrwertige-Logik. Ein RTBT in Emitterschaltung weist je nach Anzahl der Resonanzen im Quantentopf mehrere leitende und nicht-leitende Bereiche auf. Dadurch können analoge Signale, oder diskrete Signale mit mehr als nur zwei Werten in ein binäres Signal umgewandelt werden.

Analog-to-Digital (AD)-Konverter. Durch die geeignete Beschaltung von mehreren RTBTs mit unterschiedlichen Basiswiderständen kann eine Spannung in ein entsprechendes digitales Signal überführt werden. Dabei bestimmen die Basiswiderstände die Schwellenspannungen.

Offensichtlich gibt es sehr vielfältige Anwendungsmöglichkeiten für Halbleiterquantenstrukturen. Die vorgestellten Beispiele zeigen deutlich, dass mithilfe resonanter Strukturen die Komplexität bestimmter Schaltungen stark verringert werden kann. Die verwendeten Bauteile sind zudem sehr schnell und haben eine geringe Leistungsaufnahme. Die Strukturen können außerdem mit bekannten Herstellungsverfahren realisiert werden.

Physikalische Simulationen sind wichtig für ein tieferes Verständnis dieser Komponenten. Einige Ansätze erfassen die speziellen Effekte in der Doppelbarrierenstruktur (s. Kap. 3). Der hier vorgestellte Ansatz dagegen soll auch das Zusammenspiel der RTD-Schichten mit den klassischen äußeren Schichten berücksichtigen. Es wird deshalb bewusst auf die Erfassung einiger Streueffekte verzichtet, um einen Algorithmus zu entwickeln, der größere Strukturen, die quantenmechanische Gebiete enthalten, problemlos berechnen kann. Dabei steht der Gedanke der Praktikabilität an erster Stelle.

2.3 Parameter

Charakteristische Parameter der resonanten Tunneldiode zur Analysierung von Schaltungen sind der Maximal-Strom I_P und der Tal-Strom I_V mit den entsprechenden Spannungen V_P und V_V sowie das entsprechende Verhältnis von Maximal- zu Tal-Strom PVR (peak-to-valley current ratio):

$$PVR = \frac{I_P}{I_V}. \quad (2.6)$$

Grundsätzlich ist ein großes PVR wünschenswert, allerdings bedeutet ein hoher Maximal-Strom einen größeren Leistungsverbrauch und ein langsames Verhalten. Ein niedriger Tal-Strom dagegen ist in jeder Hinsicht vorteilhaft, sowohl was das Schalten zwischen verschiedenen Zuständen betrifft, als auch für den Leistungsverbrauch. Dabei muss nicht unbedingt um jeden Preis ein hohes PVR erreicht werden. Es sollte in erster Linie ausreichen, die logische Funktion mit ausreichendem Rauschabstand zu gewährleisten. Die Bestimmung des Tal-Stromes sowie des PVR ist das vordergründige Ziel der Simulationen.

2.4 Technologie

Da derzeitige integrierte Schaltkreise auf der Silizium-Technologie basieren, ist es wünschenswert, auch RTDs im Si/SiGe-System zu bauen. Leider sind zahlreiche Versuche gescheitert, hier gute Parameter zu erreichen. Dies liegt vor allem daran, dass die Potenzialstufe in einem Si/SiGe-System zu niedrig ist, so dass keine ausreichend gebundenen Zustände vorliegen und der PVR im Wesentlichen nahe 1 liegt [18]. In diesem System steht ein Durchbruch also noch aus.

Erfolge gibt es eher in den III/V-Halbleitersystemen. Da ist vor allem das GaAs/AlGaAs-System zu nennen, welches schon recht weit entwickelt ist, bessere Parameter allerdings bietet das InGaAs/AlAs-System auf InP. Indium senkt das Resonanzniveau, weshalb sich ein geringerer Maximal-Strom einstellt. So wird weniger Leistung verbraucht, was in logischen Schaltungen von großem Nutzen ist.

RTDs basierend auf III/V-Halbleitern werden ausgehend von einer epitaktisch abgeschiedenen Schichtstruktur hergestellt. Für die Epitaxie wird neben der MBE (Molecular Beam Epitaxy) auch die MOVPE (Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy) erfolgreich eingesetzt [19]. Für diese Schichtstrukturen wird eine hohe Genauigkeit und Uniformität von einigen Å in der Schichtdicke gefordert. Die RTDs werden mittels Lithographie, Metalldeposition, nass- und trockenchemischer Ätzprozesse hergestellt. Jeder Prozessschritt kann für die Charakteristika der RTD kritisch sein, so führt z.B. ein schlechter Metallkontakt zu höherem Kontaktwiderstand. Folglich verschlechtert sich die Zeitkonstante und somit die Hochfrequenzeigenschaften. Außerdem wird bei kleinen Dimensionen der RTD die Empfindlichkeit der Charakteristika vor allem durch Prozessvariationen in der Lithographie beeinflusst und weniger durch Ungenauigkeiten in der Epitaxie [20]. Deshalb muss in Zukunft die Lithographie für kleine Dimensionen ($<0,2 \mu\text{m}$) optimiert werden, während die epitaktische Schichtqualität die RTD-Charakteristika nicht wesentlich einschränkt.

3 Verfahren zur Simulation und Modellierung

Überblick: *Die Simulationsverfahren für das Transportverhalten lassen sich in kohärente Modelle, zu denen Berechnungen mit der Schrödinger-Gleichung gehören, und kinetische Modelle einteilen. Die kinetischen Modelle beschreiben gemischte Zustände und lassen damit die Erfassung von Streuprozessen zu. Zu ihnen gehören die Dichtematrix, die Wigner-Funktion und die Green-Funktion.*

Es soll ein kurzer Überblick über verschiedene Simulationsverfahren für Doppelbarrieren-Strukturen gegeben werden (hilfreich dazu ist die Übersicht in Abb. 3.1). Klar ist, dass hierzu die Quantentheorie angewendet werden muss, da es sich beim resonanten Tunneln um einen quantenmechanischen Effekt handelt. Die Verfahren selber müssen sich dabei im Wesentlichen an der richtigen Voraussage der Strom-Spannungs-Kennlinie beweisen. Wesentlich ist, dass die Bewegung der Ladungsträger in ihren wesentlichen physikalischen Prozessen richtig beschrieben wird. Die RTD-Simulation kann daher auch als Standortbestimmung bei der generellen Simulation von quantenmechanischen Transporteigenschaften verstanden werden.

Ein wichtiger Gesichtspunkt ist die Tatsache, dass es sich bei der RTD um ein offenes Quantensystem handelt, welches mit seiner klassischen Umgebung wechselwirkt. Dies muss bei der Festlegung der Randbedingungen beachtet werden.

Nach der Art, wie die Zustände der Elektronen beschrieben werden und wie diese mit ihrer Umgebung interagieren, lassen sich die physikalischen Modelle in zwei Kategorien einteilen [18]:

- *Kohärente* dynamische Modelle, deren Modellgröße die Einhüllende eines Zustandes ist; diese wird durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt, welche reine Zustände beschreibt.
- *Kinetische* Modelle, zu denen die Dichtematrix, die Wigner-Funktion und die Green-Funktion gehören; solche Modelle nutzen die Beschreibung gemischter Zustände.

Kohärente Modelle

Die Einhüllende eines Zustandes ist Kern der kohärenten Modelle. Basierend auf der Theorie der effektiven Massen, bei der das Gitterpotenzial in die effektive Reaktion der Ladungsträger integriert ist, werden die sich schnell ändernden periodischen Komponenten der Wellenfunktion vernachlässigt. So ergibt sich eine Schrödinger-Gleichung für effektive Massen, in der das Potenzial die Informationen über den Heteroübergang sowie

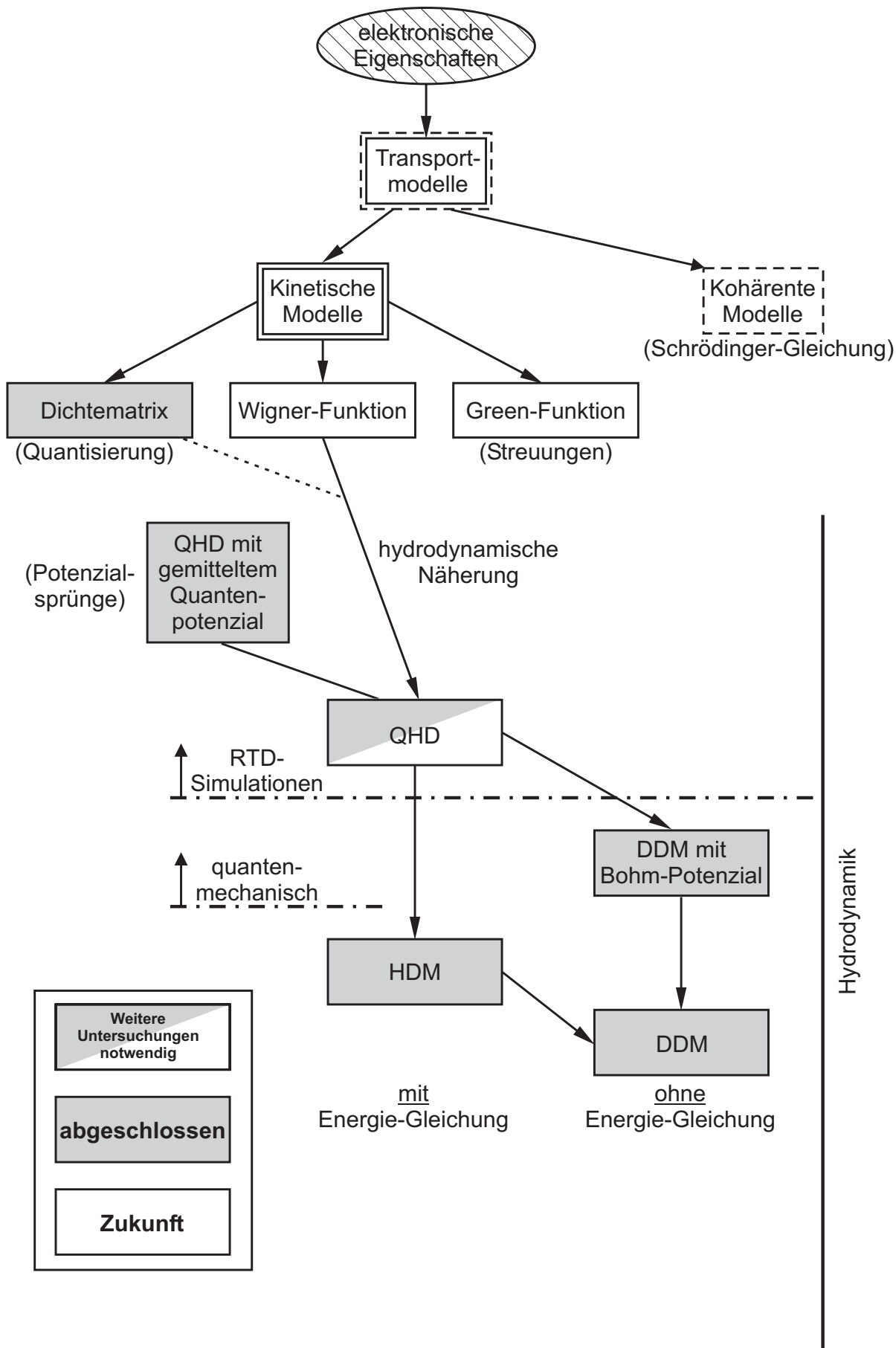


Abbildung 3.1: Übersicht über die Transportmodelle

das selbstkonsistente Hartree-Potenzial enthält. Die Schrödinger-Gleichung muss demnach iterativ mit der Poisson-Gleichung verkoppelt werden, damit das System selbstkonsistent gelöst werden kann. Neben der Vernachlässigung der sich schnell ändernden periodischen Anteile ist natürlich nur die Berechnung reiner Zustände möglich und stellt somit eine weitere Einschränkung dar.

Ergebnis dieser Berechnungen sind dann Transmissions- und Reflexionskoeffizienten, aus denen dann Stromdichten errechnet werden können. Die Ergebnisse sind nicht besonders gut, da es nicht möglich ist, in einem kohärenten Modell die wichtigen Phononen-Streuungen zu beschreiben, welche einen Energieaustausch bewirken. Die Schrödinger-Gleichung setzt aber feste Energieeigenwerte voraus. So haben Vergleiche gezeigt, dass das *PVR* deutlich überschätzt wird, da von einem resonanten Vorgang ausgegangen wird. Zusätzlich wird der Überschussstrom unterschätzt.

Der Vorteil dieses Modells liegt in einer schnellen Einschätzung des Resonanzniveaus, da das Konzept recht einfach ist.

Kinetische Modelle

Die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden zählen zu den kinetischen Modellen. Dazu gehört der Dichtematrixformalismus, die Wigner-Funktion und auch die Green-Funktion. Gemeinsam ist diesen Verfahren die Möglichkeit, interne Kräfte, wie z. B. inelastische Stöße, berücksichtigen zu können. Es handelt sich weiterhin um Mehrteilchen-Systeme, die mit gemischten Zuständen (vgl. Abschnitt 5.2) beschrieben werden. Sowohl die Dichtematrix als auch die Wigner-Funktion erfassen Phononen-Streuungen mithilfe eines halbklassischen Relaxationszeitansatzes. Damit wird die Simulation zu wesentlich realistischeren Ergebnissen führen, als es die kohärenten Verfahren vermögen.

Die Dichtematrix ist durch die Liouville-Gleichung (5.4) bestimmt, alternativ kann über die zweite Quantisierung eine äquivalente Bestimmungsgleichung gefunden werden (s. Abschnitt 5.3). Verknüpft über eine Fourier-Transformation ergibt sich die Wigner-Funktion (6.1), welche durch die Wigner-Boltzmann-Gleichung (6.6) beschrieben wird (Abschn. 6.1). Für die Simulation von Streuprozessen ist die Green-Funktion die erste Wahl, da sie alle Interaktionen beschreiben kann. Der Strom ergibt sich dann aus der Summe aller Antworten auf Anregungen. Nachteilig ist, dass dieses Modell nicht sehr leicht zu formulieren ist. Es müssen für die einzelnen Prozesse eigene Green-Funktionen aufgestellt werden, der Rechenaufwand ist zudem hoch. Dennoch ist dies das viel versprechendste Modell, wenn es um die effiziente Modellierung der RTD als einzelne Komponente geht. Falls aber klassische Strukturen flexibel berechnet werden sollen, bedeuten die Green-Funktionen einen hohen Aufwand. Mit NEMO [3, 21] (Militärentwicklung, nicht verfügbar) ist ein ausgereiftes Programm entwickelt worden, welches auf der Basis von Green-Funktionen arbeitet. Es ist dabei wichtig, dass hier auch hohe Vorspannungen zu guten Ergebnissen führen.

Rechenaufwand und Flexibilität sprechen aber auch durchaus für die Verwendung von Dichtematrizen und Wigner-Funktionen. Diese ermöglichen zusätzlich die Entwicklung eines quantenhydrodynamischen Modells (Kap. 6), das sich an einfacheren klassischen Transportmodellen orientiert. Hier liegt der Schlüssel für ein sehr effizientes Verfahren.

Es ist mit diesem Modell erstmals möglich, beliebige Schichtstrukturen in einem einzigen Modell zu berechnen, unabhängig davon, ob sie quantenmechanische oder klassische Berechnungsverfahren verlangen. Dabei können nach Belieben Korrekturterme hinzu- oder herausgenommen werden.

Im folgenden Überblick werden die wichtigsten Verfahren zusammengefasst, die in dieser Arbeit besprochen werden. Diagramm 3.1 zeigt eine Übersicht über die Welt der Transportmodelle. Die Abkürzungen darin stehen für:

- QHD = Quantenhydrodynamisches Modell
- HDM = Hydrodynamisches Modell
- DDM = Drift-Diffusions-Modell.

Diese Modelle haben folgende Charakteristika:

- Das **quantenhydrodynamische (QHD) Modell** ermöglicht die **analoge Berechnung klassischer und quantenmechanischer Strukturen**. Damit lassen sich Quantenbauelemente wie die **Resonante Tunneldiode (RTD)** auf effiziente Art auch in Verbindung mit anderen Halbleiterbauelementen simulieren.
- Das QHD-Modell wird aus der auf ein quantenmechanisches kinetisches Modell, wie die Wigner-Funktion oder die Dichtematrix, angewandten hydrodynamischen Näherung entwickelt. Damit entsteht ein hydrodynamisches Modell, welches quantenmechanische Korrekturterme beinhaltet.
- Hydrodynamische Modelle setzen voraus, dass sich das klassische Potenzial, welches auf die Elektronen wirkt, in eine Taylor-Reihe entwickeln lässt. Dies ist bei Heterostrukturen, die **Potenzialsprünge** enthalten, nicht der Fall, also auch nicht bei der Resonanten Tunneldiode. Aus diesem Grund wird ein **gemitteltes Quantenpotenzial** eingeführt, welches auf die Entwicklung des Potenzials verzichtet. Es entsteht ein effektives Potenzial mit geglättetem Verlauf.
- Da die Quantisierung der Zustände in einem Quantentopf zwischen zwei Barrieren wichtig für die Funktionsweise einer RTD ist, muss die **Energiegleichung** des QHD-Modells in die Simulation einbezogen werden. Ein Drift-Diffusions-Modell, welches eine konstante Energie voraussetzt, reicht in diesem Fall nicht aus.
- Der Einfluss von **Streumechanismen** wird im QHD-Modell durch einen Relaxationsansatz erfasst.
- Die **Elektronen-Dichtematrix** des Systems wird berechnet. Ob die **Quantisierung** der Zustände durch die Quantenkorrekturen ausreichend erfasst ist, kann auf diese Weise überprüft werden.
- Es wird gezeigt, wie spinabhängiger Transport in die vorhandenen Modelle integriert werden kann, um den Quantentransport in magnetoresistiven Speichern (MRAMs) beschreiben zu können.
- Das momentan stationäre Modell kann um die Zeitabhängigkeiten erweitert werden, die es ermöglichen, das **dynamische Verhalten** der Quantenbauelemente zu untersuchen. Die Berechnungen können Aufschluss über das Hochfrequenzverhalten geben und so die Makromodellierung fördern.

Eine kurze Übersicht über die wichtigsten Ergebnisse soll helfen, die Herleitung der Modelle in den nächsten Kapiteln besser einordnen zu können.

Abb. 3.2 zeigt zunächst, dass das QHD-Modell (Kap. 6) prinzipiell in der Lage ist, den negativen differentiellen Widerstand einer RTD zu beschreiben (Abschnitt 8.6). Die Vorspannungen sind niedrig bei einer Temperatur von 90 K. In diesem Bereich war der Algorithmus noch recht stabil, was zu höheren Spannungen hin nicht mehr der Fall war. Hier ist die Strom-Spannungs-Charakteristik einer Doppelbarrieren-Struktur dargestellt. Durch die Berücksichtigung der Energiegleichung und des diskreten Energieniveaus durch die Quantenkorrekturen kommt der typische Verlauf der Strom-Spannungs-Charakteristik zustande.

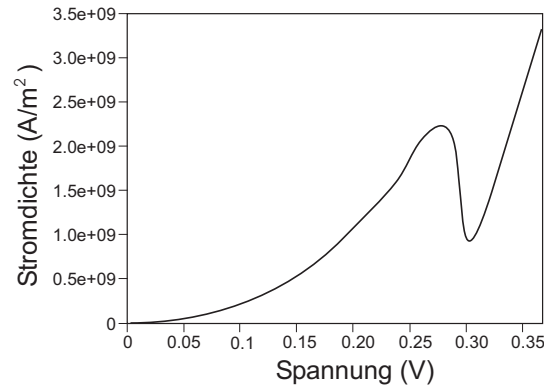


Abbildung 3.2: Strom-Spannungs-Kennlinie für niedrige Vorspannungen bei 90 K

Das so genannte Bohm-Potenzial, also allein die Quantenkorrektur in der Stromgleichung, glättet nur die Teilchendichte, nicht aber das selbstkonsistente Potenzial (Abschnitt 6.3), was in der folgenden Abbildung 3.3 dargestellt ist. Links findet sich der Einfluss des Bohm-Potenzials auf einen Potentialsprung, rechts die durch das Bohm-Potenzial geglättete Verteilung der Teilchendichte eines Potenzialtopfes. Aus dieser Tatsache erwächst die Notwendigkeit, ein gemitteltes Quantenpotenzial einzuführen, welches das Potenzial selbst glättet.

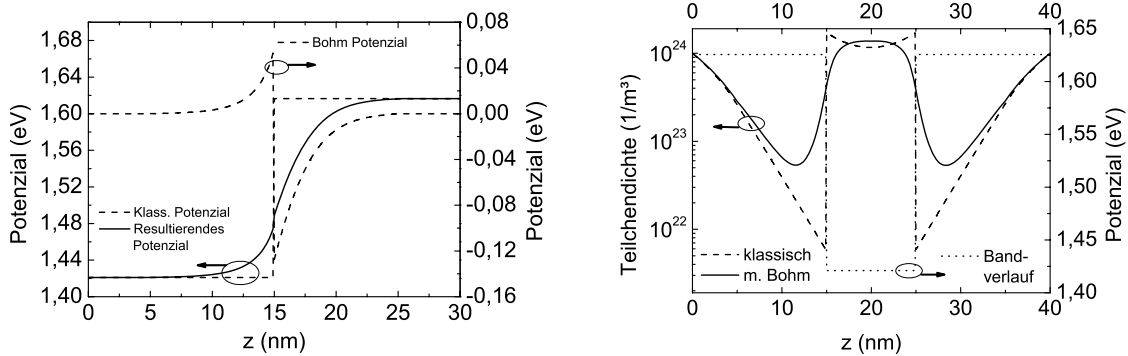


Abbildung 3.3: Links: Potentialsprung mit und ohne Bohm-Potenzial; Rechts: Teilchendichten mit und ohne Bohm-Potenzial

Das aus dem gemittelten Quantenpotenzial (Abschnitte 6.4 und 8.7) entstehende effektive Potenzial einer Doppelbarriere zeigt Abb. 3.4. Hier ist nun auch das Potenzial selbst differenzierbar, weist also keine Sprünge mehr auf.

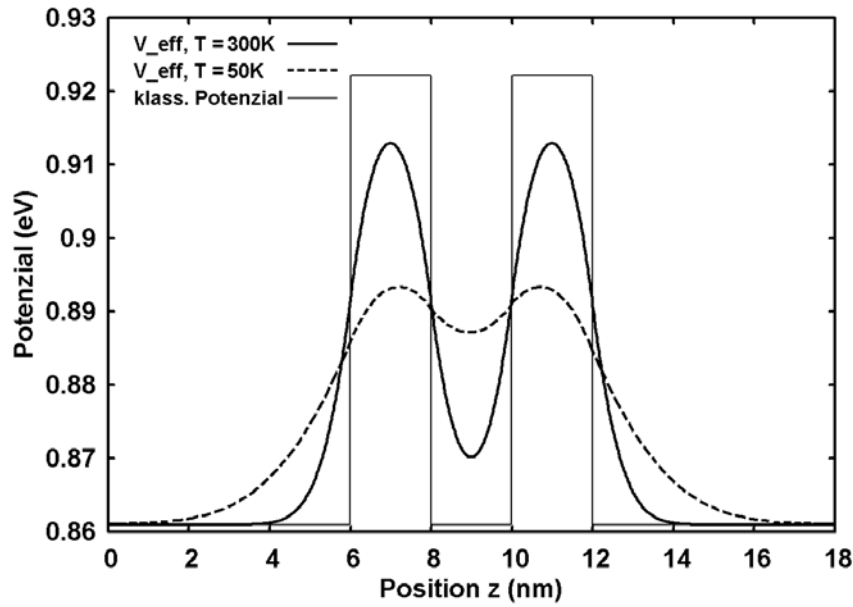


Abbildung 3.4: Effektives, geglättetes Potenzial einer Doppelbarrierenstruktur

Schließlich gibt Abbildung 3.5 den Realteil der Dichtematrix (Kap. 9) für eine RTD-Struktur zunächst im Gleichgewicht an. Die Diagonale dieser Dichtematrix ist dabei die Verteilung der Ladungsträgerdichte. Die Ladungsträgeranhäufung im Quantentopf ist in der Mitte klar erkennbar, ebenso die Verarmung im Bereich der Barrieren. Elemente abseits der Diagonalen sind bilokale Korrelationen von Ladungsträgern an verschiedenen Orten. Dass diese Korrelationen endliche Werte besitzen, entspricht ihrem quantenmechanischen Charakter.

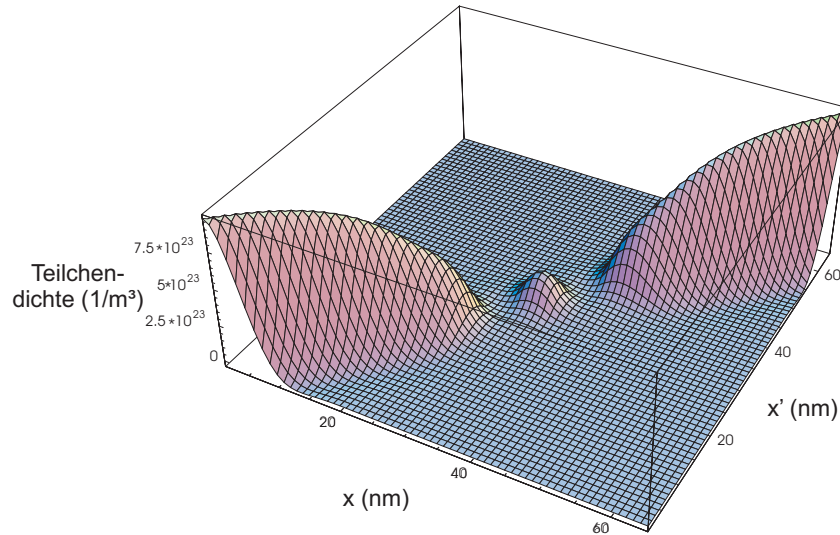


Abbildung 3.5: Realteil der Dichtematrix im Gleichgewicht

Der Imaginärteil der Dichtematrix bestimmt den Strom der Ladungsträger. Real- und Imaginärteil der Dichtematrix bei einer Vorspannung von 110 meV stellt die Abbildung 3.6 dar. Deutlich sind Korrelationen der gebundenen Zustände mit den äußeren Bereichen der Struktur an dem kreuzförmigen Muster des Imaginärteils zu erkennen.

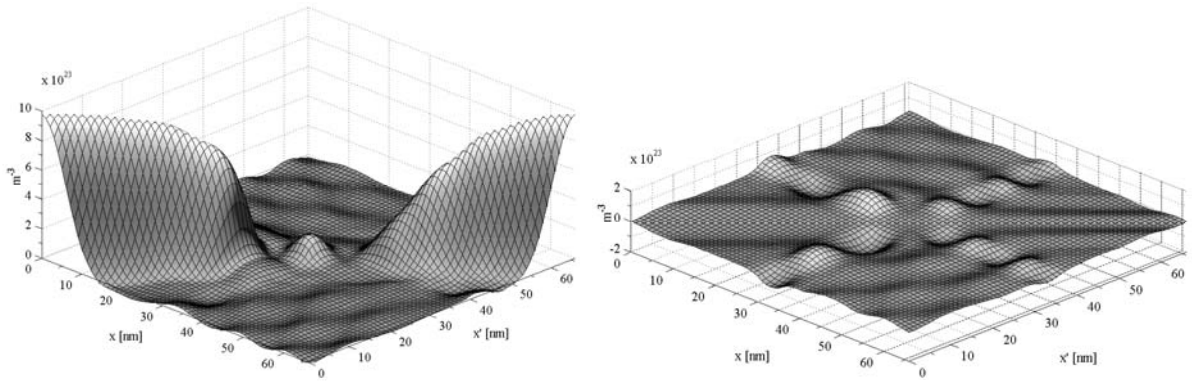


Abbildung 3.6: Links: Realteil der Dichtematrix im stationären Zustand bei 110 meV;
Rechts: Imaginärteil

Die aus der Dichtematrix-Rechnung folgende Strom-Spannungs-Kennlinie für verschiedene Relaxationszeiten ist in Abb. 3.7 zu finden. Es zeigt sich, dass das Phänomen des resonanten Tunnelns zu kleinen Relaxationszeiten hin nicht mehr stark ausgeprägt ist. Hier ist ein Übergang zum sequenziellen Tunneln zu vermuten.

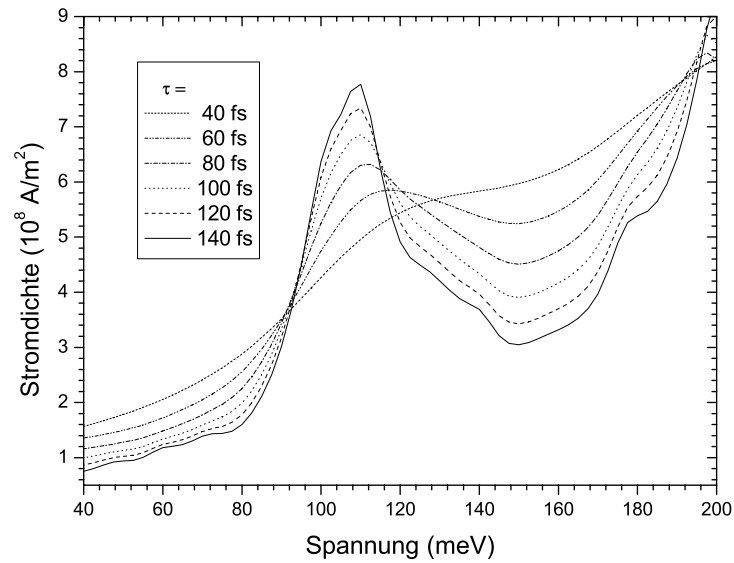


Abbildung 3.7: Strom-Spannungs-Kennlinie der Dichtematrix-Rechnung

4 Ladungsträger im Halbleiter

Überblick: In diesem Kapitel werden die grundlegenden Gleichungen hergeleitet, die Elektronen im Halbleiter beschreiben. Dabei wird zunächst noch bewusst darauf verzichtet, auf die Transportprozesse einzugehen. Ausdrücke für den Strom und die Energie der Teilchen werden erst im Kapitel 6 über das quantenhydrodynamische Modell gefunden und im Kapitel 8 für die Implementierung aufbereitet.

Aus den Maxwell-Gleichungen werden die **Poisson-Gleichung** und die **Kontinuitätsgleichungen** hergeleitet, anschließend ein Ausdruck für die **Ladungsträgerdichten** für Fermi-Verteilung vorgestellt, und schließlich folgen phänomenologische Ansätze für die Rekombinations- und Generationsraten.

4.1 Die Maxwell-Gleichungen

Die wesentlichen Eigenschaften von Elektronen im Halbleiter lassen sich aus den Maxwell-Gleichungen herleiten. Diese lauten:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \quad (4.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \varrho \quad (4.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0. \quad (4.4)$$

Das elektrische Feld \vec{E} und die elektrische Flussdichte \vec{D} sind über die Beziehung

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \quad (4.5)$$

verknüpft, in der die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ eigentlich ein Tensor ist. Hier werden jedoch eine zeitunabhängige und bereichsweise homogene Dielektrizitätszahl und ein damit skalarer Wert ε_r vorausgesetzt. Analog hängen das magnetische Feld \vec{H} und die magnetische Flussdichte \vec{B} in unmagnetischen Materialien durch

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}, \quad (4.6)$$

mit der magnetischen Feldkonstante μ_0 , voneinander ab. ϱ ist die elektrische Raumladungsdichte, \vec{J} bezeichnet die elektrische Stromdichte.

4.2 Die Poisson-Gleichung

Die Poisson-Gleichung folgt unmittelbar aus den Maxwellschen Gleichungen. Sie beschreibt den Einfluss der vorhandenen Ladungsträger auf das elektrostatische Potenzial. Ein solches Potenzial ist nur für ein wirbelfreies Feld gegeben. Mithilfe der Gleichung (4.2) wird dieses zu

$$\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\nabla \cdot \Psi \quad (4.7)$$

mit dem magnetischen Vektorpotenzial \vec{A} , das durch

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (4.8)$$

definiert ist. Die Ladung kommt aus der dritten Maxwell-Gleichung (4.3), so dass sich die allgemeine Form der Poisson-Gleichung zu

$$\nabla \cdot \left(\varepsilon \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) + \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \cdot \Psi) = -\varrho \quad (4.9)$$

ergibt. In nichtrelativistischer Näherung und für ein unveränderliches Magnetfeld folgt daraus die Poisson-Gleichung in der üblichen Form, welche mit den Ladungsträgerdichten n und p sowie den Konzentrationen der einfach ionisierten Donatoren N_D und Akzeptoren N_A

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \cdot \Psi) = -e(p - n + N_D - N_A) \quad (4.10)$$

lautet.

4.3 Die Kontinuitätsgleichungen

Die Erhaltung der Ladungsträger bei Stromfluss, also außerhalb des Gleichgewichts, wird durch die Kontinuitätsgleichungen ausgedrückt. Diese lassen sich auf verschiedene Arten herleiten. Der übliche Weg nutzt die Herleitung aus den Maxwell-Gleichungen, sie folgen aber auch aus den Transportmodellen, siehe Gleichungen (5.49) und (5.50) sowie (6.40). Der Einfluss der Generation und Rekombination von Ladungsträgern kann aber anschaulicher anhand der Maxwell-Gleichungen verdeutlicht werden. Aus der ersten Maxwell-Gleichung (4.1) folgt mit der Aufteilung der Stromdichte $\vec{J} = \vec{J}_e + \vec{J}_h$ und zeitinvariantem Dotierungsprofil

$$\nabla \cdot \vec{J}_e - e \frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_h - e \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (4.11)$$

Es ist nun sinnvoll, diese Gleichung für Elektronen und Löcher aufzuteilen. Das Bindeglied dieser zunächst formalen Aufteilung ist die Differenz aus Rekombinations- und Generationsrate R , also eine Nettogenerationsrate. Dies führt zu:

$$\nabla \cdot \vec{J}_e - e \frac{\partial n}{\partial t} = eR \quad (4.12)$$

$$\nabla \cdot \vec{J}_h + e \frac{\partial p}{\partial t} = -eR. \quad (4.13)$$

Ein Ausdruck für den Strom wird über das quantenhydrodynamische Modell hergeleitet (Abschnitt 6.2). So wird die Stromdichte selbst nur aus anderen Größen abgeleitet und in den Implementierungsgleichungen nicht mehr explizit auftauchen. Ähnliche Ansätze sind für das Drift-Diffusions-Modell hinreichend bekannt. Hier wird aber zusätzlich von einer variablen Temperatur ausgegangen, welche die Gleichungen im Vergleich zum Drift-Diffusions-Modell [22] komplexer macht.

4.4 Ladungsträgerdichten

Bis zu diesem Punkt sind die Ladungsträgerdichten noch eigenständige Variablen. Unter der Voraussetzung des lokalen Gleichgewichts, welches im hydrodynamischen Modell angesetzt wird (Abschnitt 5.4 und Kapitel 7), lässt sich aber auch eine Formulierung der Ladungsträgerdichten finden, die dann auf die Fermi-Verteilung bzw. auf die Quasi-Fermi-Potenziale zurückgeführt werden. Dieses Verfahren soll im Folgenden erläutert werden und hat den konkreten Vorteil, dass sich ein auf Quasi-Fermi-Potenzialen basierender Variablensatz numerisch wesentlich günstiger verhält.

Da die Berücksichtigung von nichtparabolischen Bändern es nicht erlaubt, analytische Ausdrücke der Stromgleichungen zu formulieren, wird hier nur von parabolischen Bändern ausgegangen.

Die Ladungsträgerdichten ergeben sich aus dem über der Energie integrierten Produkt der möglichen Zustände ρ , die die Ladungsträger einnehmen können, und der Besetzungswahrscheinlichkeit f .

Fermi-Funktionen geben die Besetzungswahrscheinlichkeiten an, da der Abbruch der Momentenhierarchie, also die hydrodynamische Näherung, in der Annahme des lokalen Gleichgewichts besteht. Sie lauten

$$f_e = \frac{1}{1 + \exp\left(-\eta_e + \frac{1}{k_B T} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e}\right)} \quad \text{und} \quad (4.14)$$

$$f_h = \frac{1}{1 + \exp\left(\eta_h + \frac{1}{k_B T} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_h}\right)} \quad (4.15)$$

mit dem Argument

$$\eta = \frac{W_F - V}{k_B T}. \quad (4.16)$$

Die Fermi-Energie W_F setzt sich dabei aus

$$W_F = W_{Fi} - e\Phi \quad (4.17)$$

zusammen, wobei W_{Fi} das intrinsische Fermi-Niveau ist und Φ das Quasi-Fermi-Potenzial, welches die Abweichung der Fermi-Niveaus vom intrinsischen Fermi-Niveau beschreibt. Genau dies ist der Gleichung (4.17) zu entnehmen.

V ist die Potenzialenergie des jeweiligen Teilchens bestehend aus der Bandenergie W_0 ,

dem selbstkonsistenten Potenzial Ψ und zum Beispiel der Bohm-Potenzialenergie Q_B für gespannte Quantenstrukturen oder eines anderen Quantenpotenzials (s. Abschnitt 6.4)

$$V = W_0 - e\Psi - Q_B/3. \quad (4.18)$$

In Abschnitt 6.3 wird das Bohm-Potenzial beschrieben.

Mit dem Faktor 2 für die beiden unterschiedlichen Spinorientierungen ergeben sich die Lösungen

$$n = N_e F_{1/2}(\eta_e) \quad (4.19)$$

$$p = N_h F_{1/2}(-\eta_h). \quad (4.20)$$

Hier ist N die effektive Zustandsdichte für parabolische Bänder

$$N = 2 \left(\frac{2\pi m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (4.21)$$

und $F_{1/2}(x)$ das Fermi-Integral der Ordnung $1/2$ (s. Anhang A.4). Dieses ist folgendermaßen definiert

$$F_{1/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{W}}{1 + \exp(W - x)} dW. \quad (4.22)$$

In der Literatur ist das Fermi-Integral unterschiedlich angegeben. Oft ist der Vorfaktor nicht in der Definition enthalten, darauf sollte geachtet werden.

4.5 Rekombinations- und Generationsraten

In der Herleitung der Kontinuitätsgleichungen war die Trennung der Gleichungen für Elektronen und Löcher zunächst ein rein formaler Schritt. Mit R ist eine Rekombinations- und Generationsnettorate eingeführt worden, welche durchaus einen physikalischen Hintergrund aufweist. Unter zahlreichen physikalischen Phänomenen, die zur Rekombination/Generation beitragen, sind drei Mechanismen entscheidend und werden hier vorgestellt. Es sind spontane Rekombination, Auger-Übergänge und Phononen-Übergänge [22]. Diese sind in Abbildung 4.1 dargestellt.

Sofern Interaktionsprozesse zwischen den einzelnen Mechanismen vernachlässigt werden, ergibt sich die gesamte Rekombinations-Generationsrate R als Summe von spontanen Übergängen R^{sp} , Shockley-Read-Hall-Rekombination R^{SRH} und Auger-Rekombination R^{Aug}

$$R = R^{sp} + R^{SRH} + R^{Aug}. \quad (4.23)$$

Hierbei handelt es sich um inkohärente Übergänge.

Spontane Rekombination

Die spontane Rekombination ist ein direkter Rekombinationsmechanismus, ein Photonenübergang. Unter Aussendung eines Photons mit ungefähr der Bandlückenenergie fällt

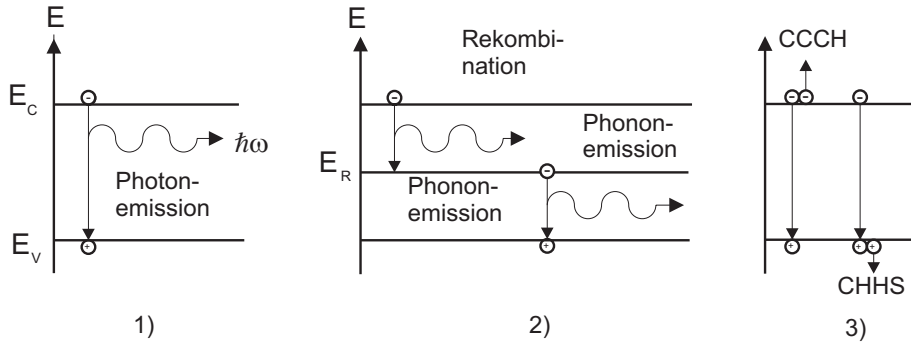


Abbildung 4.1: Rekombinationsmechanismen: 1) Strahlender Übergang, 2) Nichtstrahlender Übergang über ein Rekombinationszentrum, 3) Auger-Rekombination

ein Elektron aus dem Leitungsband in das Valenzband. Dieser Vorgang passiert ohne äußere Anregung und wird auch strahlende Rekombination genannt. Der Umkehrprozess ist die optische Generation. Die Rekombinationsrate R^{Sp} ist durch die Differenz dieser beiden Prozesse gegeben

$$R^{Sp} = B_{Sp}(np - n_0p_0), \quad (4.24)$$

mit der optischen Absorptionsrate $B_{Sp} = 1,52 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ [23]. Die Abhängigkeit von Temperatur, Bandlücke und Ladungsträgerdichte wurde vernachlässigt.

Shockley-Read-Hall-Rekombination

Dieser Mechanismus erfolgt indirekt über Rekombinationszentren mit der Energie E_R . Ein Elektron aus dem Leitungsband fällt in ein Rekombinationszentrum. Dabei wird ein Phonon ausgesandt. Das Elektron rekombiniert unter Aussendung eines weiteren Phonons mit einem Loch im Valenzband. Diese beiden Vorgänge erfolgen sequenziell. Die Generation verläuft entsprechend umgekehrt.

Da diese Teilvorgänge sequenziell erfolgen, kann der Mechanismus nur über Rekombinationszentren funktionieren. Die so genannten „Traps“ sind Gitterdefekte, die besonders effektiv wirken, falls sie energetisch in der Mitte der Bandlücke liegen, da dann die maximal nötigen Phononenenergien für die Teilprozesse minimal werden. Dies zeigt, dass Verunreinigungen aufgrund von Dotierung, die nahe eines Bandes liegen, nicht geeignet sind, die Rekombinations-Generationsrate zu erhöhen. Hierzu müssen Defekte in der Mitte der Bandlücke existieren, so dass dieser Übergang stark von der Kristallqualität abhängt. Der Übergang ist als Phononen-Übergang nichtstrahlend. Die zugehörige Rate R^{SRH} wird als

$$R^{SRH} = \frac{np - n_0p_0}{\tau_e(n + n_0) + \tau_h(p + p_0)} \quad (4.25)$$

modelliert mit den Ladungsträgerkonzentrationen n_0 und p_0 des thermodynamischen Gleichgewichts. Dieses Modell hat gegenüber der Originalversion von [23] den Vorteil, dass die Rekombination im thermischen Gleichgewicht verschwindet. Weiter ist eine explizite Angabe der Energie der Rekombinationszentren materialabhängig. Die Annahme aus [24], $E_T = E_c - 0,6 \text{ eV}$, gilt nur im AlGaAs-System, bei Halbleitern mit niedriger Bandlücke wie z.B. InAs ergeben sich unsinnige Rekombinationsraten. Die Ladungsträgerlebensdauern $\tau_{e,h}$ schwanken in der Literatur stark von 10 ns [25] über 2,04 ns [26] bis

hin zu 100-300 ps [27]. Somit hängt dieser Parameter sehr stark mit der Materialqualität zusammen. Sofern nicht anders angegeben, wird der Wert $\tau_{e,h} = 2$ ns angenommen.

Auger-Rekombination

Auger-Rekombinationen sind Drei-Teilchen-Übergänge, bei denen ein Elektron-Loch-Paar rekombiniert und ein Elektron oder ein Loch energetisch anregt. Dieses angeregte Teilchen relaxiert anschließend nichtstrahlend unter Emission von Phononen. Weiter unterscheidet man zwischen direkter und Phononen-unterstützter (indirekter) Auger-Rekombination. Letztere ist aber nur für Temperaturen unter 200 K wichtig [28]. Unter den direkten Auger-Prozessen werden verschiedene Typen klassifiziert. Die wichtigsten sind:

CCCH: Ein Elektron fällt aus dem Leitungs- ins Valenzband und gibt seine Energie an ein anderes Elektron ab, welches somit einen höheren Energiezustand im Leitungsband annimmt. Bei der anschließenden Rekombination mit einem Loch muss dieses eine relativ hohe Wellenzahl haben, um Impulserhaltung zu gewährleisten. Die Rekombination ist proportional zu

$$R_{CCCH} \sim n^2 p \exp\left(\frac{E_{CCCH}}{k_B T}\right)$$

mit der Aktivierungsenergie E_{CCCH} .

CHHS: Durch die Rekombination eines Elektron-Loch-Paares wird ein Loch in das Split-Off-Band gehoben. Die Rekombination ist proportional zu

$$R_{CHHS} \sim n p^2 \exp\left(-\frac{E_{CHHS}}{k_B T}\right)$$

mit der Aktivierungsenergie E_{CHHS} .

Problematisch ist jeweils die Bestimmung des Proportionalitätsfaktors und der Aktivierungsenergie. Diese ist abhängig vom Bandabstand und von der Bandstruktur. Für niedrigen Bandabstand wird im Allgemeinen der benötigte Wellenvektor kleiner, so dass die Wahrscheinlichkeit der Auger-Rekombination steigt. Da der CCCH-Prozess in der Regel überwiegt, ist

$$R^{Aug} = C_{Aug} n(np - n_0 p_0) \exp\left(\frac{E_{Aug}}{k_B T}\right) \quad (4.26)$$

ein sinnvoller Ansatz. In [25] wird ein vereinfachtes Modell für die Rekombinationsrate R^{Aug} vorgeschlagen:

$$R^{Aug} = C_{Aug} n(np - n_0 p_0) \quad (4.27)$$

mit dem konstanten Auger-Koeffizienten $C_{Aug} = 1 \cdot 10^{-29}$ cm⁶/s [24]. Der Einfachheit halber wurde dieses Modell implementiert, da die Auger-Rekombination erst bei sehr hohen Dichten wichtig ist.

5 Grundlagen der Transporttheorie

Überblick: Die für die kinetischen Modelle wichtigen **gemischten Zustände** werden eingeführt. Damit können der Dichteoperator und die **Wigner-Funktion** definiert werden. Weiterhin ergibt sich die **hydrodynamische Näherung**, welche Grundlage für die Entwicklung des quantenhydrodynamischen Modells sein wird.

5.1 Einleitung

Zunächst muss geklärt sein, was charakteristische Eigenschaften einer Transporttheorie sind. Die Ausführungen halten sich dabei an Jäckle [29].

Hiernach betreffen Transporttheorien immer *Erhaltungsgrößen*, welche über das Gesamtsystem konstant bleiben, also Kontinuitätsgleichungen gehorchen. So ist die Aufgabe der Transporttheorie die Berechnung von Strömen und Stromdichten, aus denen sich dann die Erhaltungsgrößen ergeben.

Weiterhin treten Transportvorgänge nicht im thermodynamischen Gleichgewicht auf, weshalb nicht von Gleichgewichts-Verteilungen ausgegangen werden kann.

Es sollen nur Antworten des Systems auf äußere Störungen betrachtet werden, die linear von der Störung abhängen, dies entspricht der Theorie der linearen Antwort. Daher spielen ausschließlich Phänomene eine Rolle, welche im Zeitbereich der äußeren Störung liegen. So können bei einem Gas zum Beispiel drei Zeitbereiche voneinander abgegrenzt werden (Abb. 5.1). Der feinste Bereich ist durch die Stoßdauer auf molekularer Ebene bestimmt, der der *Schrödinger-Gleichung* gehorcht. Die mittlere freie Flugzeit der Teilchen bestimmt den kinetischen Bereich, welcher der *Boltzmann-Gleichung* gehorcht. Hier wird die Zeitkonstante wichtig, die zur Einstellung des lokalen Gleichgewichts erforderlich ist. Dies ist die Ebene der *hydrodynamischen Gleichungen*, die den Ablauf makroskopischer Prozesse bestimmt. Der Übergang von der molekularen zur kinetischen Ebene bringt irreversible Terme mit sich, da hier in Folge der Vergrößerung Informationen über die Korrelationen der Teilchen verloren gehen. Dies ergibt sich aus dem Boltzmannschen H-Theorem, das im Wesentlichen dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik entspricht. So ist die Boltzmann-Gleichung der kinetischen Theorie eine Master-Gleichung, denn Master-Gleichungen beschreiben das irreversible Verhalten von Systemen.

Der Abschnitt 5.2 beschreibt den Übergang von den reinen Zuständen zur Quantenstatistik gemischter Zustände. Hier wird der Dichteoperator eingeführt, aber auch seine Entsprechung im Phasenraum, die später als Wigner-Funktion bezeichnet wird. Im klassischen Grenzfall ist diese nichts anderes als die klassische Verteilungsdichtefunktion des Teilchensystems.

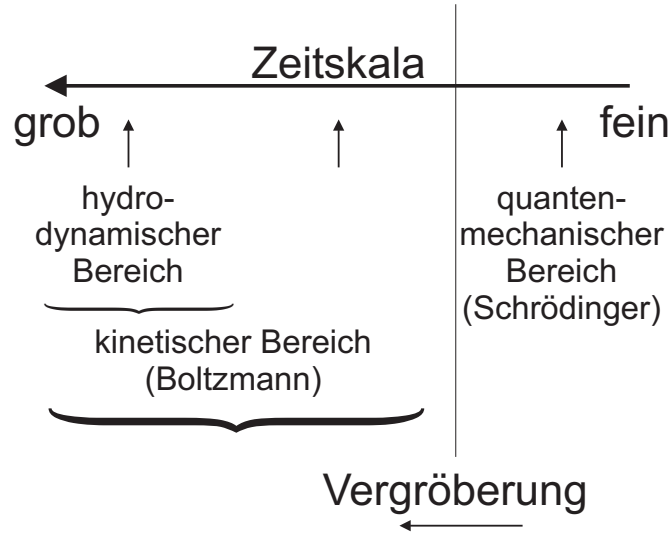


Abbildung 5.1: Zeitskala verschiedener Transportmodelle

Der Formalismus der Dichtematrizen ist Thema des Abschnitts 5.3. Er gehört zu den kinetischen Theorien, die dann in Abschnitt 5.4 vor allem in ihrem Bezug zur hydrodynamischen Näherung dargelegt werden.

5.2 Gemischte Zustände, Quantenstatistik

Reine Zustände werden durch eine Schrödinger-Gleichung beschrieben. Es ist also naheliegend, ein System von Teilchen als Summe der Einzelzustände darzustellen. Da es aber unerheblich ist, welches Teilchen welchen Zustand besetzt, enthält die Summe der Einzelzustände zu viel Information. Deshalb ist eine andere Darstellung günstiger, die Beschreibung relativer Häufigkeiten möglicher Zustände, das heißt eine statistische Betrachtungsweise. Hilfreich ist an dieser Stelle der Begriff des *Ensembles* [29]. Ein Ensemble ist eine Gesamtheit schwach wechselwirkender Einzelsysteme. Bei starker Wechselwirkung kann von einem *virtuellen* Ensemble gesprochen werden, falls die Einzelsysteme durch die gleiche Hamilton-Funktion dargestellt werden können. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Einzelsystem im Zustand $|\psi\rangle$ befindet, ist $w_{|\psi\rangle}$. Um die physikalische Bedeutung eines Operators \hat{L} ausdrücken zu können, führt man den *Ensemblemittelwert* einer Observablen ein, der sich aus einer zweifachen Mittelung ergibt. Es wird zunächst der quantentheoretische Erwartungswert gebildet und dann eine Mittelung mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsverteilung durchgeführt. Damit folgt der Ensemblemittelwert

$$\langle \hat{L} \rangle = \sum_{|\psi\rangle} w_{|\psi\rangle} \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle. \quad (5.1)$$

Der Dichteoperator $\hat{\rho}$ wird durch

$$\hat{\rho} = \sum_{|\psi\rangle} w_{|\psi\rangle} |\psi\rangle \langle \psi| \quad (5.2)$$

definiert, so dass der Ensemblemittelwert ($\text{Sp} = \text{Spur}$)

$$\langle \hat{L} \rangle = \text{Sp}\{\hat{\rho}\hat{L}\} \quad (5.3)$$

ergibt.

Der Dichteoperator hat folgende Eigenschaften:

1. Hermitezität: $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$
2. $\langle \chi | \hat{\rho} | \chi \rangle \geq 0$
3. $\text{Sp}\{\hat{\rho}\} = 1$.

Das zeitliche Verhalten des Dichteoperators kann aus der Schrödinger-Gleichung hergeleitet werden. Es wird durch die *von Neumannsche Differenzialgleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \equiv \hat{\mathcal{L}} \hat{\rho} \quad (5.4)$$

beschrieben, die auch als *Liouville-Gleichung* bekannt ist, da $\hat{\mathcal{L}}$ den Liouville-Superoperator darstellt. In dieser Form ist die Gleichung wie eine Schrödinger-Gleichung aufgebaut und beschreibt den gemischten Zustand. Dem Hamilton-Operator entspricht hier der Liouville-Operator. Mit den gefundenen Ergebnissen lässt sich eine Bewegungsgleichung für beliebige Observablen herleiten. Sie lautet

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{L} \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{\rho} [\hat{L}, \hat{H}] \right\}. \quad (5.5)$$

Ein kanonisches Ensemble [29] im Gleichgewicht hat den Dichteoperator

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Sp}\{e^{-\beta \hat{H}}\}} \quad (5.6)$$

mit $\beta = (k_B T)^{-1}$, so dass sich daraus der Erwartungswert eines Operators zu

$$\langle \hat{L} \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{L} \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Sp}\{e^{-\beta \hat{H}}\}} \right\} \quad (5.7)$$

ergibt. Die zugehörige Matrix entwickelt Wigner [30] zu seiner Quantenkorrektur (siehe auch Abschnitt 6.1). Der Dichteoperator (5.6) erfüllt die Bloch-Gleichung

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \beta} = -\hat{H} \hat{\rho} \quad (5.8)$$

und gilt für die Maxwell-Boltzmann-Statistik.

In der Ortsdarstellung wird die Liouville-Gleichung (5.4) mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (5.9)$$

zu [31]

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_2^2} \right) \hat{\rho}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + (V(\vec{r}_1) - V(\vec{r}_2)) \hat{\rho}(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (5.10)$$

In folgenden Kapiteln wird von dem hier eingeführten Dichteoperator als Dichtematrix C die Rede sein, die der Bewegungsgleichung (5.10) gehorcht. Sie wird in Kapitel 9 ausführlich behandelt und beispielhaft gelöst.

Über die Wigner-Weyl-Transformation lässt sich diese Bewegungsgleichung auch im klassischen Phasenraum ausdrücken. Diese Transformation gehorcht in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten (siehe Anhang A.1) der Vorschrift

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = \int \tilde{\rho}(\vec{r}, \vec{r}') e^{i\vec{p}\vec{r}'/\hbar} d\vec{r}'. \quad (5.11)$$

Damit folgt aus der Liouville-Gleichung die Bewegungsgleichung im Phasenraum:

$$\dot{f} + \frac{\vec{p}}{m} \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int V(\vec{r}, \vec{p} - \vec{p}') f(\vec{r}, \vec{p}') d\vec{p}' = 0 \quad (5.12)$$

($\dot{f} = \partial f / \partial t$) mit dem Integralkern

$$V(\vec{r}, \vec{p}) = 2 \int_0^\infty \sin(\vec{p}\vec{r}'/\hbar) (V(\vec{r}_1) - V(\vec{r}_2)) d\vec{r}'. \quad (5.13)$$

5.3 Der Dichtematrix-Formalismus

Die Elektrodynamik von Halbleitern wird nach Stahl [32] durch den Dichtematrix-Formalismus beschrieben. Ein kurzer Überblick über die Klassifizierung in Inter- und Intraband-Prozesse soll hier gegeben werden. Es schließen sich die entsprechenden Dichtematrix-Gleichungen an, von denen letztlich aber nur die Elektronendichtematrix genutzt wird. Intraband-Prozesse sind der Ladungsträgertransport innerhalb zum Beispiel des Leitungsbandes oder des Valenzbandes. Interband-Prozesse dagegen beschreiben die Erzeugung und Vernichtung von Elektron-Loch-Paaren, also die Anregung von Ladungsträgern. Für einen einheitlichen Formalismus ist es daher sinnvoll, eine Herleitung über die zweite Quantisierung, d.h. mithilfe von Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren, zu beginnen. Der Übergang von einem Zwei-Niveau-System zu einem Zwei-Band-System (Leitungsband, Valenzband) ergibt die Dichtematrixgleichungen [32].

Beim Dichtematrix-Formalismus handelt es sich um eine kinetische Theorie, die wie die klassische Boltzmann-Gleichung im 6-dimensionalen Raum definiert ist. Es ist möglich, direkt Bewegungsgleichungen für das elektronische und das optische Verhalten eines Halbleiters in der Nähe der Bandkante zu berechnen. Aus den Dichtematrizen sind alle makroskopischen Erwartungswerte wie Teilchendichten n , Teilchenströme j und die optische Polarisation P abzulesen [32]. Weiter können nichtlineare und transiente sowie auch weit vom thermodynamischen Gleichgewicht entfernte Effekte beschrieben werden.

Zuerst folgt ein kurzer Überblick über die Bedeutung und Herleitung der Dichtematrix. Typischerweise wird hierbei von ruhenden Atomkernen ausgegangen, die Gitterschwingungen der Kerne werden bei Bedarf durch Phononen im effektiven parabolischen Potenzial der Kerne modelliert. Die Streuprozesse, die eine Rückkehr ins thermodynamische Gleichgewicht bewirken, können mit einem einfachen phänomenologischen Relaxationszeitansatz

beschrieben werden.

Reine Zustände werden in der Quantenmechanik mit der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (5.14)$$

für die Wellenfunktion ψ und den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla + V \quad (5.15)$$

bestimmt. Physikalisch relevant sind nur die Erwartungswerte, z.B. für die Ladungsträgerdichte

$$n = \sum_k |\psi_k|^2. \quad (5.16)$$

Summiert wird über alle Zustände k . Die Phase hat keine physikalische Bedeutung. Die zweite Quantisierung liefert die Dichtematrix, die anschaulich einer komplexen Autokorrelationsfunktion entspricht:

$$C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_{12} = \sum_k |\psi_k(\vec{r}_1)\rangle \langle \psi_k(\vec{r}_2)|. \quad (5.17)$$

Die Hauptdiagonale der Dichtematrix enthält den Erwartungswert der Teilchendichte $n = C(\vec{r}, \vec{r})$ (siehe Gleichung (5.16)) und ist somit rein reell, die Nebendiagonalen geben die quantenmechanische Wechselwirkung zwischen den Orten \vec{r}_1 und \vec{r}_2 an. Die Phase der Dichtematrix hat somit im Gegensatz zur Wellenfunktion ψ eine physikalische Bedeutung. Wie später gezeigt wird, ist der Realteil mit der Teilchendichte und der Imaginärteil mit dem Strom verknüpft. C muss aus Symmetriegründen hermitesch sein, d.h.:

$$C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C(\vec{r}_2, \vec{r}_1)^*. \quad (5.18)$$

Die Herleitung der Bewegungsgleichungen erfolgt mit Methoden der zweiten Quantisierung [32]. Hier wird nur kurz auf die wichtigsten Gleichungen eingegangen, die nötig sind, um ausgehend von dem kompletten Dichtematrixmodell in RPA-Näherung (random phase approximation) ein wesentlich vereinfachtes Modell zu entwickeln. Zur übersichtlichen Darstellung wird die Kurzschreibweise $Y_{12} = Y(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ benutzt:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \Gamma_{cv} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}_{cv} \right) Y_{12} + \frac{i}{\hbar} X_Y = \frac{i}{\hbar} M_{12} \left(\delta_{B12} \vec{E}_2 - \vec{E}_1 C_{12} - \vec{E}_2 D_{21} \right) \quad (5.19)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}_{cc} \right) C_{12} + \Gamma_{cc} (C_{12} - C_{12}^0) + \frac{i}{\hbar} X_C = -\frac{i}{\hbar} M_{12} \left(\vec{E}_1 Y_{12} - \vec{E}_2 Y_{21}^* \right) \quad (5.20)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}_{vv} \right) D_{12} + \Gamma_{vv} (D_{12} - D_{12}^0) + \frac{i}{\hbar} X_D = -\frac{i}{\hbar} M_{12} \left(\vec{E}_1 Y_{12} - \vec{E}_2 Y_{21}^* \right). \quad (5.21)$$

Y ist die Exzitonendichtematrix, C und D sind jeweils die Elektronen- und Löcherdichtematrizen. C^0 und D^0 sind die Dichtematrizen im thermodynamischen Gleichgewicht. Die Dichtematrix für Exzitonen verschwindet im Gleichgewicht, da das elektrische Feld \vec{E} als klassisch angenommen wurde und somit nur kohärente Wechselwirkungen erfasst werden. Es werden folglich keine spontanen Übergänge beschrieben. Die Konstanten Γ_i werden

eingeführt, um Verluste durch Streuprozesse zu beschreiben. Γ entspricht dem reziproken Wert einer Zeitkonstanten $\tau = 1/\Gamma$. M_{12} ist das Dipolmatrixelement, das die Auswahlregeln und die Bandstrukturdetails auf atomarer Größe enthält. Es handelt sich hier um einen Tensor, der den Vektor des elektrischen Feldes auf die skalaren Dichtematrixgleichungen abbildet. δ_{B12} ist die bandlimitierte Delta-Funktion, die nicht einheitenlos ist [32]. Die Hamiltonoperatoren \hat{H}_i sind zur besseren Übersicht für je ein Elektronen- und Lochband und für parabolische Bänder angegeben:

$$\hat{H}_{cv} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h}\nabla_2^2 + V_e(\vec{r}_1) - V_h(\vec{r}_2) + V_{eh}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (5.22a)$$

$$\hat{H}_{cc} = \frac{\hbar^2}{2m_e}(\nabla_1^2 - \nabla_2^2) - V_e(\vec{r}_1) + V_e(\vec{r}_2), \quad (5.22b)$$

$$\hat{H}_{vv} = \frac{\hbar^2}{2m_h}(\nabla_1^2 - \nabla_2^2) + V_h(\vec{r}_1) - V_h(\vec{r}_2). \quad (5.22c)$$

V_e und V_h sind die Bandkantenenergien für Elektronen und Löcher. V_{eh} ist das Elektron-Loch-Wechselwirkungspotenzial, das für Wannier-Exzitonen mit dem dielektrisch abgeschirmten Coulomb-Potenzial beschrieben werden kann:

$$V_{eh}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (5.23)$$

Die Austauschsterme X_Y , X_C und X_D für Exzitonen, Elektronen und Löcher resultieren aus den Fock-Anteilen der Hartree-Fock-Entkopplung und beschreiben die Sättigung der jeweiligen Übergänge. Bei Berücksichtigung der Austauschsterme wird z.B. (5.19) zu einer Integro-Differenzialgleichung, was den Lösungsweg deutlich aufwändiger werden lässt. Gleichung (5.19) ist zur Beschreibung exzitonischer Prozesse zum Beispiel in Modulatoren wichtig, wird hier aber vernachlässigt. Für die hier betrachtete Transporttheorie sind die Gleichungen (5.20) und (5.21) interessant, die folgenden Abschnitte gehen vor allem auf die Elektronendichtematrix ein.

5.4 Kinetische Theorien

Transportprozesse lassen sich u.a. durch kinetische Theorien beschreiben. Dies sind Theorien, die auf dem Formalismus der Dichtematrizen aufbauen, aber auch durch Verteilungsdichtefunktionen beschriebene Ansätze. Typisch ist die Nutzung eines 6-dimensionalen Hyperraumes, welcher entweder durch Ort \vec{r} und Wellenvektor \vec{k} oder durch Schwerpunkts- \vec{r} und Relativkoordinaten \vec{r}' aufgespannt wird.

Zunächst wird die Dichtematrix C betrachtet:

$$C = C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \tilde{C}(\vec{r}, \vec{r}') = \tilde{C}' + i\tilde{C}''. \quad (5.24)$$

Dabei ist die Dichtematrix \tilde{C} im Relativraum, mit der Schwerpunktkoordinate \vec{r} und der Relativkoordinate \vec{r}' entsprechend

$$\begin{aligned} \vec{r} &= (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2 & \text{und} \\ \vec{r}' &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \end{aligned} \quad (5.25)$$

definiert (weitere Informationen zu Relativkoordinaten siehe Anhang A.1). Natürlich ist auch eine Zeitabhängigkeit vorhanden, sie wird hier aber zur besseren Übersicht nicht angegeben. Die Aufteilung in Imaginär- und Realteil entspricht einer Unterteilung in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil. Der Realteil ist symmetrisch bezüglich \vec{r}' , der Imaginärteil ist antisymmetrisch bezüglich \vec{r}' .

Die Verteilungsdichtefunktion f (im quantenmechanischen Fall die Wigner-Funktion f_W , vgl. Abschnitt 6.1) dagegen existiert im Phasenraum

$$f = f(\vec{r}, \vec{k}). \quad (5.26)$$

Beide Beschreibungsformen sind gleichwertig und über eine Fouriertransformation miteinander verknüpft. Soweit ist man sich in der Literatur einig; das genaue Aussehen dieser Transformation dagegen wird sehr unterschiedlich angegeben. Das hat in erster Linie damit zu tun, dass das quantenmechanische Pendant zur Verteilungsdichte, die Wigner-Funktion, nicht eindeutig definiert ist. Näheres ist in der Herleitung des quantenhydrodynamischen Modelles (Kap. 6) zu finden.

Stahl [32] definiert diese Transformation zu

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = \int \tilde{C}(\vec{r}, \vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} d^3r', \quad (5.27)$$

sie wird auch Wigner-Transformation genannt. Die Information, die in der Relativkoordinate steckt, wird dadurch im Phasenraum beschrieben. Die entsprechende Rücktransformation lautet demnach

$$\tilde{C}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int f(\vec{r}, \vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}'} d^3k. \quad (5.28)$$

Elektromagnetische Größen lassen sich nun durch die Diagonalelemente der Dichtematrix oder durch die Integration der Verteilungsdichte über \vec{k} bestimmen. Das dynamische Problem wird also zunächst voll quantenmechanisch gelöst und anschließend auf die Diagonale projiziert. Mit dieser Projektion geht der Anteil verloren, der die quantenmechanischen Eigenschaften repräsentiert. Allerdings kann bei klassischen Problemen in guter Näherung auch vor der Lösung der Dichtematrixgleichung eine Projektion auf die Diagonale vorgenommen werden. Dies ist die hydrodynamische Näherung und entspricht der Momentenmethode im \vec{k} -Raum (Abschnitt 6.2). Die Lösung des dynamischen Problems erfolgt dann erst nach der Projektion. So werden von vornherein Informationen ausgeblendet, die für ein klassisches Problem nicht relevant sind, um dieses zu vereinfachen. *Inwieweit eine hydrodynamische Näherung durch Korrekturterme erweitert werden muss, um praktisch relevante quantenmechanische Effekte zu modellieren, ist eine der Kernfragen dieser Arbeit.*

Die Hydrodynamik kann als die Dynamik des lokalen Gleichgewichts aufgefasst werden [29]. Im globalen Gleichgewicht lässt sich das System durch Mittelwerte von Energie und Impuls beschreiben. Es wird durch eine Maxwell-Verteilung bestimmt. Im lokalen Gleichgewicht dagegen ersetzt man in der Verteilungsfunktion die Mittelwerte durch ortsabhängige Größen, die als langsam veränderlich in Raum und Zeit angenommen werden (s. Kap. 7). Das System wird dann durch eine lokale Maxwell-Verteilung, auch Maxwell-Boltzmann-Verteilung genannt, bestimmt. Das ist dann eine adäquate Beschreibung, wenn

keine zeitlichen Änderungen rascher als die Relaxationsvorgänge stattfinden. Außerdem dürfen sich die Mittelwerte über die Distanz der mittleren freien Weglänge nicht wesentlich ändern. Ein Fermionen-System, wie zum Beispiel Elektronen im Leitungsband, gehorchen einem ähnlichen Prinzip, die Boltzmann-Verteilung weicht allerdings einer Fermi-Verteilung. Dies ändert jedoch nichts am Prinzip des lokalen Gleichgewichts. Jeder Ort bekommt praktisch eine eigene Verteilungsdichte, was eine ausreichende Zahl an Freiheitsgraden bietet.

Die Herleitung des hydrodynamischen Modells setzt zunächst keinerlei Wissen über die Verteilungsdichte voraus. Die Gleichungen einer bestimmten Hierarchiestufe enthalten jedoch Terme der nächsthöheren Stufe. Um die Gleichungshierarchie abubrechen, muss eine Möglichkeit gefunden werden, den entsprechenden Term zu nähern. Im lokalen Gleichgewicht wird dieser Term automatisch wegfallen, weshalb ein System hydrodynamischer Gleichungen aus der Annahme des lokalen Gleichgewichts entsteht. Wegen der geraden Symmetrie der Verteilung (Kap. 7) wird aber auch die Wärmestromdichte verschwinden, so dass zur Beschreibung eines Wärmestroms dieses Modell nicht ausreicht.

Deshalb ist eine Nichtgleichgewichtsverteilung höherer Ordnung notwendig, da in realen Bauelementen Wärmegradienten eine wichtige Rolle spielen. Andernfalls ist es nicht möglich, thermische Diffusionsprozesse zu erfassen. Kleinere Abweichungen vom lokalen Gleichgewicht, die sich durch einen Relaxationszeitansatz beschreiben lassen, sind zugelassen. Eine erste Iteration ins Ungleichgewicht gibt die Möglichkeit, den Wärmestrom einzubeziehen. Dieser wird dann zum Beispiel als rein thermischer Wärmestrom angenommen (ein Wärmeffluss durch Dichtegradienten wird vernachlässigt). Auf diese Weise kann die Hydrodynamik eines Systems um dieses sehr wichtige Element erweitert werden und liefert ein geeignetes Instrument, Transportphänomene in Halbleitern zu untersuchen. Da die Gleichungen des hydrodynamischen Modells als solche keinerlei Annahmen für die Verteilungsfunktion benötigen, muss aber davon ausgegangen werden, dass Terme in den unteren Stufen enthalten sind, die nicht dem lokalen Gleichgewicht entsprechen. Daher stellt sich die Frage nach der Näherungskonsistenz der Gleichungen. Die Vernachlässigung einiger Terme (Abschnitt 8.2.2) in den Implementierungsgleichungen lässt sich direkt aus der vorangestellten Argumentation begründen. Darüber gibt Kapitel 7 detailliert Auskunft.

Zunächst sollen hier einige physikalische Größen über Verteilungsfunktion und Dichtematrix definiert werden. Spineffekte sind in den folgenden Formeln nicht enthalten, weshalb noch ein Faktor 2 fehlt.

Die Teilchendichte n ergibt sich zum einen aus den Diagonalelementen der Dichtematrix. Andererseits lässt sie sich auch als Produkt von Besetzungswahrscheinlichkeit und Zustandsdichte definieren. Beides führt in Konsistenz mit der Wigner-Transformation (5.27) zu

$$\begin{aligned} n(\vec{r}) &= C(\vec{r}, \vec{r}) = \tilde{C}(\vec{r}, 0) = \tilde{C}'(\vec{r}, 0) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int f(\vec{r}, \vec{k}) d^3k. \end{aligned} \tag{5.29}$$

Die Teilchenstromdichte \vec{j} wird definiert als

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{r}) &= \frac{i\hbar}{2m}(\nabla_1 - \nabla_2)C(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Big|_{\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}} \\ &= \frac{i\hbar}{m}\nabla_{\vec{r}'}\tilde{C}(\vec{r}, \vec{r}')\Big|_{\vec{r}'=0} = -\frac{\hbar}{m}\nabla_{\vec{r}'}\tilde{C}''(\vec{r}, \vec{r}')\Big|_{\vec{r}'=0} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{\hbar\vec{k}}{m}f(\vec{r}, \vec{k})d^3k.\end{aligned}\quad (5.30)$$

Der Realteil der Dichtematrix steht demnach für die Teilchendichte, der Imaginärteil dagegen für die Teilchenstromdichte.

Der Erwartungswert der Energiedichte ist

$$\begin{aligned}W(\vec{r}) &= -\frac{\hbar^2}{8m}(\nabla_1 - \nabla_2)^2C(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Big|_{\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\vec{r}'}^2\tilde{C}(\vec{r}, \vec{r}')\Big|_{\vec{r}'=0} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\vec{r}'}^2\tilde{C}'(\vec{r}, \vec{r}')\Big|_{\vec{r}'=0} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{\hbar^2k^2}{2m}f(\vec{r}, \vec{k})d^3k.\end{aligned}\quad (5.31)$$

Da es hier um Elektronen geht, ist es sinnvoll, die Raumladungsträgerdichte ϱ und die elektrische Stromdichte \vec{J} anzugeben:

$$\varrho = -en, \quad (5.32)$$

$$\vec{J} = -e\vec{j}. \quad (5.33)$$

Aus den Gleichungen (5.29)-(5.31) ist zu erkennen, dass der Momentenmethode (Näheres in Abschnitt 5.4.1) eine Ableitung nach der Relativkoordinate der Dichtematrix entspricht. So können die kinetischen Erhaltungsgleichungen neben der Momentenmethode auch aus der entsprechenden Ableitung der Intrabandgleichung hergeleitet werden.

Ausgangspunkt der folgenden Überlegungen sind die jeweiligen Transportgleichungen. Die Intrabandgleichung [32] für Elektronen lautet mit $C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_{12}$:

$$\dot{C}_{12} + i\Omega C_{12} = -\frac{i}{\hbar}\vec{M}_0(\vec{E}_1 Y_{12} - \vec{E}_2 Y_{21}^*) + X \quad (5.34)$$

$$\text{mit} \quad \Omega = \frac{\hbar}{2m}(\nabla_1^2 - \nabla_2^2) + \frac{e}{\hbar}(\Psi_1 - \Psi_2). \quad (5.35)$$

Hier ist Y_{12} die Interbanddichtematrix, X ist ein Austauschterm, der für höhere Zustände relevant wird, und M_0 ist das Dipolmatrixelement. Der Austauschterm steht dabei für den Fock-Term der Hartree-Fock-Näherung. \vec{E} ist das elektrische Feld und Ψ das elektrostatische Potenzial. Für die weiteren Betrachtungen werden alle Quellterme und irreversiblen Prozesse vernachlässigt (Umrechnung in Relativkoordinaten s. Anhang A.1):

$$\dot{C} + i\left[\frac{\hbar}{2m}(\nabla_1^2 - \nabla_2^2) + \frac{e}{\hbar}(\Psi(\vec{r}_1) - \Psi(\vec{r}_2))\right]C = 0 \quad \text{bzw.} \quad (5.36)$$

$$\dot{\tilde{C}} + i\frac{\hbar}{m}\nabla_{\vec{r}}\nabla_{\vec{r}'}\tilde{C} + i\frac{e}{\hbar}\left[\Psi\left(\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{r}'\right) - \Psi\left(\vec{r} - \frac{1}{2}\vec{r}'\right)\right]\tilde{C} = 0. \quad (5.37)$$

Die Potenzialdifferenz wird in eine Taylorreihe entwickelt, so dass mit $V = -e\Psi$

$$V\left(\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{r}'\right) - V\left(\vec{r} - \frac{1}{2}\vec{r}'\right) = \sum_l \frac{1}{l!} (1 - (-1)^l) \left(\frac{\vec{r}'}{2} \nabla_{\vec{r}}\right)^l V(\vec{r}) \quad (5.38)$$

wird. Für gerade l werden die Summanden Null.

Dieser nichtlokale Potenzialterm enthält Informationen über quantentheoretische Interferenzeffekte. Die Entwicklung der Potenzialdifferenz entspricht daher einer Entwicklung in quantenmechanische Effekte, der Term niedrigster Ordnung repräsentiert einen klassischen Term. Der zweite nicht verschwindende Term ($l = 3$) ergibt die Korrektur

$$\tilde{Q}_3 = -\frac{i}{24\hbar} \left[(\vec{r}' \nabla_{\vec{r}})^3 V(\vec{r}) \right] \tilde{C}, \quad (5.39)$$

die sich in den Phasenraum zu

$$Q_3 = \frac{\hbar^2}{24} \nabla_{\vec{r}}^3 V(\vec{r}) \nabla_{\vec{p}}^3 f(\vec{r}, \vec{p}) \quad (5.40)$$

transformieren lässt. Hier bleibt ein Vorfaktor \hbar^2 bestehen, der sich nicht in klassische Variablen umschreiben lässt. Deshalb ist dieser Term, wie erwartet, eine quantenmechanische Korrektur.

Der klassische Fall kann also durch $l = 1$ angegeben werden. Damit wird die klassische Bewegungsgleichung:

$$\dot{\tilde{C}} + i \frac{\hbar}{m} \nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{r}'} \tilde{C} - \frac{i}{\hbar} \vec{r}' \nabla_{\vec{r}} V(\vec{r}) \tilde{C} = 0. \quad (5.41)$$

Durch die Wigner-Transformation wird diese Gleichung zur Boltzmann-Transportgleichung ($\vec{p} = \hbar \vec{k}$)

$$\dot{f} + \frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f - \frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f = 0 \quad (5.42)$$

ohne Kollisionsterme. Dies bestätigt die Annahme, dass der erste Term der Potenzialentwicklung ein klassischer Term ist.

Im Folgenden werden kurz die hydrodynamischen Gleichungen aus der Momentenmethode und aus dem Dichtematrixformalismus entwickelt. Auf die Momentenmethode wird im Kap. 6 für die Entwicklung des quantenhydrodynamischen Problems noch näher eingegangen.

5.4.1 Das hydrodynamische Modell in der Momentenentwicklung

Ausgangspunkt der Momentenmethode ist die Boltzmann-Gleichung (5.42). Zunächst soll hier ein alternativer Zugang zu dieser Gleichung angegeben werden.

Der Ensemblebegriff ist aus Abschnitt 5.2 schon bekannt. Dieses Ensemble ist ein inkompressibel strömendes Medium, dessen Dichte für einen „mitbewegten“ Beobachter nicht variiert. Sie bleibt entlang einer Teilchentrajektorie im Phasenraum bezüglich der Zeit konstant. Dies ist als Theorem von Liouville [33] bekannt und lässt sich

$$\frac{d}{dt} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad (5.43)$$

schreiben. Hieraus ergibt sich dann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} \nabla_{\vec{p}} f + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \nabla_{\vec{r}} f = 0. \quad (5.44)$$

Die zeitliche Ableitung des Impulses ist die Summe der einwirkenden Kräfte, die sich hier nur aus einem äußeren E -Feld und inneren Kollisionen \vec{F}_i zusammensetzen soll. Dies führt auf eine der Gleichung (6.6) ähnliche Form im klassischen Grenzfall:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{p}} f + \frac{\vec{p}}{m} \nabla_{\vec{r}} f = -\vec{F}_i \nabla_{\vec{p}} f = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.}. \quad (5.45)$$

Die Momentenmethode erhält ihren Namen aus der Bildung von Erwartungswerten, den Momenten physikalischer Größen. Diese Erwartungswerte ergeben sich aus der Integration einer Größe, die mit der Verteilungsdichte f gewichtet ist. Daraus lässt sich ein Verfahren ableiten, in dem die Boltzmann-Transport-Gleichung mit Potenzen von \vec{p} multipliziert und über alle \vec{p} integriert wird.

Hinter dieser Überlegung stecken die Gleichungen (5.29) bis (5.31), die zeigen, dass wichtige physikalische Größen, wie die Teilchendichte, die Stromdichte und die Energiedichte, wie angedeutet von Potenzen des Impulses, den „Stoßinvarianten“, bestimmt sind. Mit der Verallgemeinerung dieser Potenzen in einer Funktion $\chi(\vec{p})$ ist der Ansatz für die Momentenmethode in eindimensionaler Darstellung:

$$\frac{\partial \langle \chi \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left\langle \frac{p}{m} \chi \right\rangle - \frac{\partial V}{\partial x} \left\langle \frac{\partial \chi}{\partial p} \right\rangle = - \left\langle \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right)_{coll.} \right\rangle. \quad (5.46)$$

Näheres zur Herleitung kann in Abschnitt 6.2 nachgelesen werden.

Es muss angemerkt werden, dass dieser Ansatz für jede Momentengleichung einen neuen Streuterm erlaubt. Für einen Relaxationszeitansatz bedeutet dies eine eigene Relaxationszeit für die jeweils gesuchte Größe.

Die ersten drei Momentengleichungen entsprechen denen des quantenhydrodynamischen Modells (6.15) bis (6.17). Das erste Moment ist die Kontinuitätsgleichung, das zweite eine Erhaltungsgleichung für den Strom und das dritte Moment zeigt die Energiebilanz.

Das bekannte Drift-Diffusions-Modell lässt sich als Spezialfall des hydrodynamischen Modells verstehen. Es werden dazu nur konstante Temperaturen betrachtet, weiterhin ist ein Relaxationszeitansatz vorausgesetzt. Die partielle zeitliche Ableitung fällt weg, da eine zeitlich langsam veränderliche Verteilungsdichte angesetzt wird. Hinzu kommt die Forderung nach einer kleinen Störung des Gleichgewichts, so dass nur die lineare Antwort des Systems in Betracht gezogen wird. All dies sind sehr strikte Bedingungen, die den Anforderungen in Quantenbauelementen bei weitem nicht genügen.

Das Drift-Diffusions-Modells besteht aus der Poisson-Gleichung (4.10) und den Kontinuitätsgleichungen (4.12) und (4.12). Für die Ladungsträger gelten weiterhin die Bedingungen aus Abschnitt 4.4. Die Stromdichte setzt sich aus den beiden Anteilen Drift- und Diffusionsstrom nach

$$\vec{J}_e = en\mu_e \vec{E} + eD_e \nabla n \quad \text{und} \quad (5.47)$$

$$\vec{J}_h = ep\mu_h \vec{E} - eD_n \nabla p, \quad (5.48)$$

mit der Beweglichkeit μ und der Diffusionskonstanten D , zusammen.

5.4.2 Das hydrodynamische Modell im Dichtematrixformalismus

Das hydrodynamische Modell soll nun aus dem Dichtematrixformalismus hergeleitet werden. Wie angedeutet wird dabei eine Projektion auf die Diagonale der Dichtematrix vorgenommen. Zusätzlich muss die Transportgleichung Schritt für Schritt abgeleitet werden [32].

Die erste Erhaltungsgleichung ergibt sich direkt aus den Diagonalelementen der Gleichung (5.36). Mit $\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r}$ bzw. $\vec{r}' = 0$ wird daraus die Kontinuitätsgleichung, d.h. die Erhaltung der Teilchenzahl:

$$\dot{n} + \nabla_{\vec{r}} \cdot \vec{j} = 0 \quad \text{bzw.} \quad (5.49)$$

$$\dot{\rho} + \nabla_{\vec{r}} \cdot \vec{J} = 0. \quad (5.50)$$

Die anschließende Anwendung von $-ie\hbar/(2m)(\nabla_1 - \nabla_2)$ auf die Transportgleichung und erneute Projektion auf die Diagonale führt zu

$$\dot{\vec{J}} + \frac{e\hbar^2}{4m^2}(\nabla_1 + \nabla_2) \cdot (\nabla_1 - \nabla_2) \otimes (\nabla_1 - \nabla_2) C \Big|_{\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}} = \frac{e}{m} \varrho \nabla_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}) = \frac{en}{m} \nabla_{\vec{r}} V(\vec{r}). \quad (5.51)$$

Hier ist \otimes das dyadische Produkt und \vec{E} das elektrische Feld. Interessant ist insbesondere der zweite Summand, der hier noch nicht auf die Diagonale projiziert dargestellt ist. In Kurzform wird diese Gleichung zu

$$\dot{\vec{J}} + \nabla_{\vec{r}} \cdot [\Sigma] = \frac{en}{m} \nabla_{\vec{r}} V(\vec{r}) \quad (5.52)$$

mit dem Tensor

$$\Sigma_{ij} = \frac{e\hbar^2}{4m^2} \left(\frac{\partial}{\partial r_{1i}} - \frac{\partial}{\partial r_{2i}} \right) \left(\frac{\partial}{\partial r_{1j}} - \frac{\partial}{\partial r_{2j}} \right) C_{12} \Big|_{\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}}. \quad (5.53)$$

Eine typische Näherung für das hydrodynamische Modell ist die getrennte Projektion der Ableitungen und der Dichtematrix zu

$$\nabla_{\vec{r}} \cdot [\Sigma] = b \nabla_{\vec{r}} n. \quad (5.54)$$

Damit ergibt sich

$$\dot{\vec{J}} + b \nabla_{\vec{r}} n = \frac{en}{m} \nabla_{\vec{r}} V(\vec{r}). \quad (5.55)$$

Der Form nach haben wir hier wieder einen Drift- und einen Diffusionsterm vorliegen, beide diesmal aus dem Dichtematrix-Formalismus hergeleitet.

5.5 Zusammenfassung

In diesem noch recht theoretischen Kapitel wurde ein kompakter Überblick über die Transporttheorie gegeben. Dabei musste zunächst die statistische Beschreibung gemischter Zustände eingeführt werden, bevor damit zwei wichtige Zugänge zu den Transportphänomenen, die Dichtematrix und die Verteilungsfunktion im Phasenraum, definiert werden konnten. Mit diesen ist es nun möglich, durch kinetische Verfahren klassische physikalische Größen zu beschreiben. Ein vereinfachtes Modell ist dabei das hydrodynamische Modell. Es wird Grundlage der folgenden Betrachtungen werden, die zum quantenhydrodynamischen Modell führen.

6 Das quantenhydrodynamische Modell

Überblick: *Das quantenhydrodynamische (QHD) Modell entsteht aus der Anwendung der Momentenmethode auf die Wigner-Funktion. Dabei werden Näherungen für die entstehenden Quantenkorrekturen angenommen, die die Taylor-Entwicklung des klassischen Potentials voraussetzen. Da diese an Heteroübergängen aber nicht konvergiert, muss ein modifizierter Ansatz gefunden werden, welcher mit gemittelten Quantenpotenzialen arbeitet.*

Quanteneffekte können durch hydrodynamische Gleichungen beschrieben werden, die durch Korrekturterme verändert sind. Das klassische hydrodynamische Modell reicht dazu nicht aus. Um einen effizienten Algorithmus zur Berechnung der Transportgrößen zu erhalten, wird versucht, in die klassischen Gleichungen des hydrodynamischen Modells Korrekturterme einzubauen, die das Verhalten der Ladungsträger in kleinsten Strukturen beschreiben. In der hydrodynamischen Näherung liegen schon die Ausgangsgleichungen in der klassischen Näherung vor, was quantenmechanische Effekte zunächst ausschließt. Dieser einfache Ansatz soll allerdings nicht völlig aufgegeben werden, da er auf einen gut lösbaren Gleichungssatz führt. So berücksichtigt eine Taylor-Entwicklung der Wigner-Funktion, deren erster nicht verschwindender Korrekturterm als Korrektur der klassischen Gleichungen fungiert, die quantenmechanischen Eigenschaften. Dieses Verfahren gilt nahe des thermischen Gleichgewichts und für höhere Temperaturen. Es hat sich durchgesetzt, die Korrekturen als Beitrag zum Drucktensor, und damit zur Energiedichte, aufzufassen [34, 35]. In älteren Ansätzen [36] wurde dagegen nur das klassische Potential betrachtet. Die Korrektur des klassischen Potentials ist in der Korrektur des Drucktensors allerdings enthalten.

Abschnitt 6.1 führt die Wigner-Funktion ein sowie deren Zusammenhang mit den aus Kapitel 5 bekannten Größen. Zusätzlich zeigen sich dort Wigners Überlegungen bezüglich einer Entwicklung seiner Funktion aus der klassischen Physik in die Quantenmechanik auf. Abschnitt 6.2 wendet die Momentenmethode auf die Wigner-Funktion an und führt somit das quantenhydrodynamische Modell ein. Es folgt eine kurze Einordnung des bekannten Bohm-Potentials in den vorgestellten Formalismus in Abschnitt 6.3 und anschließend in Abschnitt 6.4 die Beschreibung eines wichtigen, sehr hoffnungsvollen Ansatzes. Dieser verändert die Quantenkorrekturen im QHD-Modell so, dass auch Potentialsprünge, die in hydrodynamischen Modellen nicht zufrieden stellend erfasst werden können, berücksichtigt werden, ohne die numerische Stabilität zu gefährden. *Es wird darin ein gemitteltes, geglättetes effektives Potenzial entwickelt.*

Die folgenden Betrachtungen werden zumeist eindimensional durchgeführt, um das Prinzip zu verdeutlichen.

6.1 Die Wigner-Funktion

Schon 1932 stellte Wigner [30] eine Wahrscheinlichkeitsfunktion vor, die sich aus Heisenbergs Matrizenformulierung der Quantenmechanik ergibt [34]. Diese Wahrscheinlichkeitsdichte wird häufig als quantenmechanische Entsprechung der klassischen Verteilungsfunktion verstanden. Dies ist allerdings nur sehr eingeschränkt möglich.

Diese so genannte Wigner-Funktion ist nicht positiv definit und deshalb nicht die quantenmechanische Verteilungsfunktion selbst. Dies ist schon deshalb unmöglich, da der Ort x und der Impuls p nicht kommutieren. Die resultierende Unschärfe verhindert die Angabe einer simultanen Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x, p)$. Trotzdem ergeben sich aus der Wigner-Funktion die Erwartungswerte von Observablen formal genau wie aus einer klassischen Verteilungsfunktion. Dieser Umstand erlaubt die Entwicklung eines quantenmechanischen Transportmodells analog zur klassischen Herleitung des hydrodynamischen Modells.

Im eindimensionalen Fall ist die Wigner-Funktion f_W durch

$$f_W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x + y/2) \psi(x - y/2) e^{ipy/\hbar} dy \quad (6.1)$$

definiert. ψ repräsentiert den Zustand des Systems in Ortsraumdarstellung. f_W ist reell, aber im Allgemeinen nicht positiv. Darüber hinaus ist die Funktion nicht eindeutig. Sie hat eine Dimension von $\hbar^{-\nu}$ für ν Raumrichtungen. Deshalb definieren viele Autoren lieber die dimensionslose Wigner-Funktion $\hbar^\nu f_W$.

Nützlich wird die Wigner-Funktion durch ihre Eigenschaft, die Erwartungswerte analog zur klassischen Verteilungsfunktion berechnen zu können. Der Erwartungswert einer Observablen O ergibt sich aus der Integration über den Ort x und den Impuls p :

$$\langle O \rangle = \iint O f_W(x, p) dx dp. \quad (6.2)$$

Der lokale Erwartungswert dieser Observablen ist

$$\langle O(x) \rangle = \int O(x) f_W(x, p) dp. \quad (6.3)$$

Weiterhin gilt [37]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_W(x, p) dp = \psi^*(x) \psi(x) \quad (6.4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_W(x, p) dx = \Phi^*(p) \Phi(p), \quad (6.5)$$

wobei Φ der Zustand des Systems im Impulsraum ist. Die Integration der Wigner-Funktion über den entsprechenden Raum ergibt also die Wahrscheinlichkeitsdichte.

So kann die Wigner-Funktion die Verteilungsfunktion in klassischen Transportmodellen ersetzen. Dies wird auch durch die Bewegungsgleichung, der die Wigner-Funktion

zu gehorchen hat, unterstützt, welche unter Annahme des einfachen Hamilton-Operators $\hat{H} = p^2/2m + V$ hergeleitet werden kann. Dabei wird vorausgesetzt, dass der Teilchenstrom durch eine Einteilchen-Schrödingergleichung mit effektiver Masse und selbstkonsistentem Mehrteilchen-Potenzial genähert werden kann. Die entstehende Wigner-Boltzmann-Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung von f_W :

$$\underbrace{\frac{\partial f_W}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial f_W}{\partial x} + \theta f_W}_{\text{Strömungsglied}} = - \left(\frac{\partial f_W}{\partial t} \right)_{\text{coll.}} \quad (6.6)$$

$(\partial f_W / \partial t)_{\text{coll.}}$ ist ein allgemeiner Kollisionsterm, der Streuungen in Betracht ziehen soll. Die Potenzialenergie V ist in θ enthalten, welches durch

$$\theta f_W = - \frac{2}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\hbar/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} V}{\partial x^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1} f_W}{\partial p^{2n+1}} \quad (6.7)$$

definiert ist. Das Potenzial kann als effektives Potenzial aufgefasst werden, das für ein Mehrkörperproblem die entsprechende Hartree-Näherung enthält [38].

Im Grenzwert $\hbar \rightarrow 0$ wird dieser Term zu

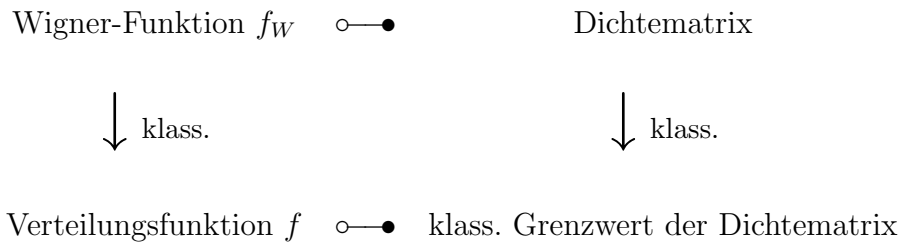
$$\theta f_W = - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial f_W}{\partial p} \quad (6.8)$$

und somit die Gleichung (6.6) zur klassischen Boltzmann-Transportgleichung (5.45). Entsprechend dem Dichtematrix-Formalismus (5.38) ist die Ableitung des Potenzials (also die Entwicklung desselben) die Entwicklung in die Quantenmechanik.

Gleichung (6.1) lässt erkennen, dass die Wigner-Funktion über eine Fourier-Transformation (hier eindimensional) mit der Dichtematrix $C = \psi^*(x + y/2)\psi(x - y/2)$ zusammenhängt:

$$\begin{aligned} f_W(x, p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} C(x + y/2, x - y/2) e^{ipy/\hbar} dy, \\ C(x + y/2, x - y/2) &= \int_{-\infty}^{\infty} f_W(x, p) e^{-ipy/\hbar} dp. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Die Dichtematrix existiert damit nur im Ortsraum, während die Wigner-Funktion in Orts- und Impulsraum, also im Phasenraum, definiert ist. Die Formulierung der Dichtematrix im Ortsraum bietet die Möglichkeit, das Rechengebiet in diesem Ortsraum zu terminieren. So lässt sich folgende Einordnung vornehmen:



Es sei darauf hingewiesen, dass die Wigner-Funktion unter Voraussetzung der Boltzmann-Statistik hergeleitet wurde. *Für den Fall der Entartung gibt es verschiedene, allerdings*

cher unbefriedigende Ansätze. Hier besteht weiterer Untersuchungsbedarf.

Ein System nahe des Gleichgewichtszustandes lässt sich nun nach Potenzen von \hbar entwickeln. Hierzu wird für die gemischten Zustände wieder eine Boltzmann-Statistik vorausgesetzt, deren Exponentialfunktion sich in eine Reihe entwickeln lässt. Diese mathematische Vorgehensweise würde nicht ohne weiteres auf die Fermi-Verteilung zu übertragen sein.

Für die 0. Ordnung in \hbar ergibt sich natürlich der klassische Ausdruck

$$f_W = e^{-\beta E}, \quad (6.10)$$

mit dem Energieeigenwert des reinen Zustandes

$$E = \sum_{j=1}^n \frac{p_j^2}{2m_j} + V(x_1, \dots, x_n) \quad (6.11)$$

und $\beta = 1/(k_B T)$. Ungerade Ordnungen in \hbar entfallen, so dass die Entwicklung

$$f_W = e^{-\beta E} (1 + \hbar^2 g_2 + \hbar^4 g_4 + \dots) \quad (6.12)$$

gesucht ist. Der nächsthöhere Term der 2. Ordnung in \hbar ergibt sich dann zu [30]

$$\hbar^2 g_2 = \sum_j \left(-\frac{\hbar^2 \beta^2}{8m_j} \frac{\partial^2 V}{\partial x_j^2} + \frac{\hbar^2 \beta^3}{24m_j} \left(\frac{\partial V}{\partial x_j} \right)^2 \right) + \sum_{j,l} \frac{\hbar^2 \beta^3 p_j p_l}{24m_j m_l} \frac{\partial^2 V}{\partial x_j \partial x_l}. \quad (6.13)$$

Terme höherer Ordnung lassen sich sukzessiv berechnen, sie werden allerdings schnell recht umfangreich und sind daher für praktische Zwecke nur sehr bedingt anwendbar.

Ein Korrekturterm k -ter Ordnung enthält keine höheren Ableitungen des Potentials als die k -te Ableitung und keine höheren Potenzen des Impulses als die k -te. *Allerdings setzt dies schon die Möglichkeit voraus, das Potential in eine Taylorreihe entwickeln zu können. Bei starken Potentialsprüngen, wie sie in Quantenstrukturen gegeben sind, wird diese Entwicklung schnell ungültig.* An dieser Stelle können durchaus noch andere Verfahren ansetzen, die starke Sprünge abrunden. Hierzu zählt zum Beispiel das hier weiterentwickelte *geglättete Quantenpotential*, welches in Abschnitt 6.4 vorgestellt wird.

Da die angegebenen Korrekturterme letztlich eine Korrektur der Wigner-Funktion darstellen, wird hierdurch im Wesentlichen eine Glättung der Teilchendichten erzielt. Zwar wird auch ein Potentialsprung abgeflacht, allerdings nicht in dem Maße wie bei geglätteten Quantenpotentialen. Deshalb ergeben sich speziell in der Energiegleichung (6.34) der unten vorgestellten hydrodynamischen Gleichungen numerische Probleme.

Diese vorgestellte Entwicklung der Wigner-Funktion ist notwendig, um in der Momentenmethode (Abschnitt 6.2) geeignete Ausdrücke für den Drucktensor (6.35) und die Energiedichte (6.37) zu erhalten.

6.2 Die Momentenmethode

Analog zur klassischen Herleitung des hydrodynamischen Modells aus der Momentenentwicklung der Boltzmann-Transportgleichung (Abschnitt 5.4.1) wird nun für die Wigner-Boltzmann-Gleichung ebenfalls eine Momentenentwicklung durchgeführt. Diese führt

dann zum quantenhydrodynamischen (QHD) Modell.

Ausgangspunkt ist die Wigner-Boltzmann-Gleichung (6.6), welche mit einer vom Impuls abhängigen Funktion $\chi(p)$ multipliziert und dann über den Impuls integriert wird [34]. Dies führt (für Elektronen, daher der Vorzeichenwechsel vor V) zu

$$\frac{\partial \langle \chi \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left\langle \frac{p}{m} \chi \right\rangle + \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{2n} \frac{1}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} V}{\partial x^{2n+1}} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} \chi}{\partial p^{2n+1}} \right\rangle = - \left\langle \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right)_{coll.} \right\rangle, \quad (6.14)$$

vgl. (5.37) und (5.38).

Die Momentenmethode setzt nun für die Funktion $\chi(p)$ Potenzen von p an, die für die ersten drei Potenzen Erhaltungssätze für die Teilchendichte, den Impuls und die Energie ergeben.

So lassen sich direkt die ersten drei Momentengleichungen angeben [35]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial \langle p_i \rangle}{\partial x_i} = 0, \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial \langle p_j \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \frac{p_i p_j}{m} \right\rangle + n \frac{\partial V}{\partial x_j} = - \left\langle \frac{\partial p_j}{\partial t} \right\rangle_{coll.}, \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \frac{p_i p^2}{2m^2} \right\rangle + \frac{\langle p_i \rangle}{m} \frac{\partial V}{\partial x_i} = - \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{coll.}. \quad (6.17)$$

Hier ergibt sich n aus

$$n = \int f_W d^3 p. \quad (6.18)$$

Die Indizierung erfolgt nach der Summenkonvention von Einstein (Anhang A.2), nach der die lineare Transformation

$$\vec{y} = [A] \vec{x} \quad \text{bzw.} \quad y_i = \sum_{j=1}^3 a_{ij} x_j \quad (6.19)$$

auch abkürzend

$$y_i = a_{ij} x_j \quad (6.20)$$

geschrieben werden kann. Über den doppelt auftretenden Index ist zu summieren.

Interessant ist hier die Tatsache, dass diese Gleichungen bis zur dritten Ordnung noch völlig konsistent zur klassischen Momentenmethode sind. Der Unterschied steckt hier in der Bildung der Erwartungswerte selbst, die nun nicht mehr mit Hilfe einer klassischen Verteilungsdichte berechnet werden, sondern über die Wigner-Funktion. Den Gleichungen in dieser Form ist davon allerdings nichts anzusehen. Sie würden sich abgesehen davon, dass die Erwartungswertbildung unterschiedlich ist, aus der Boltzmann-Transport-Gleichung formal identisch ergeben. Erst ab der 4. Gleichung wird ein zusätzlicher Term erhalten, der dann eine dritte Ableitung des Potentials beinhalten würde. Ab diesem Grad sind die Momentengleichungen dann auch grundsätzlich verschieden.

In diesen Momentengleichungen wurden bisher die Annahmen gemacht, dass die Boltzmann-Statistik gültig ist, und dass sich das Potenzial entwickeln lässt. Abgesehen von diesen Voraussetzungen ist diese Methode aber noch voll quantenmechanisch und enthält sonst keinerlei Näherungen.

Es fällt in den Momentengleichungen auf, dass eine bestimmte Momentengleichung immer

das nächsthöhere Moment enthält, so also eine neue makroskopische Größe eingeführt wird. Zur Terminierung der Hierarchie muss die zuletzt eingeführte Variable geeignet genähert werden. In der Energiegleichung ergibt sich daraus zum Beispiel der Wärmestromvektor. Dieses höhere Moment erwächst aus dem zweiten Term der linken Seite von Gleichung (6.14) [39].

Die Gleichungen (6.15)-(6.17) müssen nun so umgeschrieben werden, dass aus den Erwartungswerten physikalische Größen werden. Hierzu wird das molekulare Moment in einen makroskopischen Teil mit der Flussgeschwindigkeit \vec{u} und einen mikroskopischen Teil mit dem Moment \vec{p}' nach [35]

$$\vec{p} = m\vec{u} + \vec{p}' \quad (6.21)$$

aufgeteilt. Dies entspricht dem Übergang in ein sich mit der mittleren Geschwindigkeit \vec{u} bewegendes System.

Der Erwartungswert des Impulses ist die Impulsdichte $\vec{\Pi}$

$$\langle p_i \rangle = \Pi_i = mn u_i, \quad (6.22)$$

da die Erwartungswerte ungerader Potenzen von p'_i unter Annahme eines lokalen Gleichgewichts, welches gerade Symmetrie besitzt (vgl. Kap. 7), Null werden. Eine Ausnahme ist der Wärmeflussvektor \vec{q} , auf den noch näher eingegangen wird.

Weiterhin gilt:

$$\left\langle \frac{p_i p_j}{m} \right\rangle = u_i \Pi_j + \left\langle \frac{p'_i p'_j}{m} \right\rangle \quad (6.23)$$

$$= u_i \Pi_j - P_{ij} \quad (6.24)$$

mit dem relativen kinetischen Drucktensor P_{ij} . Dieser repräsentiert den relativen kinetischen Druck durch die Partikularbewegung der Teilchen. Hieraus lässt sich auch die Energiedichte W des Systems zu

$$W = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} m n u^2 + \left\langle \frac{p'^2}{2m} \right\rangle \quad (6.25)$$

ableiten.

Schließlich wird der Erwartungswert des Energieflusses

$$\left\langle \frac{p_i p^2}{2m^2} \right\rangle = u_i W - u_j P_{ij} + \left\langle \frac{p'_i p'^2}{2m^2} \right\rangle \quad (6.26)$$

$$= u_i W - u_j P_{ij} + q_i \quad (6.27)$$

mit dem schon angesprochenen Wärmefluss q_i benötigt.

Der Wärmekonvektionsvektor \vec{q} beschreibt die Vermittlung ungerichteter Wärmebewegung zwischen Volumenelementen. Er kann mit zwei unterschiedlichen Ansätzen bestimmt werden. Makowitz [39] zeigt ein Näherungsverfahren über die Entwicklung der Verteilungsfunktion ins Ungleichgewicht. Wird ein nur lokales Gleichgewicht, also eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung, angenommen, entfele, wie in Abschnitt 5.4 angedeutet, der Wärmestrom einfach, was kein adäquates Modell wäre. Daher wird eine lokal gestörte Verteilungsdichte zugelassen, die einem Relaxationszeitansatz entspricht. Da dies schon die

eigentliche Form der hydrodynamischen Gleichungen verändern würde, müssen geeignete Näherungen getroffen werden. Näheres ist in Kap. 7 nachzulesen.

Wird ein rein thermischer Wärmestrom, der formal dem Wiedemann-Franz-Gesetz ähnelt, zugelassen, ergibt dieser sich zu

$$\vec{q} = -\frac{5}{2} \frac{\tau_p}{m} n k_B^2 T \nabla T \quad (6.28)$$

mit der Relaxationszeit τ_p für den Impuls. Gardner [35] dagegen nutzt ein phänomenologisches Modell. Er stellt den Wärmestrom mit dem Fourierschen Ansatz

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T \quad (6.29)$$

dar. Hier ist κ die thermische Leitfähigkeit und gehorcht dem Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\kappa = \sigma \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{q^2} T, \quad (6.30)$$

welches die elektrische Leitfähigkeit σ mit der thermischen Leitfähigkeit in Verbindung setzt (q ist die Ladung der Ladungsträger). So wird daraus

$$\vec{q} = -\sigma \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{q^2} T \nabla T. \quad (6.31)$$

Die Temperaturabhängigkeit beider Ansätze stimmt damit überein. So schreiben sich die Momentengleichungen jetzt

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial \Pi_i}{\partial x_i} = 0, \quad (6.32)$$

$$\frac{\partial \Pi_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \Pi_j - P_{ij}) + n \frac{\partial V}{\partial x_j} = - \left(\frac{\partial \Pi_j}{\partial t} \right)_{coll.}, \quad (6.33)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i W - u_j P_{ij} + q_i) + \frac{\Pi_i}{m} \frac{\partial V}{\partial x_i} = - \left(\frac{\partial W}{\partial t} \right)_{coll.}. \quad (6.34)$$

Das nächsthöhere Moment lieferte als vierte Momentengleichung eine Erhaltungsgleichung für den Energiefluss. Diese würde das Transportmodell allerdings erheblich verkomplizieren. *Außerdem lassen sich jenseits des vierten Momentes der Verteilungsdichte keine sinnvollen physikalischen Größen mehr zuordnen, was eine höhere Entwicklung fragwürdig erscheinen lässt. Deshalb wird auf diese verzichtet.*

Bis zu diesem Punkt kann die Herleitung noch direkt durchgeführt werden. Die Energiedichte W und der Drucktensor P_{ij} enthalten allerdings noch nicht näher spezifizierte Erwartungswerte, die mit Wigners halbklassischer Näherung der Wigner-Funktion (6.12) und (6.13) approximiert werden müssen. *Die folgenden Rechnungen sind bis zur Ordnung $O(\hbar^4)$ genähert.*

Nach [35, 40] wird der Drucktensor

$$P_{ij} = - \left\langle \frac{p'_i p'_j}{m} \right\rangle = -n k_B T \delta_{ij} + \frac{\hbar^2 n}{12m} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \ln(n). \quad (6.35)$$

Hier ist δ_{ij} das Kronecker-Symbol, die Abhängigkeit vom Dichtegradienten ergibt sich aus der Elimination der Potenzialabhängigkeit entsprechend der Boltzmann-Statistik:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \ln(n) = -\frac{1}{k_B T} \frac{\partial V}{\partial x_i}. \quad (6.36)$$

Ancona und Tiersten [41] begründeten 1987, dass es möglich sei, quantenmechanisches Verhalten durch die Abhängigkeit vom Dichtegradienten zu beschreiben. Dies wird durch Wigners Ansatz bestätigt.

Nun ist es ein einfacher Schritt, aus diesem Drucktensor die Energiedichte zu bestimmen. Deshalb wird $i = j$ gesetzt und Einsteins Summenkonvention beachtet. So erhält man

$$W = \frac{1}{2} m n u^2 + \left\langle \frac{p'^2}{2m} \right\rangle = \frac{3}{2} n k_B T + \frac{1}{2} m n u^2 - \frac{\hbar^2 n}{24m} \nabla^2 \ln(n). \quad (6.37)$$

Hier wird zur besseren Übersicht das Wigner-Potenzial Q_W eingeführt, welches als Quantenkorrektur (s. \hbar^2) der Energie verstanden werden muss. Es ist durch

$$Q_W = -\frac{\hbar^2}{8m} \nabla^2 \ln(n) \quad (6.38)$$

definiert, so dass die Energiedichte auch

$$W = W_{\text{klassisch}} + n \frac{Q_W}{3} \quad (6.39)$$

geschrieben werden kann. Im Dichtematrixformalismus liegt der Ursprung dieser Quantenkorrekturen in Gleichung (5.40) begründet.

Die beiden den Dichtegradienten enthaltenden Terme in (6.35) und (6.37) verdeutlichen den nichtlokalen Charakter, der aus der Schrödinger-Gleichung folgt. Sie sind die gesuchten Quantenkorrekturterme, die den Übergang vom hydrodynamischen Modell zum quantenhydrodynamischen Modell kennzeichnen. Hierbei ist zu beachten, dass die Korrektur der Energiedichte gleichen Ursprungs ist wie die Korrektur des Druckes. Es ist also ursprünglich der Drucktensor, welcher demnach die Auswirkungen des Wignerschen Ansatzes enthält. Dies steht nicht im Gegensatz zu früheren Ansätzen [36], die eine Korrektur nur des Potenzials forderten, da sich dieses auch hier ergibt. Zusätzlich aber wird auch die Energie der Teilchen eine andere sein als im klassischen Fall.

An dieser Stelle muss darauf hingewiesen werden, dass beide Korrekturterme einen Faktor $1/3$ enthalten, der allerdings aus makroskopischer Sicht nicht fest bei diesem Wert liegen muss. Eine mikroskopische Herleitung mit Hilfe der Wigner-Funktion [40] ergibt diesen Wert. Vergleichsrechnungen [42] zeigen eine gute Übereinstimmung mit Dichtematrixrechnungen für diesen Faktor zwischen $1/3$ und 1 . Viele Autoren lassen ihn daher gleich entfallen [43]. Gardner und Ringhofer [44] geben als alternative Interpretation an, dass dieser Faktor bei der Mittelwertbildung eines geglätteten Quanten-Potenzials, auf das später noch eingegangen wird (s. Abschnitt 6.4), über der Temperatur entsteht.

Es wird angenommen, dass, ähnlich wie die klassischen Strömungsgleichungen, die QHD-Gleichungen auch wesentlich allgemeingültiger sind als die Bedingungen, unter denen sie hergeleitet wurden, sie also auch bei Verletzung mancher Bedingung noch brauchbare Ergebnisse liefern. Da bisherige Ansätze für den Entartungsfall mit numerischen

Inkonsistenzen auskommen müssen, liegt es nahe, das QHD-Modell auch für den Entartungsfall unverändert zu lassen [35]. Ebenso wird häufig angenommen, dass abrupte Potenzialsprünge in Heterostrukturen die Gültigkeit des Modells nicht in Frage stellen, obwohl eigentlich vorausgesetzt wird, dass das Potenzial in eine Taylor-Reihe entwickelt werden kann. Gerade die Rückführung der Korrekturterme auf Dichtegradienten erweitert dabei anscheinend den Gültigkeitsbereich. Diese Einschätzung ist jedoch mit Vorsicht zu betrachten. Eigene Rechnungen zeigen eine sehr starke Empfindlichkeit der Energiegleichung auf Potenzialsprünge, weshalb auch auf den angesprochenen Ansatz mit gemitteltem Quantenpotenzial zurückgegriffen wird.

Letztlich sollen die drei Momentengleichungen auf die sinnvollen Größen Teilchendichte n , Geschwindigkeit \vec{u} und Elektronen-Temperatur T zurückgeführt werden. Eine längere Rechnung führt die Gleichungen (6.32)-(6.34) mit Hilfe der Gleichungen (6.35) und (6.37) exakt in das von Gardner [35] angegebene Ergebnis über:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nu_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (6.40)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{1}{mn} \frac{\partial(nk_B T)}{\partial x_j} - \frac{\hbar^2}{12m^2 n} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \ln(n) \right) + \frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x_j} = - \left(\frac{\partial u_j}{\partial t} \right)_{coll.}, \quad (6.41)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{2}{3} T \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{2}{3n} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{\hbar^2}{36mnk_B} \frac{\partial}{\partial x_i} (n \nabla^2 u_i) = - \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_{coll.}. \quad (6.42)$$

Zusammen mit der Poisson-Gleichung ist dies der vollständige Gleichungssatz des quantenhydrodynamischen Modells. In einer Dimension besteht er aus zwei Schrödinger-Gleichungen, einer parabolischen und einer elliptischen Gleichung. Hierzu sind acht Randbedingungen notwendig.

6.3 Das Bohm-Potenzial

Die im Abschnitt 6.2 vorgestellten Quantenkorrekturen lassen sich in eine sehr einfache Form bringen, wenn eine andere Quantenkorrektur, die Bohm 1952 vorgeschlagen hatte [36], berücksichtigt wird. Anschließend wird sie in das Transportmodell integriert.

Wenn die Lösung ψ der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung für den reinen Zustand

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \quad (6.43)$$

in Betrag R und Phase S/\hbar

$$\psi = R e^{iS/\hbar} \quad (6.44)$$

unterteilt wird, lassen sich mit $K = R^2$ die zwei Gleichungen

$$\frac{\partial K}{\partial t} + \nabla \cdot \left(K \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \quad \text{und} \quad (6.45)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{K}}{\sqrt{K}}}_{\text{Korrektur}} = 0 \quad (6.46)$$

herleiten. Der rechte Term der Gleichung (6.46) kann als quantenmechanische Korrektur zur klassischen Potenzialenergie V aufgefasst werden. Er wird Bohm-Potenzial

$$Q_B = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{K}}{\sqrt{K}} \quad (6.47)$$

genannt.

Bohm liefert neben dieser einfachen Herleitung aber auch eine weiter gehende Interpretation. Da S im klassischen Grenzfall die Lösung einer Hamilton-Jakobi-Gleichung ist, kann ∇S als Impuls verstanden werden. Dann wird Gleichung (6.45) eine Kontinuitätsgleichung, in der K die Wahrscheinlichkeitsdichte der Teilchen des Ensembles ist und deshalb im Ensemble als Teilchendichte n betrachtet wird. Damit ergibt sich die bekannte Form des Bohm-Potenzials

$$Q_B = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}}. \quad (6.48)$$

Für Löcher ergibt sich ein positives Vorzeichen. In der vorliegenden Form haben wir es beim „Bohm-Potenzial“ mit einer Potenzialenergie zu tun. Dies sollte unbedingt beachtet werden.

Nun bestimmt der Betrag der Wellenfunktion ein quantenmechanisches Potenzial, was die Interpretation nahe legt, dass die Wellenfunktion selbst als ψ -Feld angesehen werden kann, welches der Schrödinger-Gleichung gehorcht. Dieses Feld wäre aber zum einen abhängig von seinen Randbedingungen, gehorcht zum anderen einer homogenen Bestimmungsgleichung, so dass keine Strahlung oder Absorption möglich ist. Es soll hier nicht näher diskutiert werden, inwieweit solche Interpretationen hilfreich sind oder nicht. Bohm hat hieraus eine neue Interpretation der Quantenphysik entwickelt, welche nur mit gemittelten Größen auszukommen versucht.

Was hat dies alles mit der hier vorgestellten Theorie zu tun? Hier helfen erneut die Gleichungen (6.33) und (6.35). Die Ableitung des Drucktensors führt auf [45]

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} P_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_j} (nk_B T) + \frac{n}{3} \frac{\partial Q_B}{\partial x_j}. \quad (6.49)$$

Die linke Seite ist in genau dieser Form in Gleichung (6.33) enthalten. Wird nun dieser Term durch Gleichung (6.49) ersetzt, zeigt sich, dass das Bohm-Potenzial formal wie das klassische Potenzial enthalten ist. Deshalb wird auch hier das Bohm-Potenzial als Quantenkorrektur des klassischen Potenzials verstanden:

$$n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(V + \frac{Q_B}{3} \right).$$

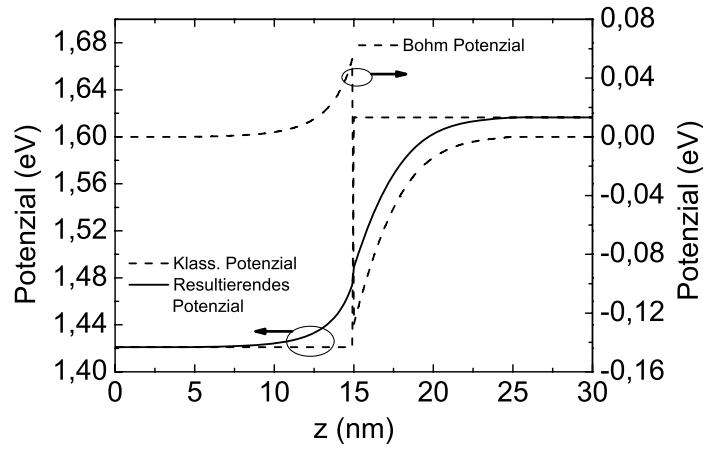


Abbildung 6.1: Das Bohm-Potenzial und sein Einfluss auf einen Potentialsprung

Abb. 6.1 zeigt das Bohm-Potenzial sowie seine Auswirkung auf einen Potentialsprung. Es zeigt sich, dass der Sprung zwar aufgeweicht, die Ableitung aber trotzdem eine Singularität aufweisen wird. Dies ist für die Stromgleichung nicht problematisch, aber für die Energiegleichung wird die Glättung des Potentials nicht ausreichen. Deshalb wird ein weiterer Ansatz für die Potenzialkorrektur eingeführt (Abschnitt 6.4), der dieses Problem behebt.

Das Bohm-Potenzial sorgt für die Glättung der Teilchendichten, da der Ursprung die Quantenkorrektur der Wigner-Funktion, also einer Art Verteilungsdichtefunktion, ist. Dies zeigt Abb. 6.2, in der die selbstkonsistente Gleichgewichtslösung eines nahe den Kontakten dotierten QW-Systems gezeigt ist.

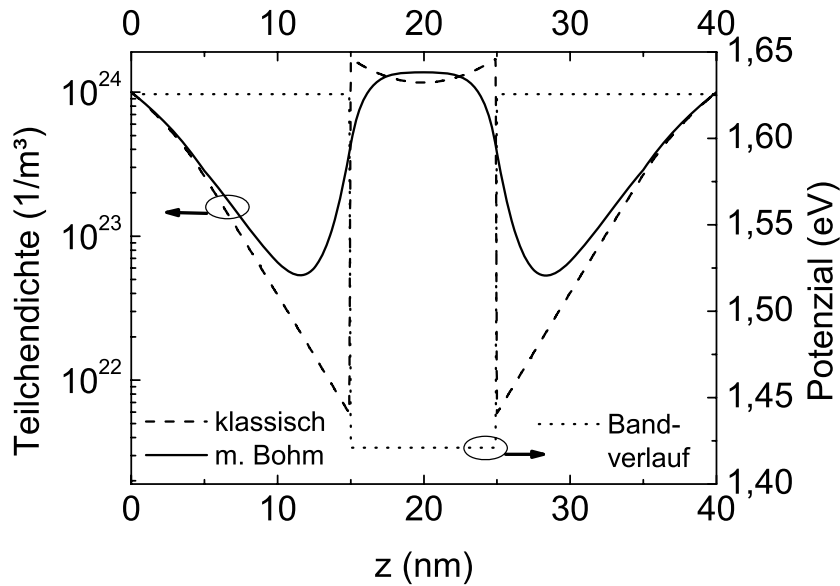


Abbildung 6.2: Selbstkonsistente Lösung der Teilchendichten für einen Quantentopf

Bisher hat es leider noch keinen Konsens gegeben, welche Form einer Quantenkorrektur im hydrodynamischen Modell am sinnvollsten ist [46]. Bohms Vorschlag einer Potenzialkorrektur ist heute einer Korrektur des Drucktensors gewichen (6.35). Ein wichtiger Grund hierfür ist die Tatsache, dass sich daraus wie gesehen formal das Bohm-Potenzial als Potenzialkorrektur ergibt, dieser Fall demnach enthalten ist.

Hier steckt die Begründung für bereits durchgeführte Ansätze [47] am Beispiel der Elektroabsorptions-Modulatoren, quantenmechanische Effekte einfach durch das Bohm-Potenzial zu korrigieren. Dies ist dann möglich, wenn nur bis zur zweiten Gleichung der Momentenhierarchie (6.33) gerechnet werden kann, was bei Bauteilen der Fall ist, deren Temperaturabhängigkeit keinen allzu großen Einfluss hat.

Das Bohm-Potenzial geht ebenfalls mit dem Faktor $1/3$ gewichtet ein, was sich aus den Korrekturen (6.35) und (6.37) ergibt.

Eine Übersicht über die verschiedenen Quantenkorrekturen gibt Anhang C.

6.4 Gemittelte Quanten-Potenziale

Die bisherigen Ansätze, Quantenkorrekturen aus der Wigner-Funktion zu entwickeln, also das Bohm- bzw. das Wigner-Potenzial, sorgen in erster Linie für die Glättung der Teilchendichten, nicht aber für die der Potenziale selbst. Diese sind zwar wesentlich flacher als die ursprünglichen klassischen Potenziale, welche Diskontinuitäten aufweisen, aber die Sprünge sind dennoch vorhanden, so dass der Gradient weiterhin Singularitäten hat, welche große numerische Probleme hervorrufen. Hintergrund dieses Problems ist die Tatsache, dass der Bereich, in dem die Potenzialentwicklung gilt, gerade an den interessanten Stellen, den Potenzialsprüngen, verlassen wird. Die Reihenentwicklung divergiert hier, da sie ansonsten zu einer lokalen Funktion werden müsste, während eigentlich nichtlokale Diffusionskräfte gesucht sind.

Ferry und Zhou [46] sahen die Notwendigkeit, hier einen neuen Ansatz zu finden, der die alten Quantenpotenziale im Wesentlichen mit einbezieht, jedoch sowohl numerisch als auch analytisch angenehmere Eigenschaften aufweist. Sie versuchen, eine Reihenentwicklung des Potenzials von vornherein zu vermeiden.

Auch dabei wird die Quantenkorrektur in Form eines effektiven Potenzials angegeben, wieder korrigiert sie den Drucktensor (6.35). Der Ansatz von Ferry und Zhou weicht nicht sehr von Wigner [30] ab, der für ein System nahe des Gleichgewichts die Wigner-Funktion in eine Reihe entwickelt (6.12). Es wird in diesem Fall allerdings von der Dichtematrix nahe des Gleichgewichts ausgegangen, die durch die Bloch-Gleichung (5.8) beschrieben wird. Durch die Separation in einen dynamischen und einen potenziellen Anteil ergibt sich hieraus eine Bestimmungsgleichung für das effektive Potenzial, welche mithilfe der Green-Funktion gelöst werden kann. Die wesentliche Näherung bei diesem Ansatz ist die Linearisierung der Bloch-Gleichung, indem nur die Elemente nahe der Hauptdiagonalen der Dichtematrix betrachtet werden. Dabei geht es um kleine Werte der Relativkoordinate, die die nichtlinearen Terme verschwinden lassen. Anschaulich werden so nichtlokale Korrelationen weiter voneinander entfernter Regionen vernachlässigt.

Was sind die wesentlichen Ergebnisse dieses Vorgangs? Zum einen ist das entstehende effektive Potenzial eine nichtlokale Größe, entspricht also dem quantenmechanischen Charakter. Zum anderen sorgt die Green-Funktion für eine Gauss-förmige Mittelung des Po-

tenzials über einen Radius, der der thermischen De-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda_D = \sqrt{\hbar^2 / (2mk_B T)} \quad (6.50)$$

entspricht. So geht das effektive Potenzial bei hohen Temperaturen in das klassische, lokale Potenzial über.

Dabei ist zu beachten, dass nicht dieses geglättete Potenzial \bar{V} in die hydrodynamischen Gleichungen eingehen wird, sondern dessen zweite Ableitung. Letztere entspricht dort einer Korrektur des Drucktensors, womit eine wesentliche Forderung an die Quantenkorrektur erfüllt wäre. Die genauen Formen zeigen sich aber, wenn anschließend auf Gardners [44] Herleitung des Quantenpotenzials eingegangen wird. Ferry und Zhou haben hierzu die Grundlage geschaffen.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die bisherigen Ansätze, welche auf Wigners Entwicklung der Wigner-Funktion [30] aufbauten, in dieser Formulierung enthalten sind. Das eingeführte Quantenpotenzial ergibt sich als nichtlokale Mittelung des klassischen Potenzials, tritt aber in der Abhängigkeit der Dichtematrix vom Potenzial auf. Das eigentliche Potenzial, welches in den hydrodynamischen Gleichungen enthalten ist, ergibt sich dagegen aus der Differenz von geglättetem und lokalem Quantenpotenzial. Das geglättete Potenzial wird bei hohen Temperaturen in den klassischen Fall übergehen.

Wie schon bei der Herleitung des QHD-Modells gelten für die Form der Gleichungen die Ausführungen von Gardner und Ringhofer [44], da diese intensiv überprüft wurden und eine genauere Einordnung des Ansatzes möglich ist.

Ausgehend von Ferrys und Zhous Vorarbeiten [46] ergeben sich folgende Bedingungen für das QHD-Modell:

- Die Quantenkorrektur tritt wie zuvor im Drucktensor auf und infolgedessen auch in der Energiedichte (vgl. (6.35) und (6.37)).
- Sie ist gültig für alle Ordnungen von \hbar^2 (dies ist allgemeiner als die ursprüngliche Formulierung und entscheidend) und bis zur ersten Ordnung in $V/(k_B T)$.
- Es wird keine Reihenentwicklung des klassischen Potenzials benötigt.
- Der Korrekturterm entsteht durch eine Mittelung über der Temperatur (aus der sich der bekannte Vorfaktor $1/3$ herleiten lässt, s. Abschnitt 6.2) und aus einer glättenden Ortsintegration, wie von Ferry und Zhou vorgeschlagen.
- Die führende Singularität, die bei einem Potenzialsprung entsteht, wird gekürzt, so dass ein geglättetes effektives Potenzial übrig bleibt.
- Der neue Drucktensor beschreibt einen Tunnelstrom der Teilchen durch die Barriere.

Letztlich werden die Diskontinuitäten des klassischen Potenzials geglättet, so dass diese numerisch einfacher zu handhaben sind.

Alternativ gehen Gardner und Ringhofer von einer Linearisierung gemäß der Störungstheorie erster Ordnung der Green-Funktion aus, der Born-Näherung, welche den Streuprozess der Teilchen als Übergang zu einer ebenen Welle begreift. Der Drucktensor hingegen wird mitsamt seinen Nebendiagonalelementen berechnet.

Der Ansatz über die Born-Approximation führt mit $\beta = (k_B T)^{-1}$ auf das Quantenpotenzial \bar{V} [44]:

$$\begin{aligned} \bar{V}(\vec{x}, \beta) &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\beta' \left(\frac{\beta'}{\beta} \right)^2 \int d^3 X' \left(\frac{2m\beta}{\pi(\beta - \beta')(\beta + \beta')\hbar^2} \right)^{3/2} \\ &\quad \times \exp \left(-\frac{2m\beta}{(\beta - \beta')(\beta + \beta')\hbar^2} (\vec{X}' - \vec{x})^2 \right) V(\vec{X}'). \end{aligned} \quad (6.51)$$

Die Temperaturintegration

$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\beta' \left(\frac{\beta'}{\beta} \right)^2$$

ergibt einen Faktor 1/3, der im Zusammenhang mit dem Bohm- und dem Wigner-Potenzial nun schon mehrfach aufgetaucht ist, denn für $\hbar^2 \rightarrow 0$ ergibt sich

$$\bar{V}(\vec{x}, \beta) = \frac{1}{3} V. \quad (6.52)$$

Das im QHD-Modell benutzte effektive Potenzial führt damit zu der 1/3-Gewichtung der sonst üblichen Quantenpotenziale.

Die Ortsintegration ist nichts anderes als eine Mittelung über das Gauss-förmig um \vec{X}' gewichtete klassische Potenzial mit der 1/e-Breite

$$\sigma = \sqrt{\frac{(\beta^2 - \beta'^2)\hbar^2}{4m\beta}}. \quad (6.53)$$

Die für $\beta' = 0$ maximale Breite σ_{\max} der Gauss-Glocke entspricht dabei der thermischen De-Broglie-Wellenlänge/ $\sqrt{2}$:

$$\sigma_{\max} = \frac{\hbar}{\sqrt{4mk_B T}}. \quad (6.54)$$

Für hohe Temperaturen nähert die Gauss-Kurve sich einem Dirac-Impuls und das Quantenpotenzial entspricht der Näherung für $\hbar^2 \rightarrow 0$.

Abbildung 6.3 zeigt das Quantenpotenzial für einen Potentialsprung. Der Sprung des (selbstkonsistenten) Quantenpotenzials wird zu einer glatten Kurve des Quantenpotenzials, die etwa auf der Höhe 1/3 des klassischen Potentials liegt, was dem klassischen Grenzwert (6.52) entspricht.

Was wird aus dem QHD-Modell unter den veränderten Umständen? Das gerade eingeführte Quantenpotenzial ist eine Korrektur des Drucktensors P_{ij} ähnlich Gleichung (6.35) nach

$$\begin{aligned} P_{ij} &= -nk_B T \delta_{ij} - \frac{\hbar^2 n}{4mk_B T} \frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x_i \partial x_j} = -nk_B T \delta_{ij} - nV_{\text{sm}ij} \\ &= -nk_B T \delta_{ij} + P_{ij}^{\text{Q}}, \end{aligned} \quad (6.55)$$

wobei der Faktor 1/3 nun im Quantenpotenzial enthalten ist. Die Energiedichte wird jetzt

$$W = \frac{3}{2} nk_B T + \frac{1}{2} m n u^2 + \frac{\hbar^2 n}{8mk_B T} \nabla^2 \bar{V} = \frac{3}{2} nk_B T + \frac{1}{2} m n u^2 + \frac{1}{2} n V_{\text{sm}} \quad (6.56)$$

$$= W^{\text{cl}} + W^{\text{Q}}. \quad (6.57)$$

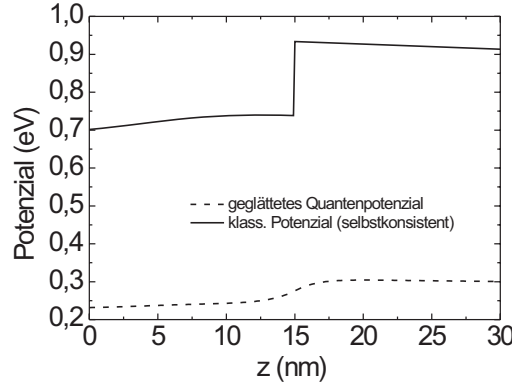


Abbildung 6.3: Das Quantenpotenzial \bar{V} für einen Potenzialsprung

Wichtig für das QHD-Modell ist vor allem, dass sich die führenden Diskontinuitäten der beiden Größen P_{ij} und W und die Diskontinuitäten der Driftterme gegenseitig kürzen. Dies bedeutet, dass sich für eine Diskontinuität des Potenzials die effektive Kraft kontinuierlich verhält.

Das zu dieser Kraft gehörige effektive Potenzial V_{eff} , welches sich schon oben im Drucktensor verbirgt, kann zu

$$V_{\text{eff}} = V + \frac{\hbar^2}{4mk_B T} \frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x_i \partial x_j} = V + V_{\text{sm}} \quad (6.58)$$

angegeben werden. Dieses effektive Potenzial ist es, welches auch in der Poisson-Gleichung wirkt, zusätzlich finden sich in den QHD-Gleichungen noch weitere Beiträge, die aber nur weniger singuläre Beiträge enthalten.

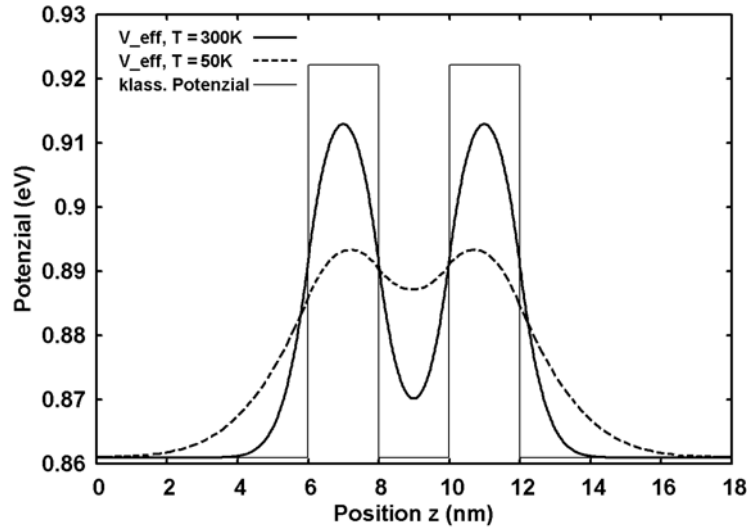


Abbildung 6.4: Effektives Potenzial V_{eff} einer Doppelbarrierenstruktur

Die geglätteten Kurve (Abb. 6.4) zeigt das effektive Potenzial für eine Doppelbarrierenstruktur. Die Implementierung des geglätteten Quantenpotenzial brachte zunächst einige Schwierigkeiten in den Integrationen mit sich, deren Lösung detailliert in Abschnitt 8.7 dargestellt ist.

Letztlich werden hier noch die tatsächlichen Beiträge des geglätteten Potenzials zur Stromgleichung bzw. zur Energiegleichung angegeben. Für ein eindimensionales Problem sind die wichtigen Terme der Stromgleichung (6.33):

$$-\frac{\partial P_{ij}^Q}{\partial x_i} + n \frac{\partial V}{\partial x_j} = n \nabla(V + V_{\text{sm}}) + \nabla n V_{\text{sm}ij} = n \nabla \left(\underbrace{V + V_{\text{sm}} + \int \frac{\nabla n}{n} V_{\text{sm}ij} dx}_{\text{Quantenkorrektur}} \right), \quad (6.59)$$

Q steht für die quantenmechanische Korrektur. Darin wird deutlich, welcher Anteil die Quantenkorrektur des Potenzials ist. Zum effektiven Potenzial kommt noch ein glatter Anteil (smooth contribution) hinzu, der die Ortsabhängigkeit der Teilchendichte berücksichtigt. Dieser geht bei Wigners Ansatz im Bohm-Potenzial (6.48) auf.

In der Energiegleichung (6.34) beinhalten die Terme

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i W^{\text{cl}}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i W^Q - u_j P_{ij}^Q) + \frac{\Pi_i}{m} \frac{\partial V}{\partial x_i} \\ &= \nabla \cdot [\vec{u} (W^{\text{cl}} + n \underbrace{V_{\text{sm}}/2}_{\text{Energiekorrektur}})] + \underbrace{V_{\text{sm}ij} \frac{\partial}{\partial x_i} j_j}_{\text{smooth contr.}} + \vec{j} \cdot \nabla (\underbrace{V + V_{\text{sm}}}_{\text{eff. Potenzial}}) \end{aligned} \quad (6.60)$$

Korrekturen (cl steht für den klassischen Anteil).

Das beschriebene geglättete Quantenpotenzial erweitert den Gültigkeitsbereich der QHD-Gleichungen derart, dass auch Potenzialsprünge und die daraus entstehenden Singularitäten berechnet werden können. Während die ursprünglichen, das Bohm- und das Wigner-Potenzial enthaltenden Gleichungen, die aus der Wigner-Funktion hergeleitet sind, die Entwickelbarkeit des klassischen Potenzials in eine Taylor-Reihe voraussetzen, steht nun ein Verfahren zur Verfügung, das zum Beispiel die Berechnung der wichtigen Doppelbarrierenstrukturen ermöglicht. Es erlaubt darüber hinaus, dass Teilchen in die Barrieren hineintunneln, da das effektive Potenzial geglättet ist und niedriger liegt als das ursprüngliche Potenzial.

6.5 Zusammenfassung

Mit dem quantenhydrodynamischen Modell steht ein Hilfsmittel zur Verfügung, das die Eigenschaften bietet, welche zur Simulation von Transportphänomenen in Halbleiterquantenstrukturen notwendig sind. Es ist damit einfach, die Rechnung für die quantenmechanischen Bereiche mit den klassischen Bereichen zu koppeln, die mit dem hydrodynamischen Modell beschrieben werden. Die Quantisierung der Zustände wird durch Korrekturterme erfasst, die Berücksichtigung der Energiegleichung sorgt neben der Impulsgleichung für die Beschreibung des sequenziellen Tunnelvorgangs an Doppelbarrieren, wie Luryi [5] ihn gefordert hat. Das geglättete Quantenpotenzial ermöglicht die Einbeziehung von Potenzialsprüngen an Heteroübergängen.

Somit wird es nun möglich, ausgedehntere Strukturen, die sowohl klassische Bereiche, als auch dünne Quantenschichten enthalten, in ihrer Gesamtheit zu berechnen.

7 Näherungen der Verteilungsfunktion

Überblick: Während bei der Herleitung des hydrodynamischen Modells die Verteilungsfunktion des Systems völlig unbestimmt bleibt, setzen der Abbruch der Gleichungshierarchie und die Wahl des Relaxationszeitansatzes eine **lokal gestörte Maxwell-Verteilung** voraus. Unter diesen Umständen kann das hydrodynamische Modell von Beginn an vereinfacht werden. Diese Vereinfachungen werden sowohl für Boltzmann-, als auch für Fermi-Verteilung begründet und Ausdrücke für die verschiedenen Erwartungswerte und deren Erhaltungsgleichungen gewonnen.

In den vorangegangenen Kapiteln ist immer wieder von Näherungen der Verteilungsfunktion die Rede gewesen, von 'lokalem' oder 'gestörtem' Gleichgewicht. Doch was hat es damit auf sich?

In der Momentenmethode war keine explizite Angabe der Verteilungsfunktion nötig. Diese versteckte sich implizit in der Erwartungwertbildung der physikalischen Größen - die jedoch selbst als zu bestimmende Unbekannte angesehen wurden. Damit konnte auf die Bestimmung der Verteilungsfunktion als solche verzichtet werden. Eine Ausnahme bildet aber der Abbruch der Gleichungshierarchie über den Term (6.27), da hierzu Informationen über das tatsächliche Aussehen dieser Variablen, hier des Wärmestromvektors, benötigt werden.

Das Transportmodell kann nun von einer anderen Seite betrachtet werden, indem man Annahmen über die Verteilungsfunktion von vornherein berücksichtigt. So lassen sich Näherungen in diesem Modell frühzeitig begründen und die Konsistenz des Modells gewährleisten.

Drei Zustände des Systems werden vorgestellt (Abschnitt 7.1):

- Globales Gleichgewicht
- Lokales Gleichgewicht
- Lokale, gestörte Maxwell-Verteilung

Unter diesen Voraussetzungen wird anschließend das Transportmodell neu hergeleitet, so dass die Näherungen der Verteilungsfunktion direkt einfließen. Nun entfallen einige Terme entsprechend der Näherungskonsistenz mit dem Relaxationsansatz und dem Abbruch der Gleichungshierarchie. Für die Gleichgewichtsverteilung wird einmal die Boltzmann-Verteilung (Abschnitt 7.2.1) und dann die Fermi-Verteilung (Abschnitt 7.2.2) angenommen. Selberherr [22] gibt die entsprechenden Gleichungen hauptsächlich unter Annahme der Boltzmann-Statistik und zudem nur bis zur Impulsgleichung an. Dieser Ansatz geht insbesondere bei dem in RTDs wichtigen Wärmestrom darüber hinaus.

7.1 Systemzustände

Globales Gleichgewicht

Ohne äußere Kräfte wird das System als Ganzes ruhen, was jedoch nicht bedeutet, dass es keine Teilchenbewegung gibt. Die Partikularbewegung der Teilchen um einen mittleren Ort sorgt für die Temperatur T_0 des Ensembles, die proportional zur kinetischen Energie dieser Bewegung definiert ist. Wird die Wellenzahl k in eine Driftkomponente k_u und einen relativen Anteil ξ aufgeteilt $\vec{k} = \vec{k}_u + \vec{\xi}$, so gilt im globalen Gleichgewicht:

$$\begin{aligned}\vec{k} &= \vec{\xi}, \\ \frac{\hbar^2}{2m} \langle \xi^2 \rangle &= \frac{3}{2} k_B T_0.\end{aligned}\quad (7.1)$$

Die zugehörige Verteilungsfunktion wird zur Maxwell-Verteilung

$$\bar{f}^0 = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m k_B T_0} \right) \quad (7.2)$$

und der Drucktensor (vgl. Gleichung (6.35)) dem idealen Gas entsprechend

$$P = -n k_B T_0. \quad (7.3)$$

Die Beschaffenheit der Maxwell-Verteilung wirkt sich direkt auf die Erwartungswertbildung der physikalischen Größen aus. Aufgrund der Symmetrie der Verteilung in \vec{k} fallen alle Integrale ungerader Momente in \vec{k} weg. Gleiches gilt dann für die Transportgrößen, während die Teilchenenergie konstant ist (s. Glg. (6.37)):

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= 0, \quad \vec{u} = 0, \\ W &= \frac{3}{2} n k_B T_0.\end{aligned}\quad (7.4)$$

Lokales Gleichgewicht

Im lokalen Gleichgewicht liegt ein durch äußere Kräfte driftendes System vor, die globale Verteilungsfunktion wird durch eine formal gleiche Funktion mit allerdings ortsabhängigen Variablen ersetzt. Damit ergibt sich eine ortsabhängige Gleichgewichtsverteilung $f^0(\vec{r})$. Der Wellenvektor des Systems ist jetzt

$$\vec{k} = \vec{k}_u + \vec{\xi}. \quad (7.5)$$

Diesmal verschwinden alle Integrale ungerader Momente in $\vec{\xi}$, Transportgrößen bleiben dabei im Wesentlichen erhalten. Die Energie aber enthält nun auch einen kinetischen Anteil der Driftbewegung (vgl. Gleichungen (6.37) und (7.4))

$$W = \frac{3}{2} n k_B T + \frac{1}{2} m n u^2. \quad (7.6)$$

Im lokalen Gleichgewicht gibt es dagegen weiterhin keinen Wärmestromvektor \vec{q} nach Gleichung (6.27), was in inhomogenen Halbleiterstrukturen kein adäquates Modell ist. Deshalb muss für den Wärmestrom auf eine lokal gestörte Verteilung zurückgegriffen werden.

Lokal gestörte Maxwell-Verteilung

In inhomogenen Halbleitern führen Temperaturgradienten zu Energieflüssen durch Konvektion, so dass größere Abweichungen von der lokalen Maxwell-Verteilung zu verzeichnen sind. Aus diesem Grunde muss das lokale Gleichgewicht durch einen geeigneten Störterm erweitert werden. Dieser wird aus der Boltzmann-Gleichung hergeleitet, indem zunächst der Kollisionsterm durch einen Relaxationszeit-Ansatz modelliert wird:

$$\dot{f} + \frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f - \frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f = -\frac{f - f^0}{\tau}. \quad (7.7)$$

Unter Annahme einer zeitlich langsam veränderlichen Verteilungsfunktion wird der Ansatz

$$f = f^0 + f^1 \quad (7.8)$$

eingeführt, der einer linearen Antwort des Systems auf die Störung entspricht. So ergibt sich ein Fixpunktproblem der Form

$$f^1 = -\tau \left[\frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} (f^0 + f^1) - \frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} (f^0 + f^1) \right]. \quad (7.9)$$

Befindet sich das System nahe des Gleichgewichts, so wirken nur kleine Störungen, was die Näherung

$$f^0 + f^1 \approx f^0 \quad (7.10)$$

rechtfertigt. Der Störungsansatz wird deshalb zu

$$f^1 = -\tau \left[\frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f^0 - \frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f^0 \right]. \quad (7.11)$$

Damit kann ein Wärmestrom berücksichtigt werden, der entweder durch die nächsthöhere Momentengleichung für den Energiefluss im hydrodynamischen Modell beschrieben ist oder dessen Näherung für hinreichend kleine Relaxationszeiten einen Abbruch der Hierarchie schon nach der Energiegleichung ermöglicht. Letzterer Fall bedeutet, dass der relative Wärmestrom ein rein thermischer Wärmestrom ist, was phänomenologischen Ansätzen, wie dem Wiedemann-Franz- oder dem Fourier-Gesetz, entspricht. Drucktensor P und Wärmekonvektionsvektor \vec{q} sind dann

$$P \approx -nk_B T_0 \quad \text{und} \quad (7.12)$$

$$\vec{q} \approx -\frac{5}{2} \frac{\tau_p}{m} nk_B^2 T \nabla T. \quad (7.13)$$

7.2 Erwartungswerte und Erhaltungsgleichungen bei linearer Antwort

Im Folgenden wird für die Verteilungsfunktion von der Näherung in Gleichung (7.11) ausgegangen

$$f = f^0 - \tau \left[\frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f^0 - \frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f^0 \right], \quad (7.14)$$

die bei der Bestimmung der Erwartungswerte für die Teilchendichte (5.29), die Stromdichte (5.30/5.33) und die Energiedichte (5.31) genutzt wird. Außerdem folgt die Berechnung des Erwartungswerts des Wärmestroms, welcher schon aus Gleichung (6.27) bekannt ist. In diesem Abschnitt kommt bei der Bildung der Erwartungswerte noch ein Faktor 2 für die Spinabhängigkeit hinzu, der den Vorfaktor $1/(4\pi^3)$ erklärt, für die Erhaltungsgleichungen jedoch keine Rolle spielt (Berechnungen für Elektronen!):

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int f(\vec{r}, \vec{k}) d^3k, \quad (7.15)$$

$$\vec{J}(\vec{r}) = -\frac{e}{4\pi^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m} f(\vec{r}, \vec{k}) d^3k, \quad (7.16)$$

$$W(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f(\vec{r}, \vec{k}) d^3k, \quad (7.17)$$

$$\vec{Q}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^3 \vec{k}^3}{2m^2} f(\vec{r}, \vec{k}) d^3k. \quad (7.18)$$

Für die Gleichgewichtsverteilung f^0 kommt einerseits vereinfacht die Boltzmann-Statistik

$$f^0(\vec{r}, \vec{k}) = \exp\left(-\frac{E_c(\vec{r}, \vec{k}) - E_F(\vec{r})}{k_B T(\vec{r})}\right) \quad \text{mit} \quad (7.19)$$

$$E_c(\vec{r}, \vec{k}) = E_{c,0} - q\Psi(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

in Frage, oder aber genauer die Fermi-Statistik

$$f^0(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_c(\vec{r}, \vec{k}) - E_F(\vec{r})}{k_B T(\vec{r})}\right) + 1}. \quad (7.20)$$

Hier enthält Ψ die Ortsabhängigkeit der Potenzialenergie, damit eine klare Trennung der Abhängigkeiten für die folgenden Rechnungen gegeben ist. In beiden Fällen ist die Gleichgewichtsverteilung symmetrisch in \vec{k} , so dass das Integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{k}^{2n+1} f^0 d^3k = 0 \quad \text{mit} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.21)$$

verschwindet. Außerdem folgt aus dem Verlauf der Verteilungsfunktion, dass das Integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{k}^n \nabla_k f^0 d^3k \quad \text{mit} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

mithilfe der partiellen Integration wegen

$$\lim_{k \rightarrow \pm\infty} \frac{\vec{k}^n}{\exp\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T}\right)} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \lim_{k \rightarrow \pm\infty} \frac{\vec{k}^n}{z \exp\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T}\right) + 1} = 0$$

zu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{k}^n \nabla_k f^0 d^3k = - \int_{-\infty}^{+\infty} (\nabla_k \vec{k}^n) f^0 d^3k \quad (7.22)$$

wird. Diese Eigenschaften vereinfachen die Herleitungen wesentlich.

Die Gleichungen (7.14) bis (7.22) bilden das Rüstzeug für die Berechnungen der Erwartungswerte und der Erhaltungsgleichungen in den beiden folgenden Abschnitten.

7.2.1 Boltzmann-Statistik

Die einfache Form der Boltzmann-Verteilung erlaubt geschlossene Lösungen der Integrale, eröffnet aber auch die Möglichkeit, Strom und Energiedichte auf Ausdrücke, die die Teilchendichte enthalten, zurückzuführen.

Für die *Teilchendichte* (7.15) ergibt sich folgende Rechnung (falls nicht anders angegeben bedeuten die unbestimmten Integralzeichen eine Integration im k -Raum von $-\infty$ bis $+\infty$):

$$\begin{aligned} n(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi^3} \int f d^3k = \frac{1}{4\pi^3} \left[\int f^0 d^3k - \underbrace{\frac{\tau\hbar}{m} \int \vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0 d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} + \underbrace{\frac{\tau \nabla_{\vec{r}} V}{\hbar} \int \nabla_{\vec{k}} f^0 d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.22)}} \right] \\ &= \frac{1}{4\pi^3} \int f^0 d^3k \\ &= \underbrace{2 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}}_N \exp \left(-\frac{E_{c,0} - q\Psi - E_F}{k_B T} \right) \quad \text{mit} \quad \int e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (7.23) \end{aligned}$$

Nicht ganz so einfach lässt sich die *Stromdichte* bestimmen, da hier die Korrekturterme der Verteilungsfunktion entscheidend sind:

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{r}) &= -\frac{e}{4\pi^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m} f d^3k \\ &= -\frac{e\hbar}{4\pi^3 m} \left[\underbrace{\int \vec{k} f^0 d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} - \underbrace{\frac{\tau\hbar}{m} \int \vec{k} (\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) d^3k}_I + \underbrace{\frac{\tau}{\hbar} \int \vec{k} (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}} f^0) d^3k}_{II} \right]. \end{aligned}$$

Term I:

$$\begin{aligned} \int \vec{k} (\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) d^3k &= \int (\vec{k} \vec{k}^T) \nabla_{\vec{r}} f^0 d^3k = \nabla_{\vec{r}} \int (\vec{k} \vec{k}^T) f^0 d^3k = \nabla_{\vec{r}} \underbrace{\int \begin{pmatrix} k_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_z^2 \end{pmatrix} f^0 d^3k}_{\text{wg. (7.21)}} \\ &= \nabla_{\vec{r}} \left(\frac{4\pi^3 m k_B T}{\hbar^2} n \right) \quad \text{mit} \quad \int x^2 e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{4a^3}}. \end{aligned}$$

Term II:

$$\int \vec{k} (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}} f^0) d^3k = - \underbrace{\int f^0 (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}}) \vec{k} d^3k}_{\text{wg. (7.22)}} = -\nabla_{\vec{r}} V \int f^0 d^3k = -4\pi^3 n \nabla_{\vec{r}} V.$$

So wird die Stromdichte nun

$$\boxed{\vec{J}(\vec{r}) = \frac{e\tau}{m} (n \nabla_{\vec{r}} V + k_B T \nabla_{\vec{r}} n + n k_B \nabla_{\vec{r}} T)} \quad (7.24)$$

und enthält Drift- und Diffusions-Term sowie auch den Temperaturgradienten, der zum Stromfluss beiträgt.

Die *Energiedichte* dagegen berechnet sich, ähnlich wie die Teilchendichte, wieder aus der Gleichgewichtsfunktion:

$$\begin{aligned} W(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} f d^3k \\ &= \frac{\hbar^2}{8\pi^3 m} \left[\int \vec{k}^2 f^0 d^3k - \underbrace{\frac{\tau \hbar}{m} \int \vec{k}^2 \vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0 d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} + \underbrace{\frac{\tau \nabla_{\vec{r}} V}{\hbar} \int \vec{k}^2 \nabla_{\vec{k}} f^0 d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.22) und (7.21)}} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{8\pi^3 m} \int \vec{k}^2 f^0 d^3k \\ &= \boxed{\frac{3}{2} n k_B T}. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Schließlich folgt noch der *Wärmestromvektor* als die Variable, welche den Abbruch der Gleichungshierarchie ermöglicht. Wie beim Strom sind es die Korrekturterme, die den Wärmestrom bestimmen

$$\begin{aligned} \vec{Q}(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^3 \vec{k}^3}{2m^2} f d^3k \\ &= \frac{\hbar^3}{8\pi^3 m^2} \left[\underbrace{\int \vec{k}^3 f^0 d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} - \underbrace{\frac{\tau \hbar}{m} \int \vec{k}^3 (\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) d^3k}_{\text{I}} + \underbrace{\frac{\tau}{\hbar} \int \vec{k}^3 (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}} f^0) d^3k}_{\text{II}} \right]. \end{aligned}$$

Term I:

$$\begin{aligned} \int \vec{k}^3 (\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) d^3k &= \int \vec{k}^2 (\vec{k} \vec{k}^T) \nabla_{\vec{r}} f^0 d^3k = \nabla_{\vec{r}} \int \vec{k}^2 (\vec{k} \vec{k}^T) f^0 d^3k \\ &= \nabla_{\vec{r}} \int \vec{k}^2 \underbrace{\begin{pmatrix} k_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_z^2 \end{pmatrix}}_{\text{wg. (7.21)}} f^0 d^3k \\ &= 4\pi^3 \cdot 5 \frac{m^2}{\hbar^4} \nabla_{\vec{r}} (n (k_B T)^2) \quad \text{mit} \quad \int x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4a^{5/2}}. \end{aligned}$$

Term II:

$$\begin{aligned}
 \int \vec{k}^3 (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}} f^0) d^3 k &= - \underbrace{\int f^0 (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}}) \vec{k}^3 d^3 k}_{\text{wg. (7.22)}} \\
 &= - \nabla_{\vec{r}} V \underbrace{\int \begin{pmatrix} 3k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_x^2 + 3k_y^2 + k_z^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_x^2 + k_y^2 + 3k_z^2 \end{pmatrix} f^0 d^3 k}_{\text{wg. (7.21)}} \\
 &= -4\pi^3 \cdot 5 \frac{m}{\hbar^2} n k_B T \nabla_{\vec{r}} V.
 \end{aligned}$$

Der Wärmestrom ergibt daher

$$\boxed{\vec{Q}(\vec{r}) = -\frac{5}{2} n \frac{\tau}{m} (k_B T)^2 \left(\frac{\nabla_{\vec{r}} V}{k_B T} + \frac{\nabla_{\vec{r}} n}{n} + 2 \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)}. \quad (7.26)$$

Häufig wird dieser Erwartungswert als rein thermischer Wärmestrom genähert und dann nur der letzte Term verwandt.

Nach den Erwartungswerten sollen nun deren *Erhaltungsgleichungen* ermittelt werden. Im Wesentlichen kann dabei auf die obigen Rechnungen zurückgegriffen werden. Ausgangspunkt ist die Gleichung (7.7), in der die rechte Seite vereinfacht Null ist:

$$\dot{f} + \frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f - \frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f = 0. \quad (7.27)$$

Auf diese Gleichung werden die Funktionele (7.15) bis (7.17) angewandt, die zu entsprechenden Erhaltungsgleichungen der jeweiligen, in diesen Funktionalen definierten Größen führen.

Den Auftakt macht die Teilchenerhaltung

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{4\pi^3} \int \dot{f} d^3 k + \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f d^3 k - \underbrace{\frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f d^3 k}_{=0 \text{ wg. (7.22) und (7.21)}} &= 0 \\
 \Leftrightarrow \boxed{\dot{n} - \frac{1}{e} \nabla_{\vec{r}} \vec{J} = 0}, \quad (7.28)
 \end{aligned}$$

die zur bekannten Kontinuitätsgleichung führt. Als Gleichung für die Stromdichte ergibt sich

$$\begin{aligned}
 -\frac{e}{4\pi^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m} \dot{f} d^3 k - \frac{e}{4\pi^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m} \left(\frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f \right) d^3 k + \frac{e}{4\pi^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m} \left(\frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \right) d^3 k &= 0 \\
 \Leftrightarrow \vec{J} - \frac{e}{m} \nabla_{\vec{r}} (n k_B T) - \frac{e}{m} n \nabla_{\vec{r}} V &= 0 \quad (7.29)
 \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\vec{J} - \frac{2}{3} \frac{e}{m} \nabla_{\vec{r}} W - \frac{e}{m} n \nabla_{\vec{r}} V = 0}. \quad (7.30)$$

Die Energiegleichung schließlich ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f \, d^3k + \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} f \right) d^3k - \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r})}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \right) d^3k = 0, \\ \Leftrightarrow \boxed{\dot{W} + \nabla_{\vec{r}} \vec{Q} - \frac{\vec{J}}{e} \nabla_{\vec{r}} V = 0}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

7.2.2 Fermi-Statistik

Wie sieht das Transportmodell aber für Fermi-Statistik aus? In der Boltzmann-Statistik ist eine Exponentialfunktion enthalten, die zu einfachen Lösungen führt. Es stellt sich jetzt schnell heraus, dass die Integrale in den Erwartungswertbildungen für die Fermi-Funktion nicht mehr geschlossen zu lösen sind. Deshalb werden die so genannten Fermi-Integrale (s. Anhang A.4) benötigt, für die es numerische Näherungsverfahren gibt. Mit der Teilchendichte beginnend werden die Berechnungen im Folgenden ausführlich dargestellt. Der Ansatz für die *Teilchendichte* unterscheidet sich zunächst nicht von der Rechnung für die Boltzmann-Statistik (Abschnitt 7.2.1):

$$\begin{aligned} n(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi^3} \int f \, d^3k = \frac{1}{4\pi^3} \left[\int f^0 \, d^3k - \underbrace{\frac{\tau \hbar}{m} \int \vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0 \, d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} + \underbrace{\frac{\tau \nabla_{\vec{r}} V}{\hbar} \int \nabla_{\vec{k}} f^0 \, d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.22)}} \right] \\ &= \frac{1}{4\pi^3} \int f^0 \, d^3k. \end{aligned}$$

Die Verteilungsfunktion f^0 aber besitzt eine andere Form und macht folgende Rechnung notwendig, die die Funktion in Kugelkoordinaten (A.3) transformiert:

$$\int f^0 \, d^3k = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty f^0 k^2 \sin \theta \, dk \, d\varphi \, d\theta.$$

Die Transformation in die Energievariable E_c

$$\begin{aligned} E_c = E_{c,0} - q\Psi + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Leftrightarrow \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_c - E_{c,0} + q\Psi)}; \\ E_c \geq E_{c,0} - q\Psi; \quad dk = \frac{m}{\hbar^2} \frac{dE_c}{k} \end{aligned}$$

liefert:

$$\begin{aligned} \int f^0 \, d^3k &= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_{E_{c,0}-q\Psi}^\infty f^0 \frac{m}{\hbar^2} k \sin \theta \, dE_c \, d\varphi \, d\theta \\ &= 4\pi \int_{E_{c,0}-q\Psi}^\infty f^0 \frac{m}{\hbar^2} k \, dE_c, \end{aligned}$$

da f^0 selbst von φ und θ unabhängig ist. Hier bietet sich die Verschiebung der Energie durch

$$\tilde{E} = E_c - E_{c,0} + q\Psi; \quad dE_c = d\tilde{E}$$

an, um die Integrationsgrenzen an die Fermi-Integrale anzupassen. Schließlich wird die Energie noch auf die Temperatur

$$E = \tilde{E}/(k_B T); \quad dE = d\tilde{E}/(k_B T)$$

normiert:

$$\int f^0 d^3k = 4\pi \frac{mk_B T}{\hbar^2} \int_0^\infty k f^0 dE.$$

Der Integralkern selbst hat mittlerweile die Form

$$k f^0 = \sqrt{\frac{2mk_B T}{\hbar^2}} \frac{\sqrt{E}}{e^{E-a} + 1} \quad \text{mit} \quad a = \frac{E_F - E_{c,0} + q\Psi}{k_B T}$$

angenommen. Dies führt letztlich zu

$$\begin{aligned} \int f^0 d^3k &= 4\pi \frac{mk_B T}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2mk_B T}{\hbar^2}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E}}{e^{E-a} + 1} dE \\ &= 4\pi^3 \cdot 2 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E}}{e^{E-a} + 1} dE \\ &= 4\pi^3 N F_{1/2}(a) \end{aligned}$$

mit dem Fermi-Integral $F_{1/2}(a)$ (Anhang A.4). Das Ergebnis für die Teilchendichte lautet somit

$$\boxed{n(\vec{r}) = N F_{1/2}(a) = N F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_{c,0} + q\Psi}{k_B T} \right)}. \quad (7.32)$$

Auch bei der Berechnung des *Stromes* kann auf bei Boltzmann-Statistik gültige Ansätze zugegriffen werden:

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{r}) &= -\frac{e}{4\pi^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m} f d^3k \\ &= -\frac{e\hbar}{4\pi^3 m} \left[\underbrace{\int \vec{k} f^0 d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} - \frac{\tau\hbar}{m} \underbrace{\int \vec{k} (\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0) d^3k}_I + \frac{\tau}{\hbar} \underbrace{\int \vec{k} (\nabla_{\vec{r}} V \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0) d^3k}_{II} \right]. \end{aligned}$$

Term II kann direkt angegeben werden, da das Integral wieder auf die Teilchendichte zurückgeht:

$$\int \vec{k} (\nabla_{\vec{r}} V \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0) d^3k = -4\pi^3 n \nabla_{\vec{r}} V.$$

Das gilt auch teilweise für Term I:

$$\int \vec{k}(\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) d^3k = \nabla_{\vec{r}} \int \begin{pmatrix} k_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_z^2 \end{pmatrix} f^0 d^3k = \underbrace{\nabla_{\vec{r}} \int k_x^2 f^0 d^3k}_{\text{aus Symmetriegründen}} \quad .$$

Die Transformationen bei der Berechnung der Teilchendichte können ebenfalls wieder genutzt werden. Damit wird Term I wegen

$$\begin{aligned} \int k_x^2 f^0 d^3k &= \frac{4}{3} \pi \frac{mk_B T}{\hbar^2} \int_0^\infty \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{E^{3/2}}{e^{E-a} + 1} dE \\ &= 4\pi^3 \frac{mk_B T}{\hbar^2} \cdot 2 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{E^{3/2}}{e^{E-a} + 1} dE \\ &= 4\pi^3 \frac{mk_B T}{\hbar^2} \text{NF}_{3/2}(a) \end{aligned}$$

zu

$$\int \vec{k}(\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) d^3k = \nabla_{\vec{r}} \left(4\pi^3 \frac{mk_B T}{\hbar^2} \text{NF}_{3/2}(a) \right)$$

und die Stromdichte schließlich

$$\boxed{\vec{J}(\vec{r}) = \frac{e\tau}{m} \left(n \nabla_{\vec{r}} V + k_B T \nabla_{\vec{r}} \left(\text{NF}_{3/2}(a) \right) + \text{NF}_{3/2}(a) k_B \nabla_{\vec{r}} T \right)} \quad (7.33)$$

$$= \frac{e\tau}{m} \left(n \nabla_{\vec{r}} V + \frac{2}{3} \nabla_{\vec{r}} W \right). \quad \text{vgl. Gl. (7.36)} \quad (7.34)$$

Spätestens hier überschreiten wir den bei Selberherr [22] angegebenen Gültigkeitsbereich. Gelegentlich wird die Stromdichte jedoch auch mithilfe des Fermi-Potenzials angegeben [48]. Um sie in eine solche Form bringen zu können, müssen zunächst die Ableitungen der Verteilungsfunktion in Gleichung (7.14) explizit berechnet werden, für Fermi-Statistik sind das

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{r}} f^0 &= f^0(1-f^0) \frac{k_B T \nabla_{\vec{r}}(E_F - E_c) + (E_c - E_F) k_B \nabla_{\vec{r}} T}{(k_B T)^2} \quad \text{und} \\ \nabla_{\vec{k}} f^0 &= -f^0(1-f^0) \frac{\hbar^2 \vec{k}}{mk_B T}. \end{aligned}$$

Die Verteilungsfunktion lautet dann

$$f = f^0 + \frac{\tau}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f^0 \nabla_{\vec{r}} E_F + \frac{\tau}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f^0 (E_c - E_F) \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T},$$

was zu der Stromdichte

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{e\tau}{m} \left[n \nabla_{\vec{r}} E_F + n(E_{c,0} - q\Psi - E_F) \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} + \frac{5}{2} k_B T \text{NF}_{3/2}(a) \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right] \quad (7.35)$$

führt.

Die *Energiedichte* kann erneut über die Gleichgewichtsfunktion ermittelt werden:

$$\begin{aligned}
 W(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} f \, d^3k \\
 &= \frac{\hbar^2}{8\pi^3 m} \left[\int \vec{k}^2 f^0 \, d^3k - \underbrace{\frac{\tau \hbar}{m} \int \vec{k}^2 \vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0 \, d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} + \underbrace{\frac{\tau \nabla_{\vec{r}} V}{\hbar} \int \vec{k}^2 \nabla_{\vec{k}} f^0 \, d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.22) und (7.21)}} \right] \\
 &= \frac{\hbar^2}{8\pi^3 m} \int \vec{k}^2 f^0 \, d^3k.
 \end{aligned}$$

In ähnlicher Form ist dieser Integralkern aus der Stromdichte bekannt und schnell kann das Ergebnis für die Energiedichte zu

$$\boxed{W(\vec{r}) = \frac{3}{2} k_B T N F_{3/2}(a)} \quad (7.36)$$

angegeben werden. Insbesondere hier wird deutlich, dass sich der Erwartungswert nicht wie bei der Boltzmann-Statistik (vgl. Gl. (7.25)) auf die Teilchendichte zurückführen lässt, da sich die Form des Integrals (s. $F_{3/2}$) verändert.

Schließlich bestimmen den *Wärmestrom* wieder die Korrekturterme

$$\begin{aligned}
 \vec{Q}(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^3 \vec{k}^3}{2m^2} f \, d^3k \\
 &= \frac{\hbar^3}{8\pi^3 m^2} \left[\underbrace{\int \vec{k}^3 f^0 \, d^3k}_{=0 \text{ wg. (7.21)}} - \underbrace{\frac{\tau \hbar}{m} \int \vec{k}^3 (\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) \, d^3k}_I + \underbrace{\frac{\tau}{\hbar} \int \vec{k}^3 (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}} f^0) \, d^3k}_{II} \right].
 \end{aligned}$$

Term I:

$$\begin{aligned}
 \int \vec{k}^3 (\vec{k} \nabla_{\vec{r}} f^0) \, d^3k &= \nabla_{\vec{r}} \int \vec{k}^2 (\vec{k} \vec{k}^T) f^0 \, d^3k \\
 &= \nabla_{\vec{r}} \int \vec{k}^2 \underbrace{\begin{pmatrix} k_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_z^2 \end{pmatrix}}_{\text{wg. (7.21)}} f^0 \, d^3k \\
 &= \nabla_{\vec{r}} \int \underbrace{(k_x^4 + 2k_x^2 k_y^2) f^0 \, d^3k}_{\text{aus Symmetriegründen}} \\
 &= -4\pi^3 \nabla_{\vec{r}} \left(5 \frac{m^2}{\hbar^4} (k_B T)^2 N F_{5/2}(a) \right)
 \end{aligned}$$

mit der Integration (beispielhaft für den ersten Term)

$$\int k_x^4 f^0 \, d^3k = \frac{4}{5} \pi \frac{m k_B T}{\hbar^2} \int_0^\infty \left(\frac{2m k_B T}{\hbar^2} \right)^{5/2} \frac{E^{5/2}}{e^{E-a} + 1} \, dE$$

$$\begin{aligned}
&= 4\pi^3 \cdot 3 \left(\frac{mk_B T}{\hbar^2} \right)^2 \cdot 2 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{8}{15\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{E^{5/2}}{e^{E-a} + 1} dE \\
&= 4\pi^3 \cdot 3 \left(\frac{mk_B T}{\hbar^2} \right)^2 NF_{5/2}(a).
\end{aligned}$$

Term II:

$$\begin{aligned}
\int \vec{k}^3 (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}} f^0) d^3 k &= - \underbrace{\int f^0 (\nabla_{\vec{r}} V \nabla_{\vec{k}}) \vec{k}^3 d^3 k}_{\text{wg. (7.22)}} \\
&= -\nabla_{\vec{r}} V \underbrace{\int \begin{pmatrix} 3k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_x^2 + 3k_y^2 + k_z^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_x^2 + k_y^2 + 3k_z^2 \end{pmatrix} f^0 d^3 k}_{\text{wg. (7.21)}} \\
&= -\nabla_{\vec{r}} V \underbrace{\int 5k_x^2 f^0 d^3 k}_{\text{aus Symmetriegründen}} \\
&= -4\pi^3 \cdot 5 \frac{m}{\hbar^2} k_B T NF_{3/2}(a) \nabla_{\vec{r}} V.
\end{aligned}$$

Der Wärmestrom ist damit

$$\boxed{\vec{Q}(\vec{r}) = -\frac{5}{2} \frac{\tau}{m} (k_B T)^2 \left[\frac{\nabla_{\vec{r}} V}{k_B T} NF_{3/2}(a) + \nabla_{\vec{r}} \left(NF_{5/2}(a) \right) + 2 NF_{5/2}(a) \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right]}. \quad (7.37)$$

Wieder werden die *Erhaltungsgleichungen* berechnet, die, vom Inhalt der Erwartungswerte abgesehen, denen der Boltzmann-Statistik entsprechen:

$$\boxed{
\begin{aligned}
\dot{n} - \frac{1}{e} \nabla_{\vec{r}} \vec{J} &= 0, \\
\dot{\vec{J}} - \frac{e}{m} \nabla_{\vec{r}} \left(k_B T NF_{3/2}(a) \right) - \frac{e}{m} n \nabla_{\vec{r}} V &= 0 \\
\Leftrightarrow \dot{\vec{J}} - \frac{2}{3} \frac{e}{m} \nabla_{\vec{r}} W - \frac{e}{m} n \nabla_{\vec{r}} V &= 0, \\
\dot{W} + \nabla_{\vec{r}} \vec{Q} - \frac{\vec{J}}{e} \nabla_{\vec{r}} V &= 0.
\end{aligned}
} \quad (7.38)$$

Der Gleichungssatz stellt eine linearisierte Form des hydrodynamischen Modells aus Abschnitt 6.2 (von Quantenkorrekturen wurde hier abgesehen) in Konsistenz mit dem Relaxationsansatz und dem Abbruch der Gleichungshierarchie dar. Diese Näherungen sind in der Implementierung der Strom- (Abschnitt 8.2.2) und Energiegleichung (Abschnitt 8.3) berücksichtigt.

8 Die Implementierungsgleichungen

Überblick: Die Poisson-Gleichung wird gemäß dem **Gummel-Algorithmus** implementiert. Die **linearisierten Stromdichten** können direkt in die Kontinuitätsgleichung integriert werden, wobei der Variablensatz weder die Teilchendichten noch die Quasi-Fermi-Niveaus explizit enthält. Vielmehr wird ein **exponentieller** Ansatz für die Quasi-Fermi-Potenziale gewählt, der sich numerisch wesentlich günstiger verhält. Abschließend ist die Implementierung des gemittelten Quantenpotenzials beschrieben.

Die Halbleitergleichungen sollen mit einem iterativen Verfahren gelöst werden, wozu eine geeignete Startlösung nötig ist. Als solche dient die Lösung des thermodynamischen Gleichgewichts des Halbleiters, bei dem die Kontinuitäts- und die Temperaturgleichungen nicht berücksichtigt werden müssen, sondern nur die Poisson-Gleichung.

Ausgehend von dieser Startlösung berechnet das Programm nun den stationären Zustand des Halbleiters, indem durch kleine Spannungserhöhungen mit dem vorherigen Zustand als Ausgangspunkt die Verhältnisse bei angelegter Spannung berechnet werden.

Wichtig ist, dass die Quantenkorrektur jeweils ebenso iterativ in den Fluss eingebunden werden. Dies muss für die Potenzialkorrektur selbstkonsistent geschehen.

Bild 8.1 stellt diesen Programmfluss schematisch dar.

8.1 Implementierung der Poisson-Gleichung

Gummel und Scharfetter haben einen effizienten Algorithmus zur Lösung der Poisson-Gleichung angegeben [49, 50, 51]. Entscheidend dabei ist der Ansatz für das Potenzial Ψ

$$\Psi = \Psi_0 + \delta\Psi. \quad (8.1)$$

Das Potenzial errechnet sich aus dem Wert des letzten Iterationsschrittes Ψ_0 und einer kleinen Veränderung $\delta\Psi$, die in dem aktuellen Schritt berechnet wird.

Allerdings stellt sich die Frage, wie mit den Ladungsträgerdichten umzugehen ist, die für den aktuellen Schritt noch nicht bekannt sind. Hier ist eine Taylor-Entwicklung um Ψ_0 angebracht, die nach dem zweiten Glied abbricht, was zu einer Dämpfung der entstehenden Schwingung führt. Diese Unterrelaxation ist für die Iteration vorteilhaft. Darüber hinaus wird für das zweite Glied die Boltzmann-Näherung $F_{1/2}(x) \approx e^x$ verwandt, was bei hohen Teilchendichten eine weitere Dämpfung bringt, Überschwinger werden vermindert. Dies ergibt Näherungen für die Teilchendichten des aktuellen Schrittes, in denen nur noch die entsprechenden bekannten alten Werte und das $\delta\Psi$ vorkommen, welches hier berechnet

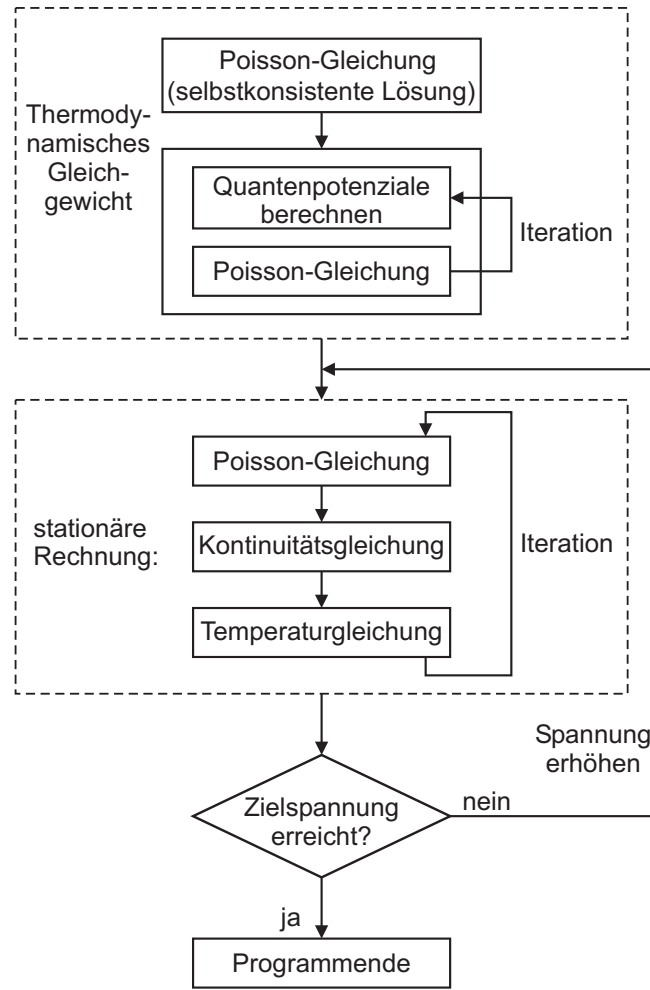


Abbildung 8.1: Programmfluss des QHD

werden soll:

$$n|_{\Psi} = n|_{\Psi_0} + \frac{e}{k_B T} n|_{\Psi_0} \delta\Psi \quad \text{und} \quad (8.2)$$

$$p|_{\Psi} = p|_{\Psi_0} - \frac{e}{k_B T} p|_{\Psi_0} \delta\Psi. \quad (8.3)$$

Eingesetzt in die Poisson-Gleichung liefert die Gleichung

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \cdot \delta\Psi) - \frac{e^2}{k_B T} \delta\Psi (n + p) = -e(p - n + N_D - N_A) - \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \cdot \Psi_0) \quad (8.4)$$

das $\delta\Psi$, was dann zu dem vorherigen Wert Ψ_0 hinzuaddiert wird und damit die Lösung für diesen Iterationsschritt ergibt.

8.2 Kontinuitätsgleichung

Es hat sich bewährt, die Stromgleichungen direkt mit der Kontinuitätsgleichung zu koppeln. Aus der Stromgleichung wird also ein Ansatz für die Stromdichte entwickelt, welcher in der Kontinuitätsgleichung verwandt werden kann. Die Stromdichte selbst ist

deshalb nur indirekt Lösungsvariable des Gleichungssatzes, vielmehr werden die Quasi-Fermi-Niveaus diese Rolle übernehmen. So wird im Folgenden auf die tatsächliche Wahl des expliziten Variablensatzes eingegangen, der schon bei der Simulation von Elektroabsorptionsmodulatoren eine wichtige Rolle gespielt hat [47, 52]. Im Gegensatz zu diesen vorangegangenen Untersuchungen ist allerdings zusätzlich eine Abhängigkeit der Gleichungen von der Temperatur zu beachten, weshalb die Gleichungen eine etwas andere Form zeigen, als dies bei den Modulatoren der Fall war.

Es gibt demnach verschiedene Variablensätze, die unterschiedliche numerische Eigenschaften haben und daher für die Stabilität der Iteration wichtig sind. Deshalb werden diese zunächst vorgestellt.

Anschließend wird die Stromgleichung derart linearisiert, dass ein geschlossener Ausdruck für den Strom resultiert, welcher in die Kontinuitätsgleichung eingesetzt werden kann.

8.2.1 Mögliche Variablensätze

Bisher lagen die Halbleitergleichungen in der üblichen Form und damit mit dem Variablensatz (Ψ, n, p) vor. Selberherr [22] bevorzugt diese klassische Form. Aber er stellt auch andere Sätze vor, die ihre Vor- und Nachteile haben.

So ergibt sich die Verwendung der Variablen (Ψ, Φ_e, Φ_h) direkt aus den Stromgleichungen des Drift-Diffusions-Modells [22]. Der Zusammenhang mit dem klassischen Satz ist schon aus der Formulierung der Ladungsträgerdichten der Gleichungen (4.19) und (4.20) bekannt. In dem η steckt das Quasi-Fermi-Potenzial Φ :

$$n = N_e F_{1/2}(\eta_e), \quad (8.5)$$

$$p = N_h F_{1/2}(-\eta_h), \quad (8.6)$$

$$\eta = \frac{1}{k_B T} (W_{Fi} - e\Phi - W_0 + e\Psi). \quad (8.7)$$

Dieser Variablensatz hat den Vorteil, dass alle Variablen in der gleichen Größenordnung liegen, so dass Stellenauslöschungen verhindert werden. Zudem sind negative Ladungsträgerdichten ausgeschlossen, unphysikalische Lösungen werden demnach vermieden. *Dies erkauft man sich allerdings damit, dass die Stromgleichungen exponentiell nichtlinear werden. Das macht diesen Variablensatz hier ungeeignet.*

Häufig wird der Variablensatz (Ψ, u, v) verwendet, mit

$$u = \exp\left(-\frac{e\Phi_e}{k_B T}\right) \quad \text{und} \quad (8.8)$$

$$v = \exp\left(\frac{e\Phi_h}{k_B T}\right). \quad (8.9)$$

Für den statischen Fall, in dem die Zeitableitungen der Kontinuitätsgleichungen (4.12) und (4.13) verschwinden, ergeben sich selbstadjungierte partielle Differenzialgleichungen, deren Lösung durch ausgereifte Algorithmen effizient durchgeführt werden kann. Leider hat auch dieser Variablensatz einen schwerwiegenden Nachteil: durch die exponentielle

Abhängigkeit ist der Größenordnungsbereich der Variablen enorm groß. Schwankt Ψ zwischen -1 V und 1 V, so ergibt sich für den Exponentialterm ein Unterschied von 32 Größenordnungen bei einer Temperatur von 300 K. Stellenauslöschungen wirken sich bei größeren Potenzialdifferenzen auf die Divergenzbildung aus, dieser Variablensatz ist also auf kleine Differenzen beschränkt, die aber in diesen Anwendungen zwischen zwei Punkten, die nah genug beieinander liegen, der Normalfall sind.

Der ausgedehnte Bereich der Größenordnungen lässt eine Äquilibration der Matrix sinnvoll erscheinen. Dazu wird normalerweise jede Gleichung des Systems $[A] \cdot \vec{x} = \vec{b}$ durch die Betragssumme der jeweiligen Zeile der Systemmatrix $[A]$ dividiert, so dass alle Zeilen die gleiche Betragssumme haben, unnötige Multiplikationen mit betragsmäßig großen Zahlen deshalb umgangen werden. In diesem Falle gibt es zwei abweichende Verfahren der Äquilibration, die diesen Zweck ebenso erfüllen. Eine einfache Skalierung mit der Matrix $[D]$, welche aus der Hauptdiagonalen der Matrix $[A]$ besteht, in folgender Art:

$$[D]^{-1}[A] \vec{x} = [D]^{-1}\vec{b} \quad (8.10)$$

bringt alle Werte in die Größenordnung um 1, in der die Exponentialfunktion nur einen leichten Anstieg aufweist. Andererseits ist es neben dieser zeilenweise angewandten Skalierung vorteilhaft, eine zeilen- und spaltenweise angewandte Skalierung durchzuführen, die die Symmetrie einer Matrix erhält, wobei dann der *Betrag* des Hauptdiagonalelementes von $[A]$ in $[D]$ eingehen sollte. Die Skalierung erfolgt nun nach

$$\left([D]^{-1/2}[A][D]^{-1/2}\right)[D]^{1/2}\vec{x} = [D]^{-1/2}\vec{b}. \quad (8.11)$$

Vergleiche haben gezeigt, dass für Rechnungen mit kleiner Vorspannung der Variablensatz (Ψ, u, v) den anderen überlegen ist [53]. *Er wird auch in dieser Arbeit angewendet.*

8.2.2 Linearisierung der Stromgleichungen

Die Stromdichten sind durch die zweite Momentengleichung (6.33) des hydrodynamischen Modells bestimmt. Für den Kollisionsterm wird ein Relaxationszeitanatz gewählt:

$$-\left(\frac{\partial \Pi}{\partial t}\right)_{coll.} = -\frac{\Pi}{\tau} = -\frac{m}{q\tau}J. \quad (8.12)$$

Weiterhin entfallen alle Terme, in denen der Strom quadratisch oder multipliziert mit seiner eigenen Ableitung eingeht. Was nach einer recht harten Einschränkung aussieht, lässt sich aber durch die Annahme des lokal gestörten Gleichgewichtes begründen, welches auch für den Abbruch der Gleichungshierarchie des QHD-Modells angesetzt wird. Somit führen diese Näherungen nur zu einer inneren Konsistenz der Gleichungen. Die entsprechende Herleitung der hydrodynamischen Gleichungen bei einer lokal gestörten Verteilungsfunktion zeigt Kapitel 7.

Mit der Temperaturspannung U_T und der bezogenen Temperatur r nach

$$U_T = \frac{k_B T}{e} \quad \text{und} \quad (8.13)$$

$$r = \frac{T}{T_0} \quad (8.14)$$

als Hilfsvariablen und den Beweglichkeiten der Ladungsträger gemäß

$$\mu_e = -q \frac{\tau_e}{m_e} \quad \text{und} \quad (8.15)$$

$$\mu_h = q \frac{\tau_h}{m_h} \quad (8.16)$$

werden die Stromdichten

$$\vec{J}_e = -q\mu_e n \vec{E} - q\mu_e U_T n \nabla r - q\mu_e U_T r \nabla n \quad \text{und} \quad (8.17)$$

$$\vec{J}_h = q\mu_h n \vec{E} - q\mu_h U_T p \nabla r - q\mu_h U_T r \nabla p. \quad (8.18)$$

Hier gilt es nun, eine Variablensubstitution so durchzuführen, dass der in Abschnitt 8.2.1 beschriebene Variablensatz (Ψ, u, v) verwendet wird.

$$u = \exp\left(-\frac{e\Phi_e}{k_B T}\right) \quad \text{und} \quad (8.19)$$

$$v = \exp\left(\frac{e\Phi_h}{k_B T}\right) \quad (8.20)$$

führen mit der Kettenregel zu den Ableitungen

$$\nabla \cdot \Phi_e = -U_T \left(r \frac{\nabla u}{u} + \ln u \nabla r \right) \quad \text{und} \quad (8.21)$$

$$\nabla \cdot \Phi_h = U_T \left(r \frac{\nabla v}{v} + \ln v \nabla r \right). \quad (8.22)$$

Es ist zudem sinnvoll, den Korrekturfaktor

$$\gamma(\eta) = F_{1/2}(\eta) / e^\eta, \quad (8.23)$$

der die Verknüpfung von Boltzmann- und Fermi-Statistik beschreibt, zu definieren, da im Folgenden die Ladungsträgerdichten der Gleichungen (4.19) und (4.20) eingesetzt werden müssen.

Die Abkürzungen

$$\Omega_e = \eta_e + \frac{e\Phi_e}{k_B T} + \ln(\gamma(\eta_e)) \quad \text{und} \quad (8.24)$$

$$\Omega_h = -\eta_h - \frac{e\Phi_h}{k_B T} + \ln(\gamma(-\eta_h)). \quad (8.25)$$

gestalten die entstehenden Gleichungen übersichtlicher. Die endgültige Formulierung der Stromdichten ist dann

$$\vec{J}_e = -q\mu_e U_T N_e e^\Omega_e \left[r \nabla u + \left(\frac{5}{2} - \Omega_e \right) u \nabla r \right] \quad \text{und} \quad (8.26)$$

$$\vec{J}_h = -q\mu_h U_T N_h e^\Omega_h \left[r \nabla v + \left(\frac{5}{2} - \Omega_h \right) v \nabla r \right]. \quad (8.27)$$

8.2.3 Formulierung der Kontinuitätsgleichungen

Die implementierte Form der Kontinuitätsgleichungen ergibt sich aus den Gleichungen (4.12) und (4.13), in denen die Stromdichte \vec{J} enthalten ist. Sie muss nur noch entsprechend den Gleichungen (8.26) und (8.27) eingesetzt werden. Ergebnis dieser Rechnung sind die Kontinuitätsgleichungen gemäß

$$\begin{aligned} U_T \nabla \cdot \left(\mu_e N_e e^{\Omega_e} \left[r \nabla u + \left(\frac{5}{2} - \Omega_e \right) u \nabla r \right] \right) &= R, \\ U_T \nabla \cdot \left(\mu_h N_h e^{\Omega_h} \left[r \nabla v + \left(\frac{5}{2} - \Omega_h \right) v \nabla r \right] \right) &= R. \end{aligned} \quad (8.28)$$

Hier tauchen keine Vorzeichenwechsel zwischen der Gleichung für die Elektronen und der der Löcher mehr auf, da diese schon in den Definitionen von Ω und u bzw. v enthalten sind. Es soll noch kurz bemerkt sein, dass mit Φ in dem Ω vermeintlich die Größe steckt, die eigentlich berechnet werden soll. Das ist nur scheinbar der Fall, da in η ebenfalls ein Φ mit umgekehrten Vorzeichen enthalten ist. Damit fällt es im Gegensatz zu dem Φ , welches noch im η des γ -Argumentes zu finden ist, weg. Hier kann ohne nennenswerten Fehler der Wert der letzten Iteration benutzt werden.

Die Diskretisierung erfolgt nach dem Drei-Punkte-Differenzen-Schema für Finite Differenzen gleichmäßiger Diskretisierungsweite. Hier sollte auf die Behandlung von e^{Ω} hingewiesen werden, welches nach

$$\begin{aligned} (\mu N e^{\Omega})|_{i-0,5} &= \frac{1}{2} \left((\mu N)|_{i-1} + (\mu N)|_i \right) \exp \left(\frac{1}{2} \left(\Omega|_{i-1} + \Omega|_i \right) \right) \quad \text{und} \\ (\mu N e^{\Omega})|_{i+0,5} &= \frac{1}{2} \left((\mu N)|_i + (\mu N)|_{i+1} \right) \exp \left(\frac{1}{2} \left(\Omega|_i + \Omega|_{i+1} \right) \right) \end{aligned} \quad (8.29)$$

diskretisiert wird. Dies ist eine einfache Interpolation von Ω und ergibt einen geringeren Fehler als eine Scharfetter-Gummel-Approximation wie in [50]. Auch der Mittelwertsatz der Integralrechnung und geometrisches, wie arithmetisches Mittel erweisen sich als ungünstiger.

Das entstehende Gleichungssystem kann, da es sich hier um Bandmatrizen handelt, mit sehr effizienten Lösungsverfahren berechnet werden.

8.2.4 Das Fermi-Integral

Im Allgemeinen lässt sich für das Fermi-Integral keine geschlossene Lösung finden, allerdings existieren ausreichend genaue Näherungen. Zwar sind Näherungen über den gesamten Definitionsbereich entwickelt worden, es finden hier aber auch asymptotische Näherungen Verwendung, die sich effizienter implementieren lassen. Folgende Näherungen haben einen maximalen relativen Fehler unterhalb 0,5%:

$$F_{1/2}(x) \approx \left(\sqrt[3]{4\pi} a^{-3/8} + \exp(-x) \right)^{-1} \quad (8.30)$$

mit

$$a = x^4 + 33,6x \{ 1 - 0,68 \exp(-0,17(x+1)^2) \} + 50$$

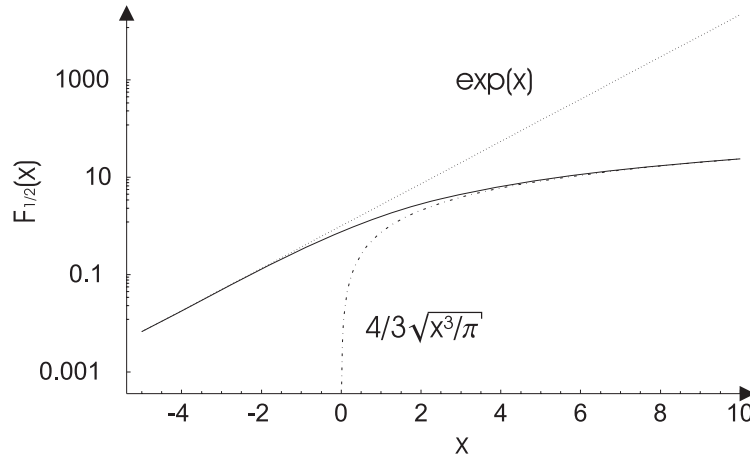


Abbildung 8.2: Asymptotische Näherungen für das Fermi-Integral

sowie die asymptotischen Näherungen

$$\begin{aligned} F_{1/2}(x) &\approx e^x && \text{für } x < -4,5 \quad \text{und} \\ F_{1/2}(x) &\approx \frac{4}{3} \sqrt{\frac{x^3}{\pi}} && \text{für } x > 16. \end{aligned} \quad (8.31)$$

Zur Veranschaulichung dient die Abbildung 8.2.

8.3 Formulierung der Energiegleichung

Die Verteilung der Energie bzw. die Verteilung der Temperatur wird durch die dritte Momentengleichung (6.34) des QHD-Modells festgelegt. Wieder wird der stationäre Fall betrachtet, wieder erfolgt eine Linearisierung der Gleichungen gemäß Kapitel 7. Der Kollisionsterm lautet

$$-\left(\frac{\partial W}{\partial t}\right)_{coll.} = -\frac{W - W_{eq}}{\tau_W} \approx \frac{1}{\tau_W} \left(\frac{3}{2} n k_B (T_0 - T)\right), \quad (8.32)$$

das System strebt somit mit der Zeitkonstanten für die Energie τ_W zur Gleichgewichtstemperatur T_0 .

Der Wärmestrom \vec{q} aus Gleichung (6.28) kann mit der Diffusionskonstante $D_{e,h}$

$$\vec{q}_e = -\frac{5}{2} D_e n k_B \nabla T \quad (8.33)$$

geschrieben werden. Dabei gilt:

$$D = \mu \frac{k_B T}{e}, \quad (8.34)$$

die Diffusionskonstante enthält also die eigentlich gesuchte Größe, die Temperatur T , soll aber als bekannte Größe in die Gleichung (6.34) eingehen. Es ist daher üblich, für die Temperatur in D nach (8.34) den zuletzt berechneten Wert anzunehmen. Die Diffusionskonstante ist auf den Zwischengitterplätzen definiert.

Wichtig für die Konsistenz des Modells und damit für die Stabilität ist die Wahl der gleichen Variablen wie in der Stromgleichung. Der Gradient der Stromdichte muss wie in der

Kontinuitätsgleichung (4.12) beschrieben durch die Netto-Rekombinations-Generationsrate nach

$$\nabla \cdot \vec{j} = -R \quad (8.35)$$

bestimmt sein. Mit den in Abschnitt 8.2.2 eingeführten Variablen u und v ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned} -\frac{5}{2}k_B T_0 \left(\nabla (D_e N_e e^{\eta_e} \nabla r) + \mu_e U_T N_e e^{\Omega_e} \left[r_{\text{alt}} \nabla u + \left(\frac{5}{2} - \Omega_e \right) u \nabla r_{\text{alt}} \right] \nabla r + r R \right) \\ + \frac{1}{\tau_W} \frac{3}{2} k_B T_0 N_e e^{\eta_e} r = \frac{1}{\tau_W} \frac{3}{2} k_B T_0 N_e e^{\eta_e} \quad (8.36) \\ + q \mu_e U_T N_e e^{\Omega_e} \left[r_{\text{alt}} \nabla u + \left(\frac{5}{2} - \Omega_e \right) u \nabla r_{\text{alt}} \right] \nabla \Psi \quad \text{und} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\frac{5}{2}k_B T_0 \left(\nabla (D_h N_h e^{-\eta_h} \nabla r) + \mu_h U_T N_h e^{\Omega_h} \left[r_{\text{alt}} \nabla v + \left(\frac{5}{2} - \Omega_h \right) v \nabla r_{\text{alt}} \right] \nabla r + r R \right) \\ + \frac{1}{\tau_W} \frac{3}{2} k_B T_0 N_h e^{-\eta_h} r = \frac{1}{\tau_W} \frac{3}{2} k_B T_0 N_h e^{-\eta_h} \quad (8.37) \\ + q \mu_h U_T N_h e^{\Omega_h} \left[r_{\text{alt}} \nabla v + \left(\frac{5}{2} - \Omega_h \right) v \nabla r_{\text{alt}} \right] \nabla \Psi . \end{aligned}$$

Die alten Temperaturwerte r_{alt} kommen aus der Berechnung der Stromdichte \vec{j} in der Kontinuitätsgleichung, die ja noch vor der Temperaturgleichung, also mit alten Werten, berechnet wird. Ansonsten gelten hier die gleichen Bemerkungen wie in Abschnitt 8.2. Die Diskretisierungen erfolgen nach dem üblichen Verfahren der Finiten Differenzen. Die für die Quantenkorrekturen hinzukommenden Terme sind in Abschnitt 6.4 angegeben.

8.4 Randbedingungen

Die Randbedingungen für die vorliegenden Rechnungen werden an den ohmschen Kontakten eingeprägt, die als ideal angenommen werden. Hier gilt zum einen die Neutralitätsbedingung, die besagt, dass Raumladungen verschwinden müssen, zum anderen wird ein thermisches Gleichgewicht bei Umgebungstemperatur angesetzt. Die zugehörige Lösung der Poisson-Gleichung liefert das Diffusions-Potenzial Ψ_D . Damit gilt für das Potenzial an den ohmschen Kontakten

$$\Psi|_{Ohm} = \Psi_D + \Psi_{ext} \quad (8.38)$$

mit dem außen angelegten Potenzial Ψ_{ext} . Für den hier benutzten Variablensatz werden außerdem Randbedingungen für die Quasi-Fermi-Potenziale benötigt. Diese müssen nach der Neutralitätsbedingung identisch mit dem angelegten Potenzial sein, es gilt daher

$$\Phi|_{Ohm} = \Psi_{ext} . \quad (8.39)$$

So sind an den Rändern der Rechengebiete die Werte festgelegt, dies muss sich natürlich auch auf die Berechnungen im Inneren auswirken. Dies wird durch die Finiten Differenzen gewährleistet. Das erste Element im Innenbereich wird so direkt von seinem benachbarten Randwert beeinflusst. Hierzu muss in den Implementierungen der Halbleitergleichungen

auf den rechten Seiten der Gleichungssysteme $[A] \cdot \vec{x} = \vec{b}$ für das äußere Element ein Term abgezogen werden, der aus dem Nabla-Operator und dessen diskreter Implementierung resultiert.

8.5 Implementierung des Bohm-Potenzials

Das Bohm-Potenzial beeinflusst die Berechnung der Teilchendichten, da diese durch eine quantenmechanische Erwartungswertbildung über die Wigner-Funktion entstehen. Deshalb muss es in die Poisson-Gleichung selbstkonsistent eingehen. So lässt sich eine Iteration finden, die der Gummel-Iteration ähnelt (siehe Abschnitt 8.1). Die Iteration bezieht sich hier allerdings nicht auf das Potenzial sondern auf die Teilchendichten, mit deren Hilfe über die Gleichung (6.48) das Bohm-Potenzial (hier als Potenzial) bestimmt werden kann. Ausgangspunkt ist [54]

$$n = n_0 \exp \left(\frac{e}{k_B T} \frac{Q_e}{3} \right) \quad \text{bzw.} \quad (8.40)$$

$$p = p_0 \exp \left(\frac{e}{k_B T} \frac{Q_h}{3} \right). \quad (8.41)$$

Mithilfe dieser Gleichungen und der Definition (6.48) lässt sich das Bohm-Potenzial eliminieren und so eine Iterationsvorschrift für die Teilchendichten finden:

$$\frac{3k_B T}{e} \ln \left(\frac{n}{n_0} \right) = \frac{\hbar^2}{2m_e e} \frac{1}{\sqrt{n}} \Delta \sqrt{n} \quad \text{und} \quad (8.42)$$

$$\frac{3k_B T}{e} \ln \left(\frac{p}{p_0} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m_h e} \frac{1}{\sqrt{p}} \Delta \sqrt{p}. \quad (8.43)$$

Es bietet sich an, hier eine Variablensubstitution durchzuführen, da die Wurzeln der Teilchendichten in die Rechnung eingehen.

$$u_n = \sqrt{n} \quad \text{und} \quad (8.44)$$

$$u_p = \sqrt{p} \quad (8.45)$$

werden eingesetzt, so dass die Gleichungen

$$\Delta u_n - \frac{6k_B T m_e}{\hbar^2} u_n \ln \left(\frac{u_n^2}{n_0} \right) = 0 \quad \text{und} \quad (8.46)$$

$$\Delta u_p + \frac{6k_B T m_h}{\hbar^2} u_p \ln \left(\frac{u_p^2}{p_0} \right) = 0 \quad (8.47)$$

entstehen. Wird nun für den jeweils zweiten Term eine Taylor-Entwicklung erster Ordnung angesetzt, so ist dies eine Unterrelaxation wie schon beim Gummel-Algorithmus. Mit dem Ansatz

$$u = u_0 + \delta u \quad (8.48)$$

ergibt die Taylor-Entwicklung folgendes Bild:

$$u \ln \left(\frac{u^2}{n_0} \right) \approx u_0 \ln \left(\frac{u_0^2}{n_0} \right) + \delta u \left(2 + \ln \left(\frac{u_0^2}{n_0} \right) \right). \quad (8.49)$$

Damit lässt sich ein Gleichungssystem formulieren, das die iterative Berechnung der Teilchendichten erlaubt, die über die Gleichung (6.48) mit dem Bohm-Potenzial verknüpft sind. Gelöst werden muss dazu

$$\Delta \delta u_n - \frac{6k_B T m_e}{\hbar^2} \left(2 + \ln \left(\frac{u_{n0}^2}{n_0} \right) \right) \delta u_n = -\Delta u_{n0} + \frac{6k_B T m_e}{\hbar^2} u_{n0} \ln \left(\frac{u_{n0}^2}{n_0} \right), \quad (8.50)$$

$$\Delta \delta u_p + \frac{6k_B T m_h}{\hbar^2} \left(2 + \ln \left(\frac{u_{p0}^2}{p_0} \right) \right) \delta u_p = -\Delta u_{p0} - \frac{6k_B T m_h}{\hbar^2} u_{p0} \ln \left(\frac{u_{p0}^2}{p_0} \right). \quad (8.51)$$

Aus dem Ergebnis dieser Iteration ergibt sich das Bohm-Potenzial, welches in die Poisson-Gleichung mit eingeht.

8.6 Untersuchungen mit den hydrodynamischen Modellen

Im Folgenden werden einige Berechnungen anhand einer typischen RTD-Struktur gezeigt. Bei der Struktur handelt es sich um 50 nm breite, hoch n-dotierte ($1 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$) GaAs-Schichten an den Kontakten. Es folgen so genannte Pufferschichten von 5 nm des gleichen Materials, die allerdings mit $5 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$ gering dotiert sind. In der Mitte liegt dann die eigentliche Doppelbarrierenstruktur, die aus $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barrieren von 5 nm und einem Quantentopf aus GaAs von ebenfalls 5 nm besteht. Die dicken äußeren Schichten werden klassisch berechnet, während für die inneren Schichten Quantenkorrekturterme hinzu geschaltet werden. Die Diskretisierung in diesen Rechnungen liegt bei 0,1 nm. Die Spannung wird in Schritten von 0,02 V erhöht.

Abbildung 8.3 zeigt das selbstkonsistente Potenzial sowie die Teilchendichte der Struktur

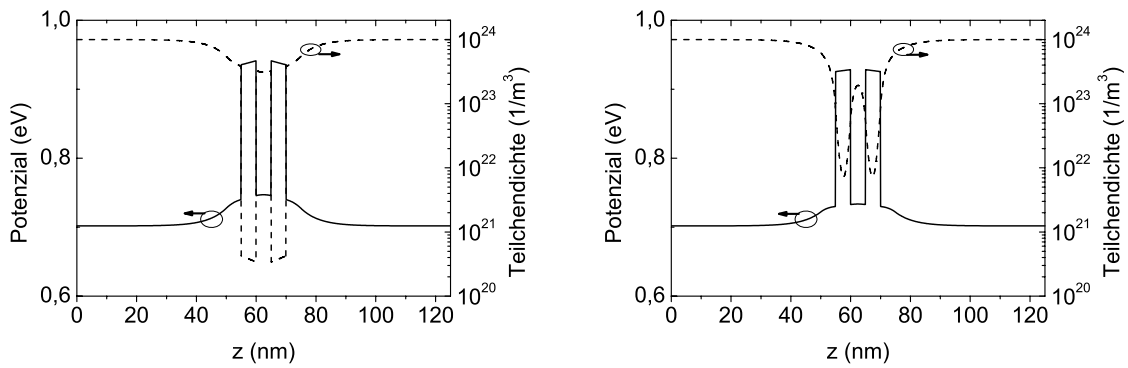


Abbildung 8.3: Selbstkonsistentes Potenzial und Teilchendichte im Gleichgewicht; Links: klassische Rechnung; Rechts: QHD-Rechnung

im Gleichgewicht. Dabei fällt auf, dass die Teilchendichte bei der quantenmechanischen Rechnung in den Barrieren einen wesentlich höheren Wert hat. Dies zeigt deutlich, wie das Quantenpotenzial den Teilchen eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit in diesem

Bereich erlaubt, und Tunnelströme erfasst werden können. Dieses Ergebnis stimmt mit den Ergebnissen aus der Dichtematrixrechnung (s. Abb. 9.6) überein.

Mit einer Vorspannung von 0,5 V entsteht eine Konstellation, wie sie in Abbildung 8.4 gezeigt ist. Wie oben fällt auch hier wieder die höhere Teilchendichte der quantenmechanischen Rechnung in den Barrieren auf. Zusätzlich ist die Teilchendichte eine glatte Kurve, da das Quantenpotenzial wie beschrieben glättend wirkt.

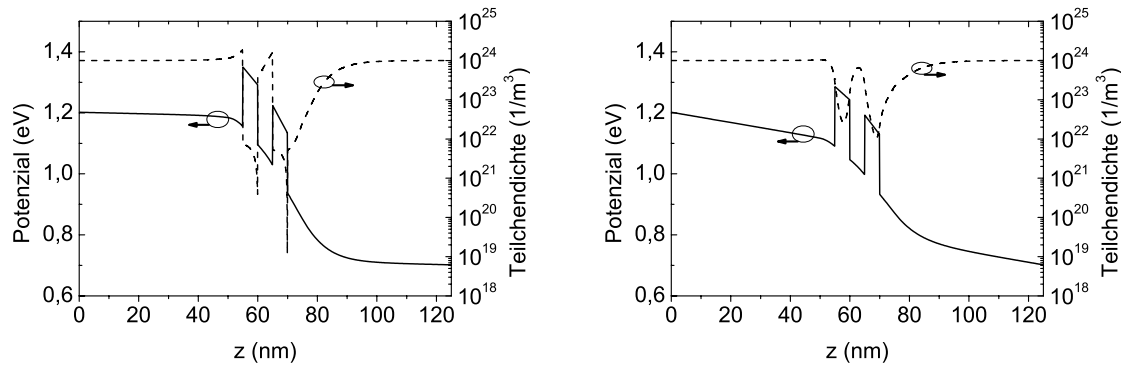


Abbildung 8.4: Selbstkonsistentes Potenzial und Teilchendichte bei einer Vorspannung von 0,5 V; Links: klassische Rechnung; Rechts: QHD-Rechnung

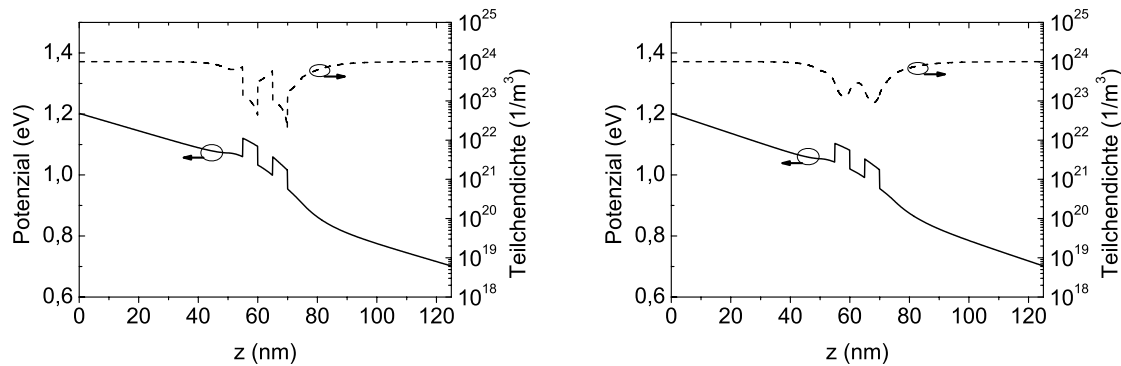


Abbildung 8.5: Selbstkonsistentes Potenzial und Teilchendichte für kleinere Barrieren bei einer Vorspannung von 0,5 V; Links: klassische Rechnung; Rechts: QHD-Rechnung

Das Potenzial in beiden Graphen ist das klassische selbstkonsistente Potenzial, das Quantenpotenzial ist hier also nicht zu sehen. Trotzdem ist der Verlauf des Potenzials bei klassischer und bei quantenmechanischer Rechnung unterschiedlich. In der quantenmechanischen Rechnung fällt die Spannung nicht so stark an der Doppelbarriere ab wie in der klassischen Rechnung. Dies deutet darauf hin, dass das effektive Potenzial durch das Quantenpotenzial geringer ist als das ursprüngliche.

Ein ähnlicher Effekt ist zu erkennen, wenn die Doppelbarriere flacher angesetzt wird. Die Rechnung für einen Al-Anteil von nur 0,1 im Gegensatz zu 0,3 zeigt die Abbildung 8.5. Darin ist die Doppelbarriere nicht hoch genug, um den Spannungsabfall zu übernehmen. Auffällig in Abbildung 8.4 ist, dass sich in der Akkumulationsschicht links neben der linken

Barriere nicht so viele Ladungsträger sammeln, wie dies nach der klassischen Rechnung der Fall sein sollte. Da sich hier ebenfalls diskrete Zustände bilden können, haben nur wenige Elektronen die Möglichkeit, sich tatsächlich dort aufzuhalten.

Für die Struktur, in der der Al-Anteil der Barriere bei 0,3 liegt, zeigt Abbildung 8.6 eine Strom-Spannungs-Kennlinie zunächst ohne Berücksichtigung der Energiegleichung. Diese weist einen fast linearen Verlauf des Widerstands auf. Bei Spannungen zwischen 0,5 und 1 V steigt der Strom dagegen noch mal drastisch an. Allerdings zeigt diese Kennlinie nicht den typischen Bereich des negativen differentiellen Widerstandes, der unterhalb von 0,3 V zu erwarten wäre. Dies ist nicht verwunderlich, weil die Erhaltung der Energie und damit der diskrete Zustand im Topf gar nicht berücksichtigt wurde. Hier zeigt sich, dass die RTD nicht alleine durch die ersten beiden Gleichungen des quantenhydrodynamischen Modells modelliert werden kann.

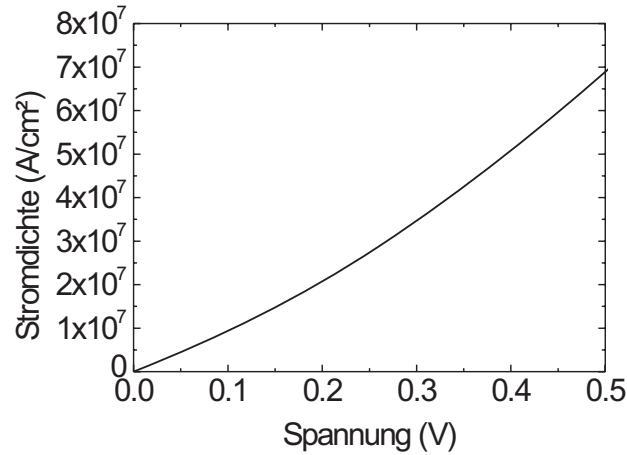


Abbildung 8.6: Strom-Spannungs-Kennlinie ohne Berücksichtigung der Energiegleichung

Die Berücksichtigung der Energiegleichung führt leider recht schnell zu numerischen Problemen bei interessanten Vorspannungen. Bei niedrigen Temperaturen, z.B. bei 90 K, können noch Werte bis einige 100 mV berechnet werden, doch wird dies bei höheren Spannungen fast unmöglich. Auch eine Erhöhung der Umgebungstemperatur wirkt sich äußerst negativ auf die Berechnungen aus. Der Versuch, doch noch den Variablensatz aus Abschnitt 8.2.1 zu wechseln, brachte keinerlei Erfolg. Es ist der Temperaturgradient aus Gleichung (6.42), der mit seinen großen Werten im Bereich hoher Potenzialgefälle die Berechnungen instabil macht. Auf diesen Term kann nicht verzichtet werden, da er das Verhalten der Bauelemente entscheidend beeinflusst. Bisher ist keine zufrieden stellende Lösung für dieses Problem gefunden. Aus Sicht des Autors wäre es viel versprechend, den Gleichungssatz des QHD-Modells als geschlossenes Gleichungssystem statt in einer Iterationsschleife entkoppelt zu lösen. Abbildung 8.1 zeigt das hier angewendete Iterationsverfahren, jede Gleichung wird mit dem Ergebnis der vorhergehenden Gleichung gelöst. Das birgt die Gefahr, dass die Iteration empfindlich auf zum Beispiel große Gradienten reagiert. Ein geschlossenes Gleichungssystem, bei dem die Gleichungen gleichzeitig gelöst werden, bietet größere Stabilität, ist jedoch sehr aufwändig. Auch Selberherr [22] weist diesen Weg zu stabileren Ergebnissen. Diese Berechnung geschieht im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr.

Dass das typische Verhalten von RTDs mit ihrem negativen differentiellen Widerstand im QHD-Modell erfasst ist, mögen die folgenden Beispiele zeigen. Zunächst stellt Abb. 8.7 die Temperaturverteilung der betrachteten Struktur bei $T = 90$ K ($\tau_W = 0,31$ ps) dar. Das Tunnelverhalten der Ladungsträger wird im hydrodynamischen Modell als überhöhte

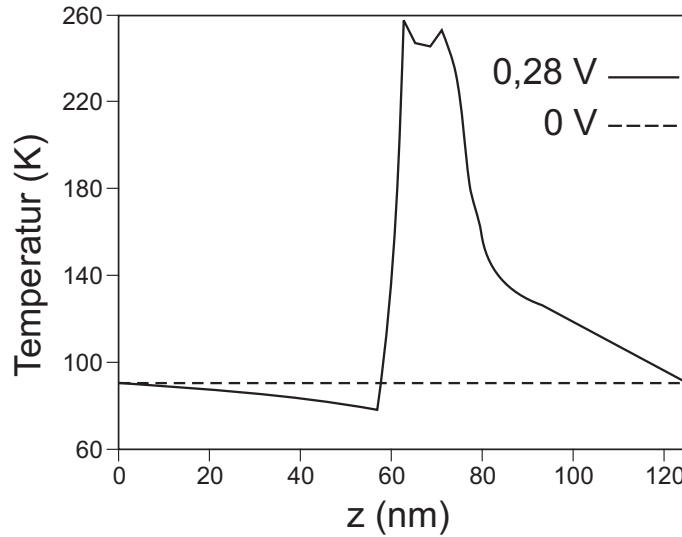


Abbildung 8.7: Temperaturverteilung im resonanten Zustand

Energie der Teilchen erfasst. Die Teilchen müssen in dieser klassischen Beschreibungsweise sozusagen genug Energie aufbringen, um die Barrieren zu überwinden. Der „Schweif“ rechts der Barrieren stellt die sich schnell bewegenden Elektronen dar, welche jenseits der Barriere die Potenzialstruktur „herunterrutschen“.

Die Vorspannung von 0,28 V gibt dabei den resonanten Zustand der RTD wieder, wie Abb. 8.8 beweist.

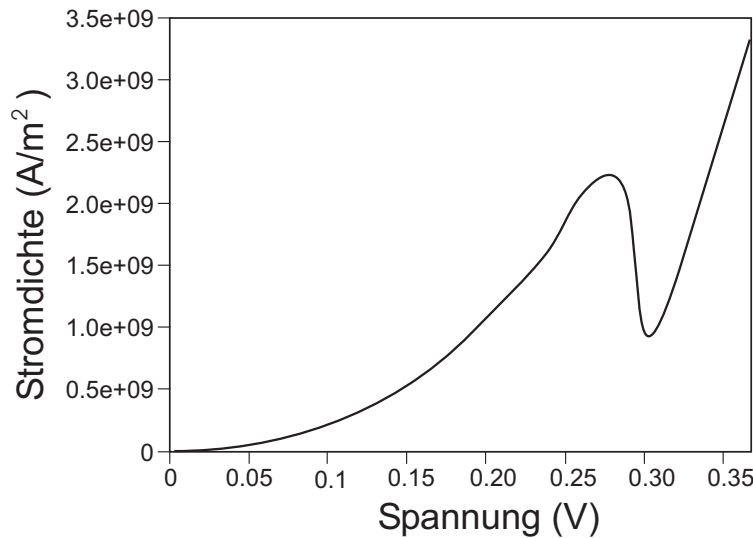


Abbildung 8.8: Strom-Spannungs-Kennlinie für niedrige Vorspannungen

Hier zeigt sich auch deutlich der typische Verlauf einer RTD, der leider nicht das resonante Niveau der Dichtematrixrechnung (s. Kap. 9) aufweist. Nach der quantenmechanischen Berechnung müsste das erste resonante Niveau deutlich unterhalb des resonanten Niveaus aus der QHD-Rechnung liegen.

Wider Erwarten also lieferte das hydrodynamische Modell nicht die gewünschten Ergebnisse, wenn die Tendenz auch hoffnungsvoll stimmen mag. Weitere Untersuchungen müssen erweisen, ob dafür Fehler in der Implementierung ausschlaggebend sind oder ob hier ein grundsätzliches Problem vorliegt.

8.7 Implementierung des geglätteten Quantenpotenzials

Abschnitt 6.4 hat ein gemitteltes Quantenpotenzial eingeführt, welches Sprünge im klassischen Potenzial so aufweicht, dass es in den QHD-Gleichungen genutzt werden kann. Hier wird die Implementierung dieses Potenzials vorgestellt, welches nun leider nicht mehr wie das Bohm-Potenzial einfach aus einer zweiten Ableitung, also aus den benachbarten Punkten, zu berechnen ist, sondern die Integration über ein größeres Gebiet und auch über die Temperatur einbezieht. Deshalb erfordert dieses Verfahren einen wesentlich höheren Aufwand.

Es gibt zu diesem Thema eine Reihe von Veröffentlichungen, z.B. [44, 46], die nur die zugrunde liegende Theorie beschreiben, dabei die Beschreibung der Implementierung vernachlässigen. Es ist also neu, dieses Potenzial für ausgedehntere Simulationen von Halbleiterstrukturen zu verwenden. Die Arbeit sollte sich jedoch lohnen, da dies ein wesentlich legitimerer Ansatz ist als die bisherige Simulation mit Bohm- und Wigner-Potenzial. Gardner [44] schlägt zunächst eine Koordinatentransformation für die Gleichung (6.51) vor, welche das Integral etwas übersichtlicher gestaltet. Er verwendet hierzu

$$\frac{\beta'}{\beta} \rightarrow \beta'' \quad \text{und} \quad (8.52)$$

$$\frac{2m\beta}{(\beta - \beta')(\beta + \beta')\hbar^2} (\vec{X}' - \vec{x})^2 \rightarrow \vec{X}''^2. \quad (8.53)$$

Die erste Transformation (8.52) erzeugt eine dimensionslose bezogene Temperatur, die zweite Transformation (8.53) normiert die Gauss-Glocke auf die Breite $\sigma = 1/\sqrt{2}$ um 0. Damit wird aus dem Integral (6.51) im eindimensionalen Fall

$$\bar{V}(x, \beta) = \int_0^1 d\beta'' \beta''^2 \int \frac{dX''}{\pi^{1/2}} \exp(-X''^2) V \left(x + \left(\frac{\beta(1 - \beta''^2)\hbar^2}{2m} \right)^{1/2} X'' \right). \quad (8.54)$$

Jetzt ist allerdings zu beachten, dass im diskretisierten Zustand das Potenzial ja nur auf Gitterplätzen der ursprünglichen Ortskoordinate definiert ist, es sich aber nun in einem transformierten System befindet. Deshalb müssen die Diskretisierungspunkte im transformierten System an die reale Diskretisierung angepasst werden. Mit der Standardabweichung σ mit

$$\sigma^2 = \frac{(\beta^2 - \beta'^2)\hbar^2}{4m\beta} = \frac{\beta(1 - \beta''^2)\hbar^2}{4m} \quad (8.55)$$

läuft die Laufvariable k von $-k_{\max}$ bis k_{\max} und stellt so die diskreten transformierten Werte

$$X'' \leftarrow k \frac{\Delta x}{\sqrt{2a}} \quad (8.56)$$

dar.

In der diskretisierten Darstellung ergibt sich für das gemittelte Quantenpotenzial

$$\begin{aligned} \bar{V}(k_x, \beta) = & \sum_{\beta'''=0}^{\beta_{Anzahl}-1} \underbrace{\left(\frac{\beta'''}{\beta_{Anzahl}} \right)^2}_{\beta''^2} \frac{1}{\beta_{Anzahl}} \sum_{k=-k_{max}}^{+k_{max}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \\ & \times \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{2\sigma^2}(k - k_x)^2\right) V(k) \Delta x. \end{aligned} \quad (8.57)$$

Zunächst fällt auf, dass der Wert für $\beta'' = 1$ aus der Berechnung herausgenommen wurde. Dieser würde zu einem Siebintegral führen, das numerisch nicht ausgewertet werden kann. Die Summationsgrenze k_{max} wird mithilfe der Formel

$$k_{max} = \frac{\sigma_{Faktor}\sigma}{\Delta x}, \quad k_{max} \in N_0 \quad (8.58)$$

berechnet. Über den Simulationsparameter σ_{Faktor} nimmt man Einfluss auf die Integrationsweite der Gauss-Glocke, also auf die vom Integral erfasste Fläche, da die Ortsintegration nicht über das komplette Gebiet verlaufen muss. Wird die doppelte Breite der Gauss-Glocke betrachtet, sind dort ca. 95,5% der gesamten Fläche enthalten. Eine 2,5-fache Breite führt schon zu 98,76%. Der genaue Einfluss dieses Parameters σ_{Faktor} wird in den Abschnitten 8.7.1 und 8.7.2 untersucht [55].

Probleme bringen die unterschiedlichen Massen mit sich. Die Herleitung des geglätteten Quantenpotenzials nimmt keine Rücksicht auf unterschiedliche Massen an den Gebietsgrenzen. Das effektive Quantenpotenzial weist hier zunächst Sprünge auf, diese werden in Abschnitt 8.7.3 näher betrachtet.

Es hat sich gezeigt, dass die Quantenkorrektur des Potenzials selbstkonsistent in die Poisson-Gleichung eingehen muss. In Abschnitt 8.5 ist dies für das Bohm-Potenzial durchgeführt. Da das Bohm-Potenzial aber durch einen geschlossenen Ausdruck definiert ist, konnte hier eine Iteration für die Teilchendichten gefunden werden. Dies ist in der Form beim gemittelten Quantenpotenzial nicht möglich, so dass sie bisher nur in der Gesamtiteration aller Transportgleichungen berücksichtigt werden kann. Es wäre wesentlich stabiler und effizienter, wenn ein dem Bohm-Potenzial analoger Ansatz hergeleitet werden könnte. Dies muss Gegenstand weiterer Untersuchungen sein.

8.7.1 Wahl der Simulationsparameter

Für die Implementierung des Quantenpotenzials ist die Wahl geeigneter Parameter wichtig. Dazu zählen die Weite des unter der Gauss-Glocke berücksichtigten Gebiets, die Diskretisierung der Temperatur und die numerische Integration. Die folgende Untersuchung zeigt den Einfluss dieser Simulationsparameter [55].

Die Temperatur und die Ortsdiskretisierung wurden dabei auf die Werte $T = 300$ K und $\Delta x = 0,1$ nm eingestellt, für die Masse wurde zunächst die Ruhemasse des Elektrons angenommen. Der Einfluss verschiedener effektiver Massen wird später (Abschnitt 8.7.3) untersucht. Zur Darstellung der gemittelten Quantenpotenziale werden diese mit dem Faktor 3 multipliziert, um die 1/3-Gewichtung der Temperaturintegration zu kompensieren.

Um eine genaue Aussage über das Konvergenzverhalten treffen zu können, wird der Verlauf des gemittelten Quantenpotenzials am linken Rand des Rechengebietes in Abhängigkeit von σ_{Faktor} und für verschiedene Werte von β_{Anzahl} untersucht.

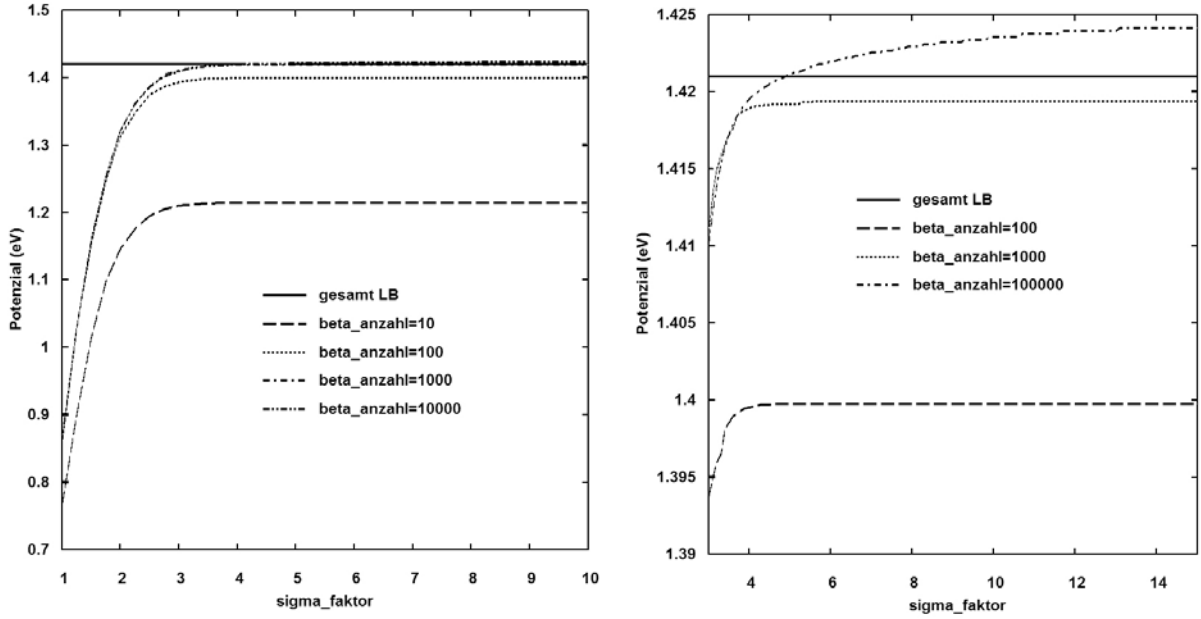


Abbildung 8.9: Gemitteltes Quantenpotenzial am linken Rand des Rechengebietes in Abhängigkeit von σ_{Faktor} und für verschiedene Werte von β_{Anzahl}

Abb. 8.9 zeigt, dass für größere Werte von σ_{Faktor} das gemittelte Quantenpotenzial gegen einen von β_{Anzahl} abhängigen Grenzwert konvergiert, der allerdings für große Werte von β_{Anzahl} den Wert des klassischen Potenzials überschreitet. Die Ursache für diesen zu großen Wert wird ersichtlich, wenn man sich die numerische Integration über die Gauss-Kurve, wie sie in Abbildung 8.10 dargestellt ist, genauer anschaut.

Mit steigendem β'' verengt sich die zur Mittelung über den Ort verwendete Gauss-Glocke

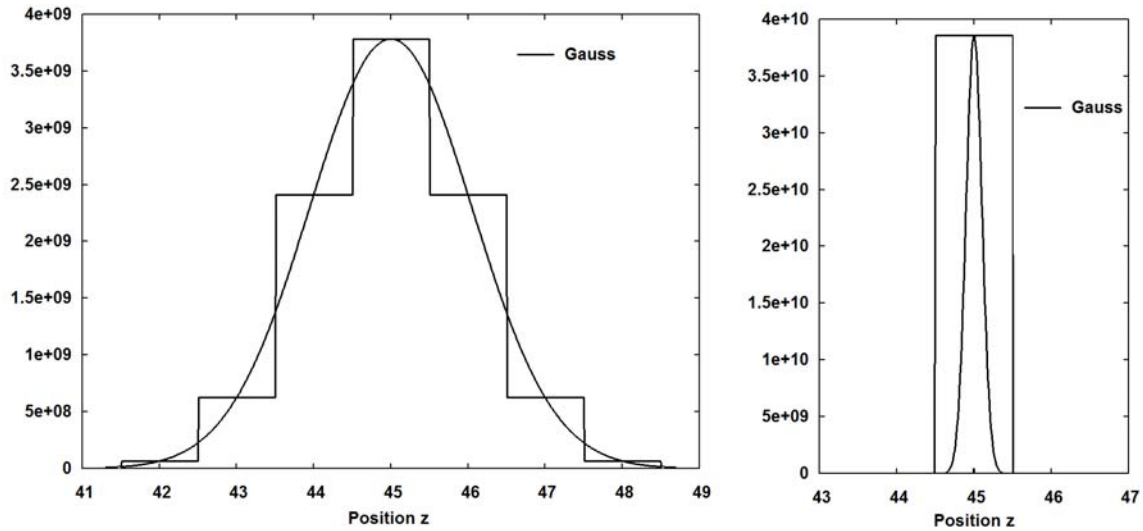


Abbildung 8.10: Gauss-Glocke für kleines β'' (links) und für großes β'' (rechts)

und geht schließlich für $\beta'' = 1$ in einen Dirac-Impuls über. Dieser ist zwar aus der

Summenbildung in (8.57) herausgenommen, man erhält aber bereits für deutlich kleinere Werte von β'' die Summationsgrenze k_{max} zu Null. Im rechten Bild von Abbildung 8.10 ist die Folge der verschwindenden Summationsgrenze gut erkennbar. Durch die Multiplikation mit Δx entsteht eine Fläche die sichtbar größer ist als die Fläche unter der Gauss-Glocke. Dieser Fehler steigt mit größer werdendem β_{Anzahl} .

Abhilfe kann hier eine dynamische Verkleinerung von Δx in (8.58) schaffen, so dass ein zuvor festgelegter Schwellwert für k_{max} , $\text{Min}(k_{max})$, niemals unterschritten wird und somit die Summe über das Produkt von Potenzial und Gauss-Kurve für jedes β'' einen nahezu exakten Wert liefert. Da das klassische Potenzial nur an fest vorgegebenen Stellen definiert ist, müssen allen durch das veränderte Δx zusätzlich erzeugten Stützstellen Werte des klassischen Potenzials zugeordnet werden: $\bar{V}(k_x, \beta) = \frac{1}{3}V(k_x)$.

Die Ergebnisse dieses Lösungsansatzes sind in Bild 8.11 abzulesen.

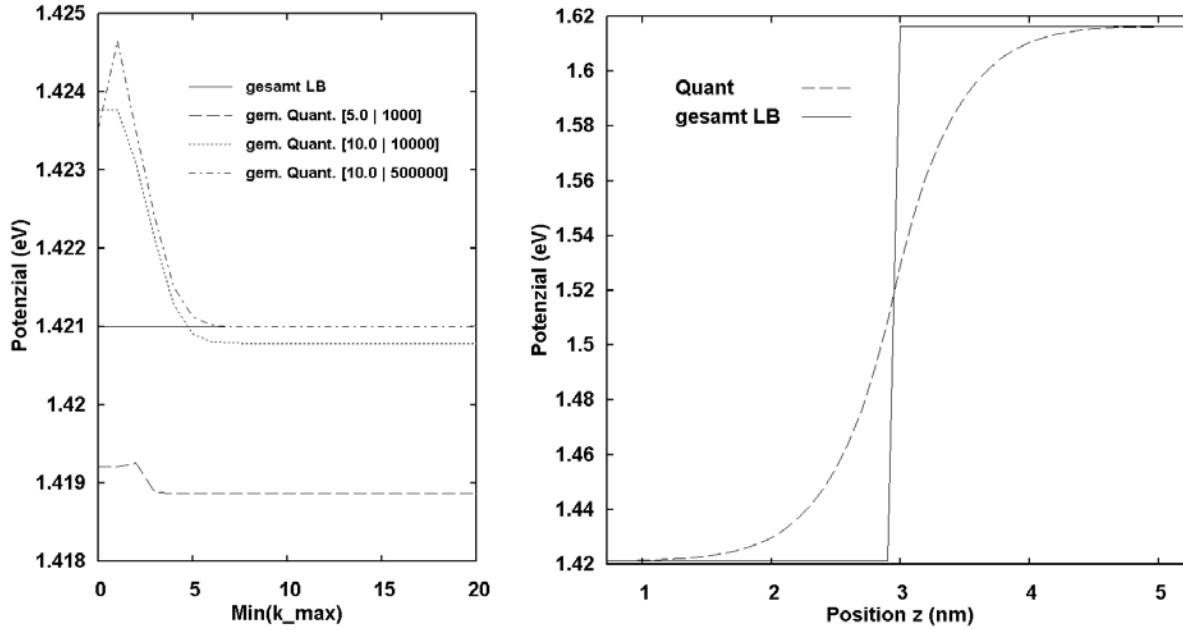


Abbildung 8.11: Gemitteltes Quantenpotenzial ($[\sigma_{Faktor}|\beta_{Anzahl}]$) als Funktion von $\text{Min}(k_{max})$ (linkes Bild) und an einem Potenzialsprung (rechtes Bild)

Bei vorgegebenen Werten von $\sigma_{Faktor} = 10,0$ und $\beta_{Anzahl} = 500.000$ konvergiert das gemittelte Quantenpotenzial gegen den Wert des klassischen Potenzials. Die Rechenzeit für diese nur 6 nm dicke Struktur ist jedoch recht lang (ca. 40 Min., bei einer Taktfrequenz von 2,4 GHz). Für komplexere und somit dickere Strukturen ist deshalb ein deutlich effizienterer Algorithmus zur Berechnung notwendig. Der Versuch, die Rechenzeit durch eine nichtäquidistante Diskretisierung von β'' zu verringern, brachte zunächst keinen Vorteil für die Berechnung des gemittelten Quantenpotenzials. Auch die Anwendung der Simpson- oder der Trapez-Regel [56] erhöht die Genauigkeit der numerischen Integration nicht nennenswert. Ganz anders wirkt sich die Tangenten-Regel aus. Bild 8.12 zeigt, dass bereits bei $\beta_{Anzahl} = 1.000$ ein deutlich besseres Ergebnis als bei der Rechteck-Formel mit $\beta_{Anzahl} = 500.000$ erzielt wird.

Diese enorme Verbesserung erklärt sich, wenn man Gleichung (8.57) betrachtet. Der erste Summand ($\beta'' = 0$) ergibt bei allen Integrationsverfahren, die den Wert an der linken Intervallgrenze zur Berechnung benutzen, den Wert Null. Da bei der Tangenten-Regel der

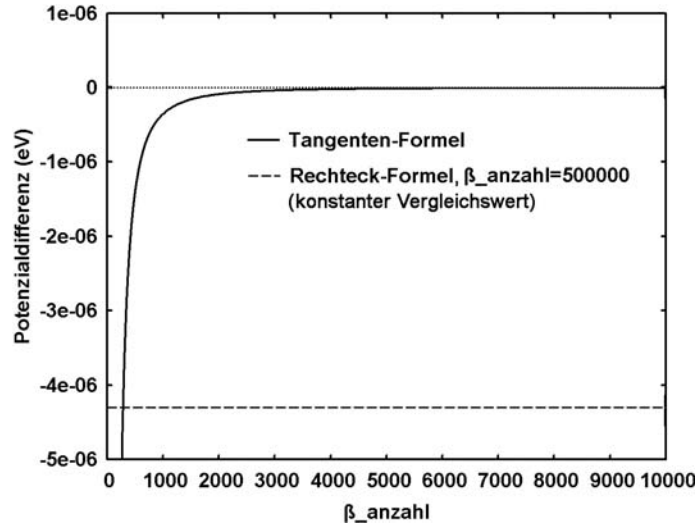


Abbildung 8.12: Potenzialdifferenz in Abhängigkeit von β_{Anzahl}

Wert in der Mitte des Intervalls verwendet wird, fällt der erste Summand mit $\Delta\beta''/2$ nicht heraus und die Summation liefert einen genaueren Wert.

Die Berechnung eines Potenzialsprunges in einer 6 nm dicken Struktur, wie bereits in Abbildung 8.11 dargestellt, benötigt mit der Tangenten-Formel und $\beta_{Anzahl} = 1.000$ wenige Sekunden. Mit der Rechteck-Formel waren bei schlechterem Ergebnis ca. 40 Minuten notwendig. Dies entspricht einem Zeitgewinn um den Faktor 500.

8.7.2 Berechnung des effektiven Potenzials

Für die Berechnung des gemittelten Quantenpotenzials wurde eine geeignete Methode gefunden. Nun soll es um die Bestimmung des effektiven Potenzials V_{eff} (vgl. (6.58)) gehen, das anstelle des klassischen Potenzials in die hydrodynamischen Gleichungen einfließt.

Auch hier entspricht die Masse zunächst einmal der Ruhemasse des Elektrons. Die Temperatur und die Ortsdiskretisierung werden wie oben auf die Werte $T = 300$ K und $\Delta x = 0,1$ nm eingestellt. Das komplizierte Geflecht von Simulationsparametern musste durch mühsame Untersuchungen entwirrt werden [55]. Mit $\sigma_{Faktor} = 10$, $\beta_{Anzahl} = 1.000$, $\text{Min}(k_{max}) = 10$ und der Tangenten-Regel ergibt sich für V_{eff} zunächst die Abb. 8.13. Der berechnete Verlauf des effektiven Potenzials weist an der Sprungstelle starke Unstetigkeiten auf. Zum Vergleich ist der exakte Verlauf ebenfalls angegeben.

Die Vergrößerung von β_{Anzahl} hat im Gegensatz zur Variation von σ_{Faktor} keinen sichtbaren Einfluss. Die Erhöhung von σ_{Faktor} um den Faktor 10 wirkt sich äußerst positiv auf das effektive Potenzial aus, bringt aber automatisch die Verkleinerung von $\text{Min}(k_{max})$ mit sich. Da die separate Vergrößerung von σ_{Faktor} keinen positiven Einfluss auf den Verlauf von V_{eff} hat, ist es naheliegend, auf die eigentlich genauere Rechnung mit $\text{Min}(k_{max})$ wieder zu verzichten. Abb. 8.14 bestätigt mit $\text{Min}(k_{max}) = 0$ diese Annahme.

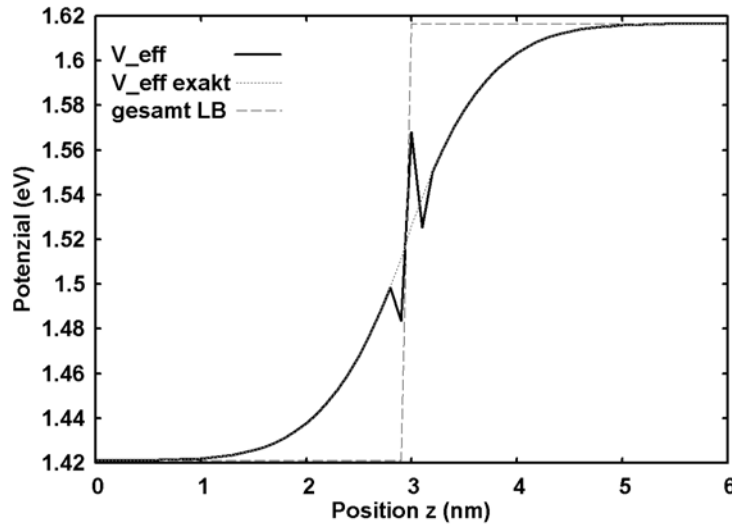
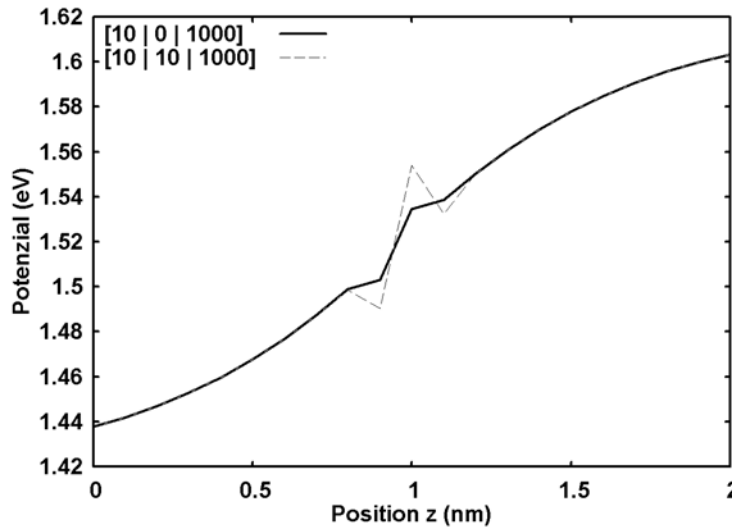


Abbildung 8.13: Effektives Potenzial eines Potentialsprungs

Abbildung 8.14: Verlauf von V_{eff} ($[\sigma_{\text{Faktor}} | \text{Min}(k_{\text{max}}) | \beta_{\text{Anzahl}}]$) ohne $\text{Min}(k_{\text{max}})$

Der Verzicht auf $\text{Min}(k_{\text{max}})$ führt, wie in Abbildung 8.10 dargestellt, auf einen zu großen Wert für das Integral. Dieser Fehler nimmt mit schmäler werdender Gauss-Glocke und somit mit steigendem β'' zu. Es stellt sich die Frage, ob eine weitere Steigerung des Integrations- bzw. Summationsfehlers durch eine Vergrößerung von β_{Anzahl} nicht auch eine weitere Verbesserung des Verlaufs von V_{eff} bewirkt. Um dabei dem mit einer Vergrößerung von β_{Anzahl} zwangsläufig einhergehenden Anstieg der Rechenzeit entgegenzuwirken, greift man auf eine nicht-äquidistante Diskretisierung von β'' in Form eines stufenförmigen Verlaufs von $\Delta\beta''$ zurück. Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abbildung 8.15 dargestellt.

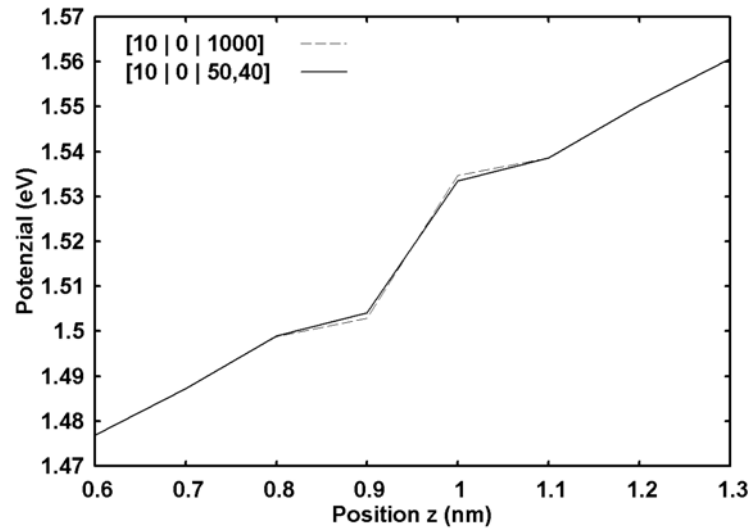


Abbildung 8.15: Verlauf von V_{eff} mit nicht-äquidistantem, stufenförmigen Verlauf von $\Delta\beta''$

Da sich die Vergrößerung von β_{Anzahl} erst nach dem Verzicht auf $\text{Min}(k_{\text{max}})$ positiv auf den Potenzialverlauf ausgewirkt hat, wird nun überprüft, ob es sich bei σ_{Faktor} ähnlich verhält. Abbildung 8.16 zeigt den Verlauf des effektiven Potentials für $\sigma_{\text{Faktor}} = 1.000$. Mit diesem Ergebnis ist das Ziel erreicht, aus dem klassischen Potenzial ein effektives

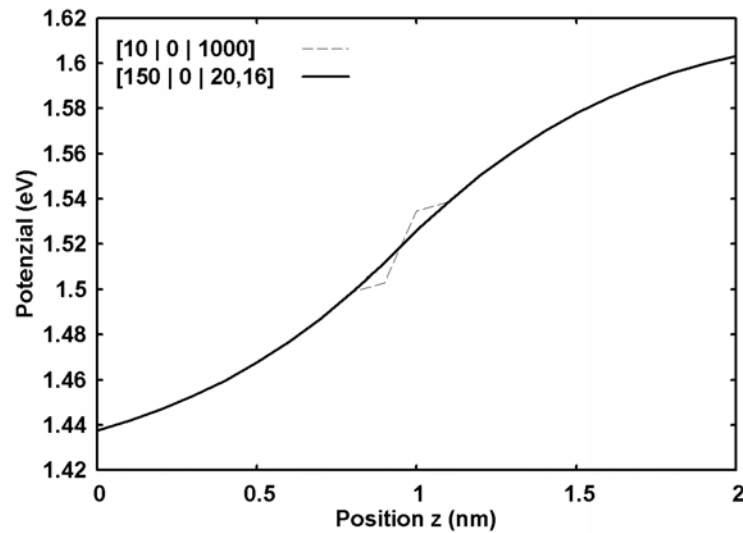


Abbildung 8.16: Verlauf von V_{eff} mit optimierten Parametern

Potenzial mit weichem Verlauf zu berechnen. Im Bereich der Sprungstelle sind keine Unstetigkeiten mehr vorhanden, was die erste Ableitung in Bild 8.17 bestätigt.

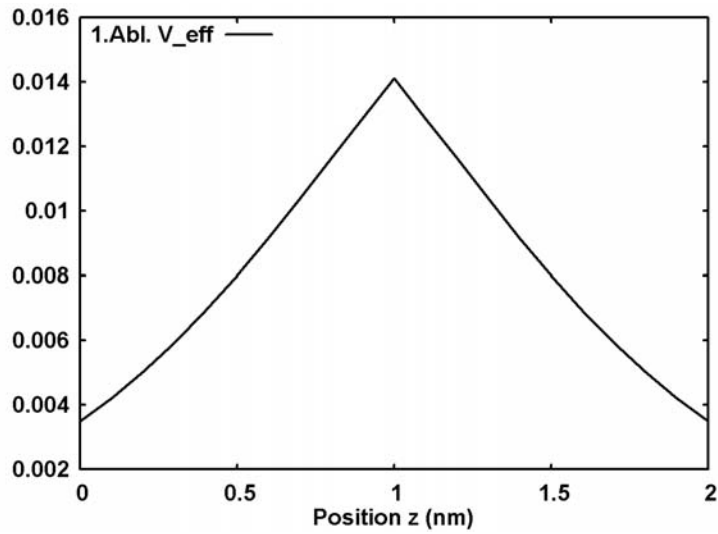


Abbildung 8.17: Verlauf der 1. Ableitung von V_{eff}

Der Verlauf der ersten Ableitung von V_{eff} wurde durch den hohen Wert für σ_{Faktor} optimiert. Trotz dieses hohen Wertes konnte für eine 6 nm dicke Schicht eine akzeptable Rechenzeit von 22,4 Sekunden erzielt werden. Dadurch wird auch die Berechnung von komplexeren Quantenstrukturen in einem angemessenen Zeitrahmen ermöglicht.

Abbildung 8.18 zeigt das effektive Potenzial einer Potenzialbarriere, Abbildung 8.19 das einer Doppelbarrierenstruktur, wie sie für resonante Tunneldioden verwendet wird.

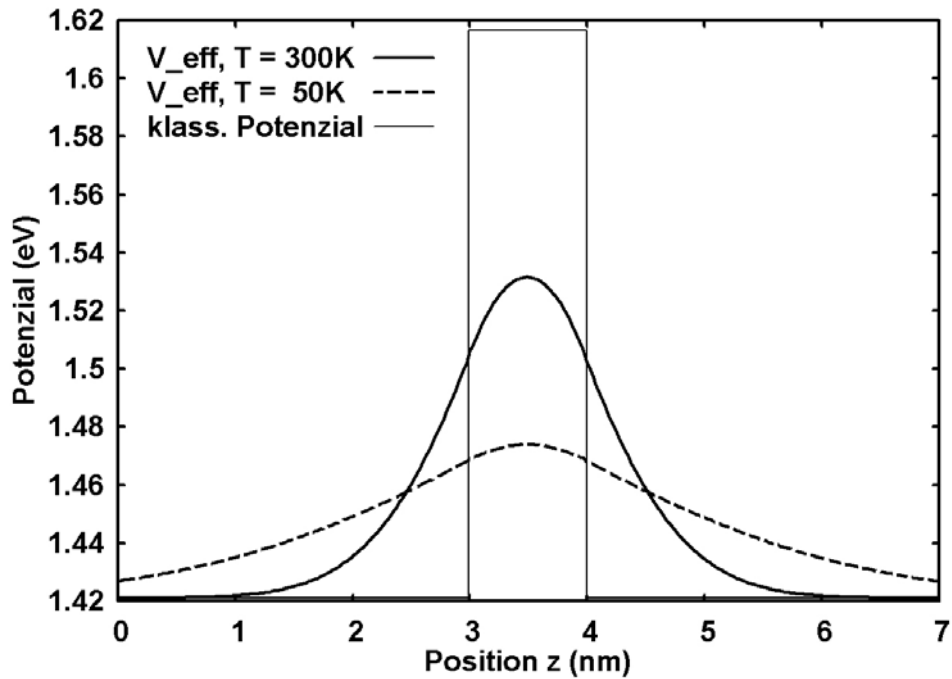


Abbildung 8.18: Effektives Potenzial einer Potenzialbarriere

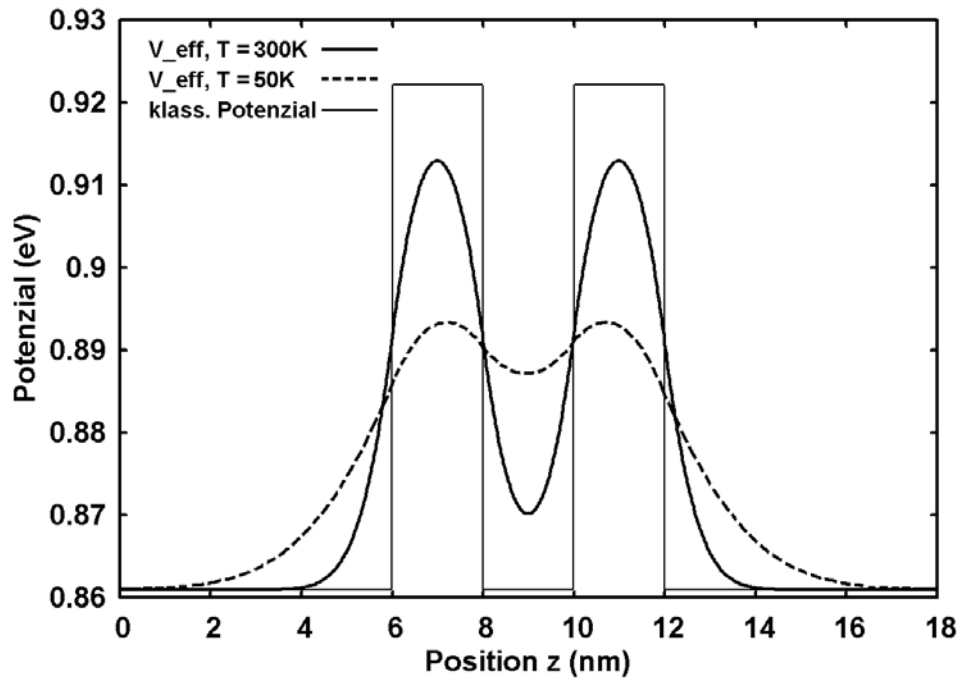


Abbildung 8.19: Effektives Potenzial einer Doppelbarrierenstruktur

8.7.3 Einfluss der effektiven Massen

Für die Masse m wurde bei allen bisher durchgeführten Rechnungen die Ruhemasse des freien Elektrons eingesetzt. Nun wird deshalb der Einfluss ortsabhängiger Effektivmassen untersucht. Der deutliche Unterschied der Effektivmassen zur Ruhemasse macht sich ebenso deutlich im Verlauf des effektiven Potenzials bemerkbar. Durch den viel kleineren Wert ergibt sich nach (8.55) eine stark vergrößerte Standardabweichung bzw. eine wesentlich breitere Gauss-Glocke als bei der Ruhemasse. Dadurch verbreitert sich auch der Verlauf des gemittelten Quantenpotenzials und des effektiven Potenzials. Gleichzeitig erhöht sich durch die breitere Gauss-Glocke auch die zur Berechnung des gemittelten Quantenpotenzials benötigte Zeit. Für $m_e^* = 0,067m_0$ bei GaAs führt die um den Faktor $1/\sqrt{0,067} \approx 4$ verbreiterte Gauss-Kurve zu einer Vervierfachung der Rechenzeit.

Eine ganz andere Problematik ergibt sich jedoch aus der Betrachtung von Heteroübergängen, an denen es durch die unterschiedlichen Materialien zu einem Sprung der effektiven Masse kommt. Wie sich dieser auf den Potenzialverlauf auswirkt und ob der bisher verwendete Ansatz diesen Fall überhaupt erfasst, soll im Folgenden näher untersucht werden. Leider geben Gardner und Ringhofer [44] keinen Hinweis darauf, inwiefern sie Massensprünge in ihren Rechnungen berücksichtigen.

Die Gleichungen (8.55) und (8.57) lassen erkennen, dass es zwei unterschiedliche Möglichkeiten gibt, die konstante Masse m durch eine ortsabhängige Masse $m(x)$ zu ersetzen. Im ersten Fall wird die Standardabweichung in Abhängigkeit von m und die Masse in Abhängigkeit der Laufvariable k zu $m(k)$ gesetzt. Dies führt zu einer Sprungstelle in der Gauss-Kurve.

Die Summationsgrenze k_{max} muss in diesem Fall für die linke und die rechte Seite getrennt berechnet werden. Probleme treten auf, wenn die Sprungstelle nicht genau in der Mitte der Gauss-Glocke liegt, da sich dann für das Integral eine von Eins abweichende Fläche

ergibt.

Die auftretenden Abweichungen im Verlauf des gemittelten Quantenpotenzials wirken sich gravierend auf den Verlauf des effektiven Potenzials aus. Der Versuch, die konstante Masse m durch eine von der Laufvariablen k abhängige Masse $m(k)$ zu ersetzen, erweist sich als ungeeignet.

Die zweite Möglichkeit, die ortsabhängige Masse $m(x)$ in die Berechnung des gemittelten Quantenpotenzials und des effektiven Potenzials einfließen zu lassen, ist eine Abhängigkeit vom Index k_x . Dazu werden die Standardabweichung σ und die Summationsgrenze k_{max} diesmal in Abhängigkeit von k_x berechnet und in (8.57) eingesetzt. So enthält die Gauss-Kurve keinen Sprung mehr, es wird aber an der Gebietsgrenze zu einem Sprung von V_{eff} kommen. Gleichung (6.58) enthält ebenfalls die ortsabhängige Masse $m(k_x)$. Den Verlauf des effektiven Potenzials für diesen Ansatz zeigt Abb. 8.20.

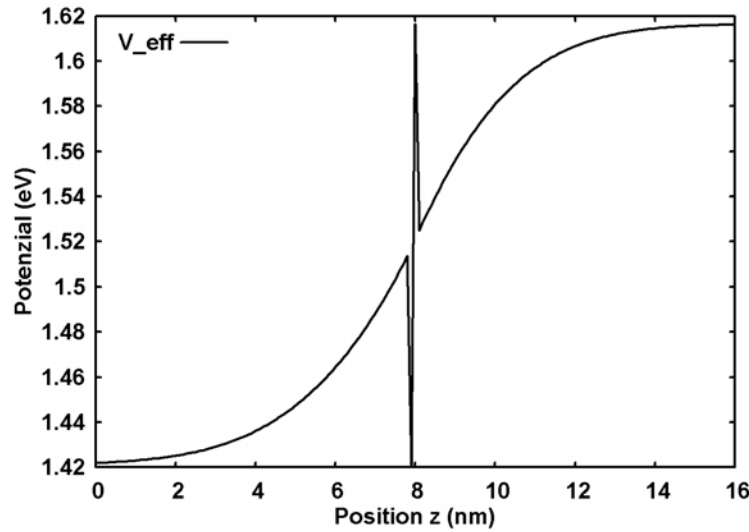


Abbildung 8.20: Verlauf des effektiven Potenzials für $m(k_x)$

Die vorhandene Unstetigkeit lässt sich nicht verkleinern, weil der Grund für die starke Abweichung nicht im gemittelten Quantenpotenzial, auf das man mit einer Parametervariation Einfluss nehmen könnte, sondern in dessen zweiter Ableitung zu suchen ist. Im Fall eines einzelnen Potenzialsprungs besteht das gemittelte Quantenpotenzial aus zwei Bereichen, die mit unterschiedlichen Massen berechnet werden. Am Potenzialsprung treffen diese beiden Bereiche aufeinander und ergeben, wie in Abb. 8.21 dargestellt, einen stetigen aber nicht stetig differenzierbaren Übergang.

Da sich die gemittelten Quantenpotenziale aber stetig zusammenfügen lassen, kann man das gleiche auch für das effektive Potenzial versuchen. Dazu wird die zweite Ableitung an beiden Seiten der Sprungstelle mit der zu diesen Punkten gehörigen effektiven Masse berechnet, d.h. das gemittelte Quantenpotenzial unmittelbar rechts vom Sprung wird zusätzlich mit der linken effektiven Masse und das links vom Sprung zusätzlich mit der rechten effektiven Masse berechnet. Das daraus resultierende effektive Potenzial ist in Bild 8.22, die zugehörige erste Ableitung in Bild 8.23 abgebildet.

Die kleinen Unstetigkeiten der 1. Ableitung lassen keine Probleme bei der Berechnung des hydrodynamischen Modells erwarten.

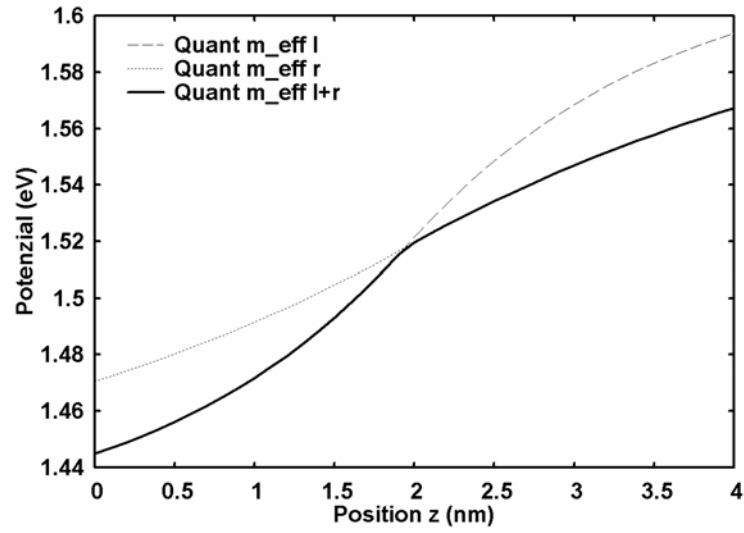


Abbildung 8.21: Gemittetes Quantenpotenzial für verschiedene effektive Massen

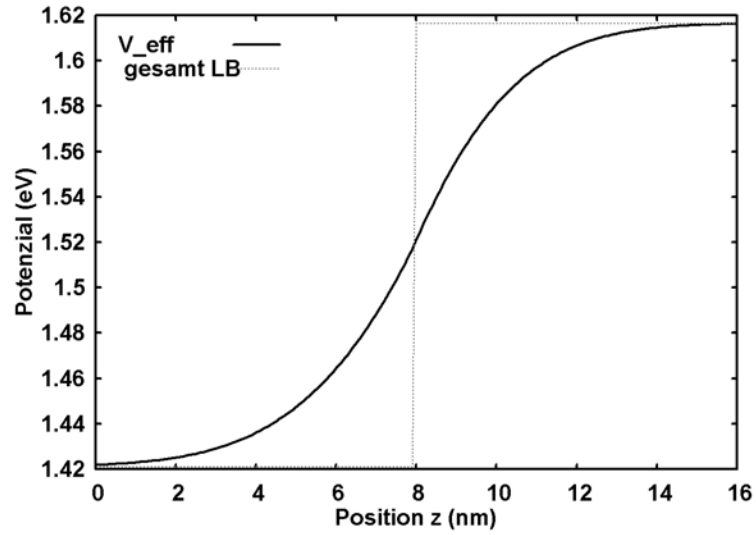
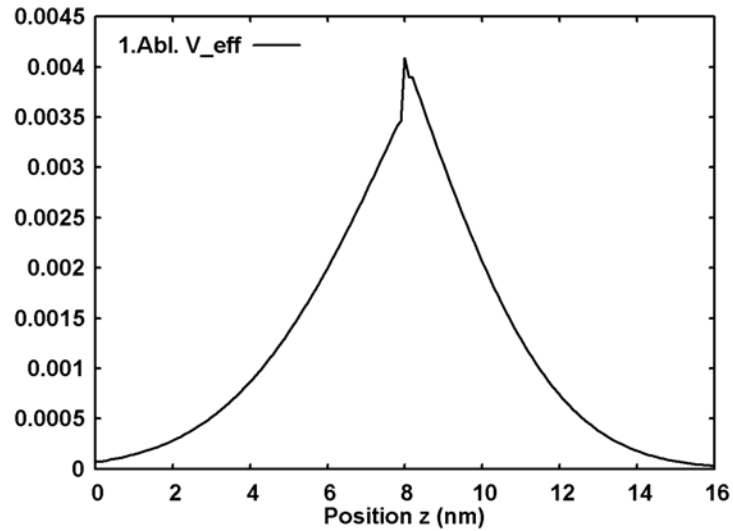


Abbildung 8.22: Effektives Potenzial mit Massensprung

Abbildung 8.23: 1. Ableitung von V_{eff} mit Massensprung

9 Quantenmechanische Analyse mit der Dichtematrix

Überblick: *In diesem Kapitel wird ein Simulationswerkzeug vorgestellt, mit dem unter Anwendung des **Dichtematrix**-Formalismus die Berechnungen mit denen des QHD-Modells verglichen werden können. Es steht so ein Instrument zur Verfügung, um die Quantisierung der Halbleiterstrukturen durch die genäherten Modelle zu bewerten.*

Die Dichtematrix des quantenmechanischen Systems wird im Falle des thermodynamischen Gleichgewichts direkt aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung eines Streuproblems bestimmt. Sie dient anschließend als Ausgangspunkt für den transienten Fall bei Anlegen einer Vorspannung, der durch die entsprechende Bewegungsgleichung, die Liouville-von Neumann-Gleichung, gegeben ist. Dissipative Prozesse im Festkörper werden entsprechend dem hydrodynamischen Modell mit einem Relaxationsansatz modelliert.

Das thermodynamische Gleichgewicht des offenen quantenmechanischen Systems wird anhand eines Satzes von Streuzuständen und mit der 'Quantum Transmitting Boundary Method' simuliert. Dabei wird die Schrödinger-Gleichung in einem iterativen Verfahren selbstkonsistent mit der Poisson-Gleichung gelöst. Die Elektronen werden hier als nicht wechselwirkend angesetzt, ihre Coulomb-Wechselwirkung untereinander jedoch durch die Einführung einer effektiven Verformung des Heterostruktur-Potenzials semiklassisch über die Poisson-Gleichung berücksichtigt. Ein stabiles numerisches Verfahren für die Bestimmung dieses selbstkonsistenten Potenzials wurde eigens entwickelt (s. Abschnitt 9.1.4).

Um die Rechenzeit in diesem Teil der Simulation zu reduzieren, bestimmt man in jedem Schritt die Resonanzenergien des Systems und generiert ein angepasstes Energiegitter, das in der Nähe der Resonanzenergien feiner ist als weiter von ihnen entfernt.

Die Dichtematrix für das thermodynamische Gleichgewicht wird anhand der selbstkonsistenten Lösung der Schrödinger- und Poisson-Gleichung und unter Verwendung eines Separationsansatzes aufgebaut. Diese Gleichgewichts-Dichtematrix kann dann als Startwert für die Lösung der Liouville-Gleichung für den Dichteoperator benutzt werden. Für den irreversiblen Teil des Hamilton-Operators wird ein einfacher Relaxationsansatz gewählt. Die größten Schwierigkeiten bei der Lösung der Liouville-Gleichung für den Dichteoperator sind die Wahl geeigneter Randbedingungen für die Dichtematrix und einer sinnvollen Relaxationsgröße.

9.1 Selbstkonsistente Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

Im Folgenden soll nun die kohärente Schrödinger-Gleichung quasi-freier Teilchen mit einem Finite Differenzen-Verfahren gelöst werden. Daraus leitet sich die quantenmechanische Elektronendichte her, für deren Auswertung die Streuresonanzen der Struktur bestimmt sein müssen. Eine für dieses Problem eigens entwickelte Variante des Gummel-Algorithmus [57] sorgt für die selbstkonsistente Koppelung von Poisson- und Schrödinger-Gleichung.

In allen Berechnungen der vorliegenden Arbeit wurden Halbleiterstrukturen betrachtet, bei denen sich die Materialeigenschaften nur in einer Richtung x verändern und in den beiden verbleibenden orthogonalen Raumrichtungen y und z konstant sind.

Da an den Gebietsgrenzen für Anode und Kathode Reservoirs im thermodynamischen Gleichgewicht angenommen werden, sind die Wellenfunktionen der Teilchen außerhalb des Rechengebietes einfache ebene Wellen. Dies rechtfertigt die Zerlegung der Wellenfunktion an den Rändern in hin- und rücklaufende ebene Wellen. Zur Lösung der Schrödinger-Gleichung kann deshalb die 'Quantum Transmitting Boundary Method' (QTBM) von Lent und Kirkner [58] genutzt werden, um das offene quantenmechanische System zu beschreiben.

9.1.1 Quantum Transmitting Boundary Method

Ein Satz von einfallenden Streuzuständen

$$\psi(x) = \begin{cases} a_0 e^{ik_0 x} + b_0 e^{-ik_0 x} & \text{für } x < x_{min} \\ a_L e^{-ik_L x} + b_L e^{ik_L x} & \text{für } x > x_{max} \end{cases} \quad (9.1)$$

(einfallende ebene Wellen aus der Kathode/Anode), wo x_{min} und x_{max} der linke bzw. rechte Rand des Rechengebietes und k_i die Wellenzahlen

$$k_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_i)}$$

sind, wird benutzt, um die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung für eine Energie E im Potenzialverlauf V zu lösen. Die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung wird mit der Finite-Differenzen-Methode bei fester Schrittweite Δx und mit der für Halbleiter-Heterostrukturen innerhalb der Effektiv-Massen-Näherung genauesten Diskretisierung [59]

$$H\psi_j = -s_j\psi_{j-1} + d_j\psi_j - s_{j+1}\psi_{j+1} = E\psi_j, \quad (9.2)$$

mit

$$d_j = \frac{\hbar^2}{4 \Delta x^2} \left(\frac{1}{m_{j-1}} + \frac{2}{m_j} + \frac{1}{m_{j+1}} \right) + V_j$$

und

$$s_j = \frac{\hbar^2}{4 \Delta x^2} \left(\frac{1}{m_{j-1}} + \frac{1}{m_j} \right),$$

gelöst. Um die QTBM-Randbedingungen zu erhalten, zerlegt man ψ an den Rändern des Rechengebietes in eine hin- und rücklaufende ebene Welle, und schreibt für $e^{ik_L \Delta x_L}$ abkürzend z_L . Dann lässt sich (9.1) an den Gebietsrändern in

$$\psi_j = a_1 z_1^{j-1} + b_1 z_1^{1-j} \quad \text{für } j \leq 1 \quad \text{und}$$

$$\psi_j = a_n z_n^{j-n} + b_n z_n^{n-j} \quad \text{für } j \geq n$$

umschreiben. Durch Einsetzen dieser Gleichungen in (9.2) erhält man für die Werte z_L an den Gebietsrändern

$$E = d_i - s_i(z_i + z_i^{-1}), \quad i = 1, n.$$

Man löst diese in z_i quadratischen Gleichungen und nimmt diejenige Lösung, für die $\text{Im}(z) \geq 0$ und $|z| \leq 1$ ist (einfallende Wellen). Die Wellenfunktion ψ an den Gebietsrändern ergibt sich damit zu

$$\psi_0 = a_1 z_1^{-1} + b_1 z_1,$$

$$\psi_1 = a_1 + b_1,$$

$$\psi_n = a_n + b_n,$$

$$\psi_n = a_n z_n^{-1} + b_n z_n.$$

Auflösen dieser Gleichungen nach a_1 und a_n liefert letztlich die QTBM-Randbedingungen für die betrachteten Streuzustände:

$$a_1 = \frac{\psi_0 - z_1 \psi_1}{z_1^2 + 1} = \alpha_1 \psi_0 + \beta_1 \psi_1,$$

$$a_n = \frac{\psi_{n+1} - z_n \psi_n}{z_n^2 + 1} = \alpha_n \psi_{n+1} + \beta_n \psi_n.$$

Werden diese beiden Gleichungen zur Matrix-Darstellung der Schrödinger-Gleichung (9.2) hinzugefügt, folgt das schließlich zu lösende, bei festgehaltener Energie E lineare Gleichungssystem

$$G^{-1} \psi = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ -s_1 & d_1 - E & -s_2 & & \\ & -s_2 & d_2 - E & -s_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -s_n & d_n - E & -s_{n+1} \\ & & & & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \\ \psi_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_n \end{pmatrix}. \quad (9.3)$$

9.1.2 Einfallende, resonante und gebundene Zustände

Um den links-einfallenden Streuzustand zu erhalten, muss man lediglich $a_1 = 1$ und $a_n = 0$ setzen, für den rechts-einfallenden Streuzustand umgekehrt $a_1 = 0$ und $a_n = 1$. Das resultierende lineare Gleichungssystem wird dann mittels LU-Zerlegung gelöst. Unabhängig von diesen einfallenden Zuständen existieren zudem gebundene Zustände,

für die a_1 und a_n zu Null gesetzt werden. Die Lösung eines gebundenen Zustands ist rein reell, die Matrix in (9.3) dann singulär. Ähnlich weist die Matrix einen quasi-singulären Charakter für die resonanten, quasi-gebundenen Zustände auf.

Die Streuresonanzen des Systems lassen sich als Pole der es beschreibenden Green-Funktion auf der komplexen Ebene bestimmen. Da die Matrix (9.3) der Nenner eben dieser Green-Funktion ist, lässt sich die Polsuche der Green-Funktion auf die Nullstellensuche der Determinanten der Matrix (9.3) zurückführen. Diese ist im Allgemeinen nicht hermitesch und lässt somit komplexe Eigenwerte zu. Darüber hinaus sind die α_i und β_i energieabhängig, weshalb das Gleichungssystem für die Streuresonanzen ($a_1 = a_n = 0$) nichtlinear wird.

Um die Nullstellen der Determinanten der Matrix $G^{-1}(E)$ zu bestimmen, wird zuerst ihr Wert als Funktion $f(E)$ einer komplexen Energie E rekursiv berechnet:

$$\begin{aligned} f_0 &= \alpha_1 \\ f_1 &= \alpha_1(d_1 - E) + s_1\beta_1 \\ f_m &= (d_{m-1} - E)f_{m-1} - s_{m-1}^2 f_{m-2}, \quad 2 \leq m \leq n \\ f_{n+1} &= \alpha_n f_n + s_{n-1}\beta_n f_{n-1}. \end{aligned}$$

Die komplexe Abbildung $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ wird hier als mehrdimensionale, reelle Abbildung $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ implementiert.

Schließlich findet man die Nullstellen von f mit einem Algorithmus, der zuerst entlang einer leicht in negative imaginäre Richtung verschobenen, zur reellen Achse parallelen Geraden nach den „Tälern“ von $|f|$ sucht, um danach mit einem mehrdimensionalen rücklaufenden Newton-Raphson-Algorithmus [60] die eigentlichen Nullstellen zu bestimmen. Das Ergebnis ist im Falle gebundener Zustände eine rein reelle Energie oder die komplexe Energie $E = E_0 - i\Gamma$, mit der Resonanzenergie E_0 und der Resonanzbreite Γ , für resonante Zustände. Γ ist mit der Lebensdauer τ der Teilchen im quasi-gebundenen Zustand zu E_0 über $\tau = \hbar/\Gamma$ verknüpft. Eine komplexe Energie hat zur Folge, dass ihr Eigenzustand mit der Zeit zerfällt, d.h. die Teilchen das Rechengebiet nach der mittleren Verweildauer τ verlassen.

9.1.3 Quantenmechanische Bestimmung der Elektronendichte

Die statistisch gemittelte Teilchendichte eines Satzes nicht wechselwirkender, freier Teilchen lässt sich als die Aufenthaltswahrscheinlichkeit berechnen, die ein einzelnes Teilchen im gemischten Zustand $|\psi\rangle$ aufweisen würde, welcher aus der Überlagerung eines vollständigen Satzes von Eigenzuständen $|\psi_i\rangle$ des zugehörigen Einteilchen-Anteiles des (separierbaren) Hamilton-Operators des Systems

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{f_i} |\psi_i\rangle \quad (9.4)$$

besteht. Dazu wird eine statistische Gewichtung f_i für die Besetzungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Zustände $|\psi_i\rangle$ eingeführt. Die Teilchendichte n des betrachteten statistischen Ensembles ergibt sich dann zu

$$n = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i,j} \sqrt{f_i f_j} \langle \psi_i | \psi_j \rangle. \quad (9.5)$$

Die in Abschnitt 9.1.1 verwendeten einfallenden Streuzustände stellen einen vollständigen Satz orthonormierter Zustände des Hamilton-Operators des freien Teilchens mit konstanter Masse dar. So sind die Eigenzustände des (gestörten) Hamilton-Operators orthonormal [61]

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} .$$

Der Satz von Zuständen $|\psi_i\rangle$ ist jedoch nur dann vollständig, wenn der Hamilton-Operator keine gebundenen Zustände zulässt. Diese möglichen gebundenen Zustände sind wiederum orthogonal zu den obigen Streuzuständen $|\psi_i\rangle$ und müssen zu diesen hinzugefügt werden [61]. Damit ergibt sich die statistische Teilchendichte zu

$$n = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_k f_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle + \sum_i f_i \langle \psi_b^i | \psi_b^i \rangle .$$

In der Ortsdarstellung wird daraus

$$n(\vec{r}) = 2 \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{k} \left| \psi_{\rightleftharpoons}(\vec{r}, \vec{k}) \right|^2 f(\vec{k}) + 2 \sum_{\vec{k}_b} \left| \psi_{\vec{k}_b}^-(\vec{r}) \right|^2 f(\vec{k}_b) . \quad (9.6)$$

Für *quantisierte* Zustände folgt unter der Annahme unendlich ausgedehnter Halbleiterschichten, dass die Wellenfunktionen in den als translationsinvariant angenommenen Richtungen die Form von ebenen Wellen annehmen, so dass sich (9.6) zu

$$\begin{aligned} n(\vec{r}) &= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}} dk_{\parallel} \left| \psi(r_{\parallel}, k_{\parallel}) \right|^2 \int_{\mathbb{R}^2} d\vec{k}_{\perp} f(\vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp}) \\ &\quad + \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{k_{b\parallel}} \left| \psi(r_{\parallel}, k_{b\parallel}) \right|^2 \int_{\mathbb{R}^2} d\vec{k}_{b\perp} f(\vec{k}_{b\parallel} + \vec{k}_{b\perp}) \end{aligned} \quad (9.7)$$

ergibt.

Für die *Kontinuumszustände* lässt sich die Teilchendichte weiter präzisieren [57]:

$$\begin{aligned} n(x) &= \frac{k_B T}{\sqrt{2\pi} \hbar^3} \left\{ m_e^{3/2} \int_{E_e}^{\infty} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{Ce}}} |\psi_{e \rightarrow c}(x, E)|^2 \ln(1 + \exp[(\mu_e - E)/(k_B T)]) \right. \\ &\quad \left. + m_c^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{Cc}}} |\psi_{c \rightarrow e}(x, E)|^2 \ln(1 + \exp[(\mu_c - E)/(k_B T)]) \right\} \\ &\quad + \frac{m_b(x) k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{E_b} |\psi_b(x, E_b)|^2 \ln(1 + \exp[(\mu_b - E_b)/(k_B T)]) . \end{aligned} \quad (9.8)$$

Dabei stehen die Indizes e und c jeweils für Kathode und Anode.

9.1.4 Selbstkonsistente Potenzialbestimmung

Die nichtlineare Poisson-Gleichung

Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen der Halbleiter-Heterostruktur untereinander wird semiklassisch berücksichtigt. Von den Elektronendichten (9.8) wird gefordert, dass sie ein elektrostatisches Potenzial Ψ erzeugen, welches zusammen mit diesen Elektronendichten n und den semiklassischen Löcher- p und Ionisierungsdichten N_A und N_D der eindimensionalen Poisson-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial x} \varepsilon(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = e (n(x) - p(x) + N_A(x) - N_D(x)) \quad (9.9)$$

genügt. Dabei wird bei der Bestimmung der Lösungen ψ der Schrödinger-Gleichung, die für die Auswertung von (9.8) nötig sind, die Energie eines Elektrons im elektrostatischen Potenzial, $-e\Psi$, zum Verlauf der Leitungsbandkanten E_c der Heterostruktur hinzuaddiert: $E_c \rightarrow E_c - e\Psi$ (selbstkonsistente Bandverformung).

Man berücksichtigt die Coulomb-Wechselwirkung der quantenmechanisch modellierten Elektronen untereinander also *semiklassisch* durch selbstkonsistentes Lösen der eindimensionalen Einteilchen-Schrödinger-Gleichung und der eindimensionalen Poisson-Gleichung. Dies erfolgt über die Lösung der nichtlinearen Poisson-Gleichung (9.9), in der die Elektronendichte n nach (9.8) berechnet wird.

Lösung mit einem erweiterten Gummel-Algorithmus

Die nichtlineare Poisson-Gleichung wird mit einer eigens entwickelten Variante des Gummel-Algorithmus iterativ gelöst [57].

Zunächst wird die Poisson-Gleichung, wie im Abschnitt 8.1 beschrieben, mit semiklassisch gerechneten Teilchendichten gelöst. Die Ergebnisse für die Löcher- und Ionisierungsdichten werden in allen weiteren Schritten festgehalten. Die Elektronendichte und das Potenzial jedoch dienen als Startwerte für die folgenden Iterationen. Sie werden bis zur ersten Ordnung nach Taylor entwickelt. Die Ableitung der Elektronendichte nach dem Potenzial aber wird hier, anders als im ursprünglichen Gummel-Algorithmus, als finite Differenz formuliert

$$\Psi^{i+1}(x) = \Psi^i(x) + \delta\Psi^i(x), \quad (9.10)$$

$$n^{i+1}(x) = n^i(x) + \frac{n^i(x) - n^{i-1}(x)}{\Psi^i(x) - \Psi^{i-1}(x)} \cdot \delta\Psi^i(x). \quad (9.11)$$

Diese beiden Gleichungen werden in die Poisson-Gleichung eingesetzt, und eine Bestimmungsgleichung für $\delta\Psi^i$ ist gefunden

$$\begin{aligned} (\Psi^i(x) - \Psi^{i-1}(x)) \frac{\partial}{\partial x} \varepsilon(x) \frac{\partial}{\partial x} \delta\Psi^i(x) - e (n^i(x) - n^{i-1}(x)) \delta\Psi^i(x) = \\ e (\Psi^i(x) - \Psi^{i-1}(x)) (n^i(x) - p(x)) - (\Psi^i(x) - \Psi^{i-1}(x)) \frac{\partial}{\partial x} \varepsilon(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^i(x). \end{aligned} \quad (9.12)$$

Randbedingungen und Konvergenz

Für das Gleichungssystem des diskretisierten Problems werden Dirichlet-Randbedingungen mit den Randwerten Null für den Wert der Abweichung $\delta\Psi$ links und rechts vom Rechengebiet gewählt. Damit ist gewährleistet, dass das am Ende des Algorithmus bestimmte elektrochemische Potenzial an den Rändern des Rechengebietes die semiklassischen Werte der Fermi-Nivaus der Halbleiterschichten jeweils am linken und am rechten Rand der Heterostruktur behält, die zu Beginn durch die Festlegung von $\Psi_0(\vec{r})$ als semiklassische Lösung der Poisson-Gleichung in die Berechnung einfließen. Das entstehende lineare Gleichungssystem kann mittels einer gewöhnlichen LU-Zerlegung gelöst werden. Das Verfahren zeigt ein ähnlich gutes Konvergenzverhalten wie der eigentliche Gummel-Algorithmus. Bei allen bisher durchgeführten Berechnungen waren die Werte der Ableitungen der Teilchendichten nach dem Hartree-Potenzial in den ersten Iterationen genau genug, um das Verfahren zur Konvergenz zu bringen. Um den Zeitaufwand für die Berechnung der Integrale in (9.8) in Grenzen zu halten, werden die Streuresonanzen des Systems wie im Abschnitt 9.1.2 vorgestellt ermittelt, um anhand ihrer Breiten ein variierendes Energiegitter zu erzeugen. Durch Anpassen des Energiegitters lässt sich Gleichung (9.8) in einem Bruchteil der Zeit auswerten, die im Falle eines äquidistanten Energiegitters bei gleicher Genauigkeit in Anspruch genommen würde.

9.2 Berechnung der Dichtematrix

Durch die Lösung der Schrödinger-Gleichung ist ein Ausgangspunkt für die Bestimmung der Elektronen-Dichtematrix gefunden. Diese ergibt sich als Lösung der Bewegungsgleichung der Quantenstatistik, der Liouville-von Neumann-Gleichung (5.4), welche schon aus Abschnitt 5.2 bekannt ist.

Zunächst wird für den Fall des thermodynamischen Gleichgewichts gezeigt, weshalb eine direkte Lösung der Dichtematrixgleichung aufgrund des hyperbolischen Operators problematisch ist, so dass die Dichtematrix aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung (vgl. Abschnitt 9.1) bestimmt werden muss. Sie ist nun Ausgangspunkt für die transiente Lösung der Liouville-Gleichung. Die stationären Nichtgleichgewichtszustände ergeben sich dann als eingeschwungene Lösung der transienten Berechnung unter entsprechender Vorspannung.

Dissipative Prozesse im Festkörper werden wie im hydrodynamischen Modell mit einem Relaxationszeitansatz modelliert. Dies ist einerseits der besseren Vergleichsmöglichkeit mit kinetischen Modellen, aber auch andererseits der numerischen Realisierbarkeit geschuldet. Besondere Schwierigkeiten bereitet die Wahl sinnvoller Randbedingungen für den Liouville-Operator, der für Transportprozesse nicht-hermitesch wird [31]. So muss eine ausreichende Dämpfung durch den Relaxationsansatz exponentiell wachsende Werte für die Dichtematrix verhindern. Für die Konvergenz der Berechnungen ist daher die Abstimmung von Randbedingungen und Relaxationszeit wichtig.

9.2.1 Die Liouville-Gleichung für Elektronen

Abschnitt 5.2 zeigt die Liouville-Gleichung in der Ortsdarstellung. Der statische Gleichgewichtsfall ist für den einfachen Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_{\vec{r}} \frac{1}{m} \nabla_{\vec{r}} + V(\vec{r}) \quad (9.13)$$

durch

$$\left[\frac{\hbar^2}{2} \left(\nabla_{\vec{r}_1} \frac{1}{m(\vec{r}_1)} \nabla_{\vec{r}_1} - \nabla_{\vec{r}_2} \frac{1}{m(\vec{r}_2)} \nabla_{\vec{r}_2} \right) - V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) \right] C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (9.14)$$

gegeben. Im zeitabhängigen Nichtgleichgewicht kommt ein irreversibler Relaxationsterm hinzu:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{12}(t) = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hbar^2}{2} \left(\nabla_1 \frac{1}{m_1} \nabla_1 - \nabla_2 \frac{1}{m_2} \nabla_2 \right) - V_1(t) + V_2(t) \right] C_{12}(t) + H_{coll} C_{12}(t) . \quad (9.15)$$

Die Ortsabhängigkeiten \vec{r}_1 und \vec{r}_2 sind durch einfache Indizes ersetzt und der Kollisionsoperator H_{coll} ist eingeführt worden.

Analytische Lösungen

Für ein konstantes Potenzial im thermodynamischen Gleichgewicht lassen sich analytische Lösungen für die Liouville-Gleichung finden [32]. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind dann einfache ebene Wellen

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}} , \quad (9.16)$$

so dass die elektronische Dichtematrix zu

$$C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} d^3k \quad (9.17)$$

wird. Dabei bezeichnet f die Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(\vec{k}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E(\vec{k}) - \mu}{k_B T}\right)} . \quad (9.18)$$

Abb. 9.1 zeigt den Verlauf von (9.17) für ein Ensemble freier, nicht wechselwirkender Elektronen mit einem Fermi-Niveau von etwa 5 meV.

Für geringe Dotierungen gilt die Boltzmann-Verteilung und die Dichtematrix wird zu

$$C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 2 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{1}{k_B T} (E_c - \mu) - \frac{mk_B T}{2\hbar^2} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 \right] \quad (9.19)$$

mit einem Gauss-förmigen Verlauf der der thermischen Kohärenzlänge entsprechenden Breite

$$\lambda_{th} = \frac{\hbar}{\sqrt{mk_B T}}$$

um die Hauptdiagonale. Dieser Verlauf ist in Abbildung 9.2 dargestellt. Im Gegensatz zu Abb. 9.1 unterschreitet der Verlauf den Wert Null nicht mehr.

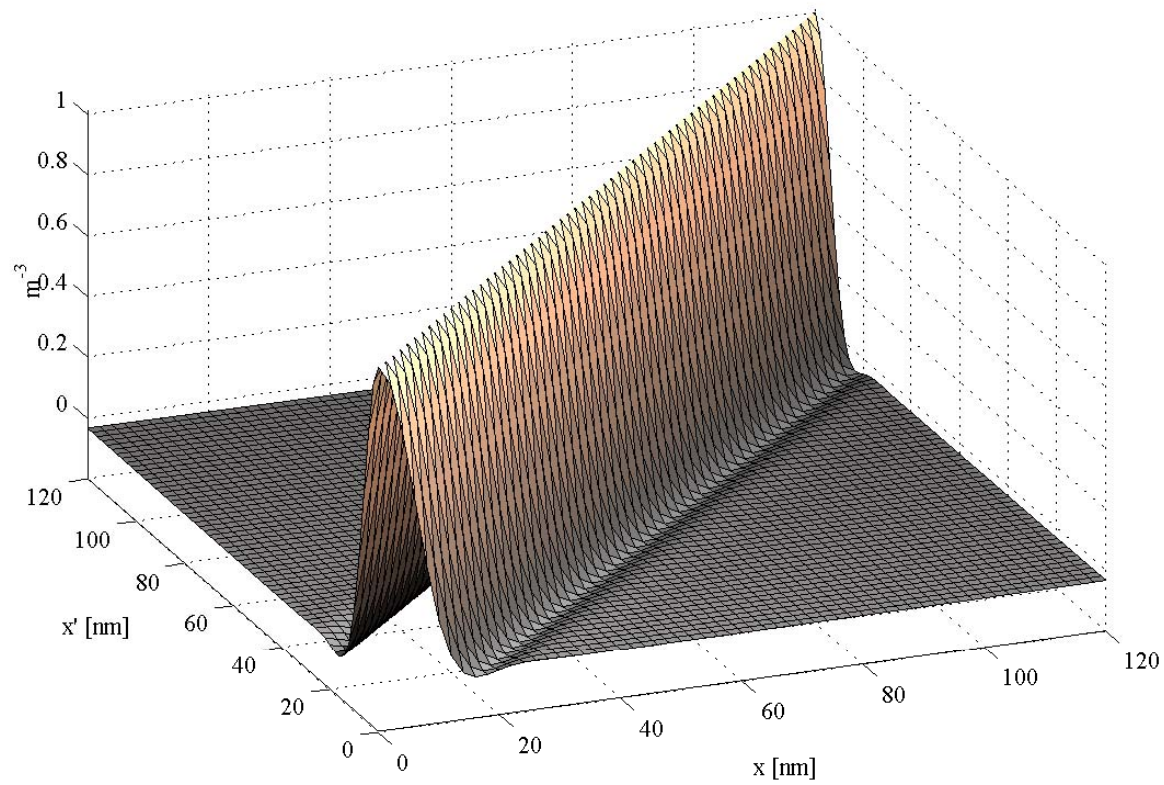


Abbildung 9.1: Auf Eins normierte Dichtematrix freier Elektronen bei einer Temperatur von 300 K mit der Fermi-Dirac-Verteilung

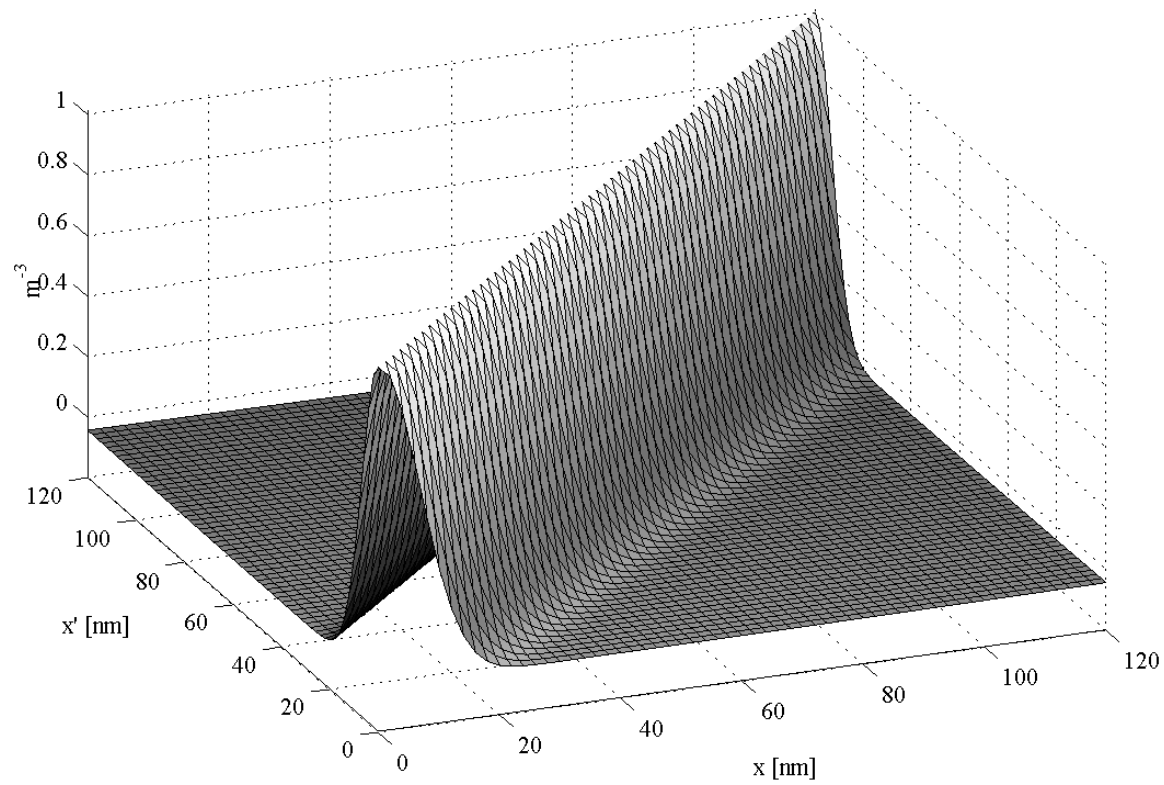


Abbildung 9.2: Auf Eins normierte Dichtematrix freier Elektronen bei einer Temperatur von 300 K mit der Boltzmann-Näherung

9.2.2 Lösung im Gleichgewicht

Direkte Lösung

Zunächst führt der Versuch, die stationäre Liouville-Gleichung direkt auf einem diskretisierten Rechengebiet zu lösen, zu einer schlecht konditionierten Systemmatrix. Grund hierfür ist der hyperbolische Operator in Gleichung (9.14), der mit seiner Differenzbildung zu Hauptdiagonalelementen nahe Null führt, während die Nebendiagonalelemente bei feinerer Diskretisierung deutlich größer werden.

Für geringe Dotierungen und ausreichend breite Schichten am Rand der Struktur wird angenommen, dass die Randwerte der Dichtematrix annähernd der analytischen Lösung (9.19) des Problems entsprechen (Dirichlet-Randbedingungen). Unterschreitet die Diskretisierungsweite dabei Werte um 1 nm nicht, so können durch die direkte Lösung durchaus sinnvolle Ergebnisse erzielt werden [47]. Für den praktischen Fall kann jedoch nicht von niedrigen Dotierungen ausgegangen werden, weshalb dieses direkte Lösungsverfahren nicht zufrieden stellend angewandt werden kann.

Auch der Einsatz der von Neumann-Randbedingung anstelle der Dirichlet-Randbedingung ändert nichts an der grundsätzlichen Problematik, die auf den Operator in der Liouville-Gleichung zurückzuführen ist.

Bestimmung der Gleichgewichts-Dichtematrix über die Schrödinger-Gleichung

Einen Ausweg bietet die Lösung der Schrödinger-Gleichung (s. Abschnitt 9.1), welche der Dichtematrix zugrunde liegt. Die Definition der Dichtematrix

$$C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 2 \sum_i \psi_i(\vec{r}_1) \psi_i^*(\vec{r}_2) f(E_i) \quad (9.20)$$

verdeutlicht diesen Zusammenhang. Hier steht der Faktor 2 für die beiden möglichen Spinzustände, die Korrelation der Wellenfunktionen ist mit der Besetzungswahrscheinlichkeit f gewichtet. Für eine vollständige Erfassung des Systems ist es erforderlich, sowohl gebundene als auch Kontinuumszustände zu berücksichtigen

$$C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 2 \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{k} \psi_{\vec{r}}(\vec{r}, \vec{k}) \psi_{\vec{r}}^*(\vec{r}, \vec{k}) f(\vec{k}) + 2 \sum_{\vec{k}_b} \psi_{\vec{k}_b}(\vec{r}_1) \psi_{\vec{k}_b}^*(\vec{r}_2) f(\vec{k}_b) . \quad (9.21)$$

Analog zu Abschnitt 9.1.3 ergibt sich schließlich die Dichtematrix zu [57]

$$C(x_1, x_2) = \quad (9.22)$$

$$\frac{k_B T}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \left\{ m_e^{3/2} \int_{E_e}^{\infty} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{Ce}}} \psi_{\rightarrow}(x_1) \psi_{\rightarrow}^*(x_2) \ln(1 + \exp[(E_{Fe} - E)/(k_B T)]) \right.$$

$$\left. + m_c^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \frac{dE}{\sqrt{E - E_{Cc}}} \psi_{\leftarrow}(x_1) \psi_{\leftarrow}^*(x_2) \ln(1 + \exp[(E_{Fc} - E)/(k_B T)]) \right\}$$

$$+ \frac{k_B T}{\pi \hbar^2} \sqrt{m_b(x_1)m_b(x_2)} \sum_{E_b} \psi_b(x_1, E_b) \psi_b^*(x_2, E_b) \ln(1 + \exp[(\mu_b - E_b)/(k_B T)]) .$$

Bei der Implementierung muss beachtet werden, dass eine größere Anzahl an Diskretisierungspunkten ($n \gtrsim 150$ Punkte) sehr aufwändig zu berechnen ist. Die Integrale der obigen Gleichung werden jeweils zu einer Summe über der Energie. Für jeden Summationsschritt allerdings müssen sämtliche Elemente (n^2) der Dichtematrix berechnet werden. Bei einem symmetrischen Potenzialverlauf kann immerhin die zweifache Symmetrie der Matrix genutzt werden, um den Rechenaufwand auf ein Viertel zu reduzieren. Doch auch ohne symmetrisches Potenzial ist zumindest eine einfache Symmetrie der Dichtematrix gegeben.

9.2.3 Lösung im Ungleichgewicht

Der Kollisionsoperator

Irreversible Prozesse im Material werden über den so genannten Kollisionsoperator H_{coll} in Gleichung (9.15) beschrieben. Ein zufrieden stellendes Modell ist bislang nicht gefunden. Zum einen muss der resultierende Liouville-Operator $\hat{\mathcal{L}}$ (5.4) hermitesch bleiben, zum anderen darf die Spur der Dichtematrix nicht verändert werden, um ein physikalisch sinnvolles System zu beschreiben. Leider ist die Lösung der Liouville-Gleichung für sich schon äußerst kompliziert, der Operator sollte demnach einfach aufgebaut sein. Deshalb kommen einige vorgeschlagene Ansätze [62, 63] nicht in Frage. Doch lässt sich der irreversible Anteil der Liouville-Gleichung mit einem Relaxationszeitansatz [64] modellieren, der auch für die hydrodynamischen Gleichungen verwandt wurde. Damit sind beide Modelle einfacher miteinander vergleichbar.

Der typische Ansatz

$$H_{coll}C = -\frac{C - C_{QE}}{\tau} \quad (9.23)$$

mit der Relaxationszeit τ muss gewährleisten, dass die Relaxationsgröße C_{QE} zu jedem Zeitpunkt dieselbe Ladungsträgerverteilung erzeugt wie $C(t)$ selbst, um die Kontinuitätsgleichung nicht zu verletzen. Dies kann die Gleichgewichtsdichtematrix nicht leisten, welche sowohl die Ladungsträger- als auch die Impulsverteilung beeinflussen würde. Ein Relaxationsansatz darf aber nur die Impulsverteilung verändern. Außerdem muss eine verschwindende Stromdichte den Zustand C_{QE} kennzeichnen.

Der Ansatz von Frensky [64]

$$C_{QE}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \sqrt{C(\vec{r}_1, \vec{r}_1; t)C(\vec{r}_2, \vec{r}_2; t)} \exp\left(-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}{2\lambda_{th}^2}\right) \quad (9.24)$$

dagegen stimmt für Boltzmann-Statistik mit (9.19) überein. Für den hier betrachteten genaueren Fall der Fermi-Dirac-Statistik jedoch wird der Ansatz leicht modifiziert. Hierzu ersetzt man die Exponential-Funktion mit der analytischen Lösung der Dichtematrix einer konstanten Heterostruktur im thermodynamischen Gleichgewicht (9.17). Im vorgespannten Fall mit unterschiedlichen Fermi-Niveaus der Teilchenreservoirs kann näherungsweise der Mittelwert der beiden gewählt werden.

Das so modellierte C_{QE} gibt völlig korrekt die Ladungsträgerverteilung der im Gleichgewicht gewonnenen Dichtematrix (9.22) wieder.

Randbedingungen

Die Dichtematrix beschreibt an den Rändern des Rechengebiets die Korrelation der Elektronen an den Elektroden mit allen Orten des Systems. Deshalb müssen von Neumann-Randbedingungen gewählt werden, einen speziellen Ansatz dazu hat Frenley [64] vorgeschlagen:

$$(\nabla_{\vec{r}_1} + \nabla_{\vec{r}_2}) C(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|_{Rand} = 0. \quad (9.25)$$

Hier wird physikalisch für Elektroden angenommen, dass sie ideale Quellen und Senken darstellen, d.h. die Kathode liefert Elektronen beliebiger Energie, ohne dabei den Gleichgewichtszustand einzubüßen, und die Anode absorbiert einfallende Teilchen reflexionsfrei. Gebundene und stark resonante Zustände hingegen sind von den Kontakten unabhängig. Die Randbedingungen werden deshalb zu

$$\nabla_{\vec{r}_1} C(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|_{\vec{r}_1=Rand} = 0, \quad \nabla_{\vec{r}_2} C(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|_{\vec{r}_2=Rand} = 0 \quad (9.26)$$

modifiziert [65].

Stationärer Ansatz

Die stationäre Liouville-Gleichung

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_1 - \hat{H}_2] C_{12} - \frac{C_{12} - C_{QE}}{\tau} = 0 \quad (9.27)$$

lässt sich mit der Korrektur $\delta C_{12} = C_{12} - C_{QE}$ in ein Fixpunktproblem

$$\delta C_{12} = \underbrace{\frac{\tau}{i\hbar} [\hat{H}_1 - \hat{H}_2] (\delta C_{12} + C_{QE})}_{F[\delta C]} \quad (9.28)$$

umformulieren [47]. Berechnungen ergaben allerdings große Instabilitäten, die nur durch äußerst kleine Relaxationszeiten von $\tau \lesssim 10^{-15}$ s oder sehr große Diskretisierungsweiten von $\Delta x \gtrsim 3$ nm zu beheben sind. Auch hier (vgl. 9.2.2) ist die schlechte Konditionierung des hyperbolischen Operators der Grund für die notwendigen großen Schrittweiten.

Zudem stellt dieses Fixpunktproblem eine Art explizites Finite Differenzen-Schema mit der zeitlichen Diskretisierung τ dar. Da der Liouville-Operator durch die Randbedingungen nicht mehr hermitesch ist und komplexe Eigenwerte mit positivem Imaginärteil [31] besitzt, enthält der Zeitentwicklungsoperator einen exponentiell wachsenden Anteil, der für die Instabilität sorgt. Für realistische Relaxationszeiten kann der Algorithmus so nicht konvergieren.

Transiente Lösung

Die Aufgabe besteht nun prinzipiell darin, stationäre Zustände des vorgespannten Systems zu bestimmen, um so eine Strom-Spannungs-Charakteristik zu erhalten. Diese stationären Lösungen sind eingeschwungene Zustände des transienten Verhaltens des gestörten Systems.

Für die Zeitableitung in (9.15) wird ein implizites Schema gewählt, um die numerische Konvergenz zu gewährleisten, da explizite Schemata, wenn sie stabil sein sollen, sehr kleine Zeitschritte benötigen. Das Hartree-Potenzial V_{sc} hängt gemäß der Poisson-Gleichung von den Diagonalelementen der Dichtematrix ab:

$$\nabla \varepsilon(x) \nabla V_{sc}(x, t) = e (C(x, x; t) - p(x) + N_A(x) - N_D(x)) , \quad (9.29)$$

weshalb eine implizite Behandlung hier zu einem Satz von nichtlinearen Gleichungen führen würde. In der vorliegenden Arbeit wird also ein implizites Schema nur für die Dichtematrix benutzt und das Hartree-Potenzial V_{sc} und die Relaxationsgröße C_{QE} explizit behandelt. Die endgültige Finite Differenzen-Gleichung ist dann

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\Delta t} - a \left(\hat{\mathcal{L}}_{12} + \frac{1}{\tau} \right) \right] C_{12}(t + \Delta t) = \\ & = -\frac{C_{QE}(t)}{\tau} + \left[\frac{1}{\Delta t} + (1 - a) \left(\hat{\mathcal{L}}_{12} + \frac{1}{\tau} \right) \right] C_{12}(t) \end{aligned} \quad (9.30)$$

mit dem Liouville-Operator

$$\hat{\mathcal{L}}_{12} = i \frac{\hbar}{2} \left(\nabla_1 \frac{1}{m} \nabla_1 - \nabla_2 \frac{1}{m} \nabla_2 \right) + \frac{1}{i\hbar} (V_1(t) - V_2(t))$$

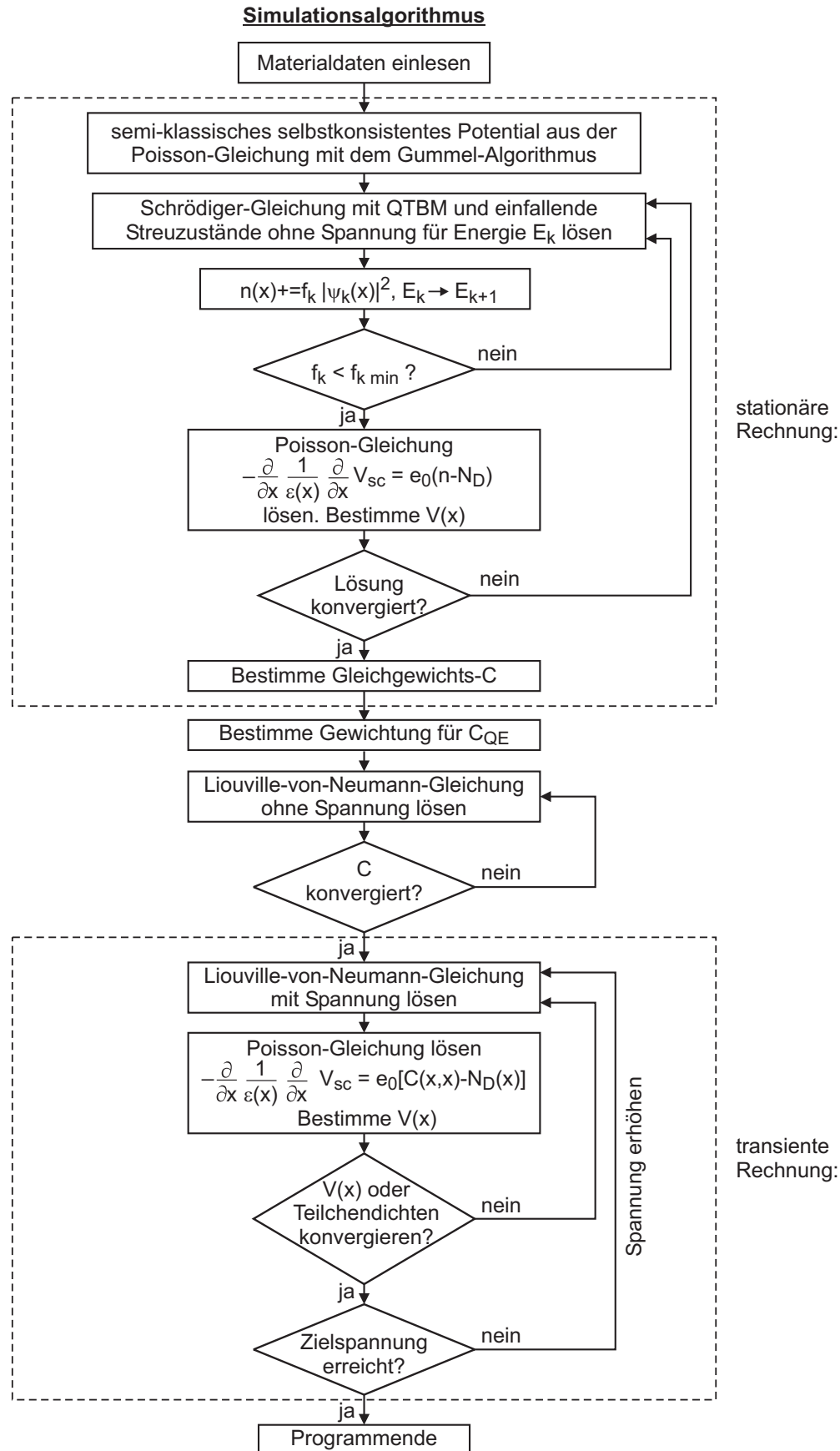
und der numerischen Konstante a , die einen Wert zwischen 0 und 1 abhängig davon annimmt, welches implizite Schema gewählt wird. So steht z.B. $a = 1/2$ für ein Crank-Nicolson-Schema, oder $a = 1$ für ein rücklaufendes Euler-Schema.

Zu jedem Zeitpunkt t werden also aus den bekannten Werten von $C_{12}(t)$ die Relaxationsgröße $C_{QE}(t)$ nach dem verbesserten Frensey-Ansatz (9.24) sowie (9.17) und das Hartree-Potenzial V_{sc} nach (9.29) bestimmt. Letzteres Problem wird als Differenzen-Gleichung in Matrix-Vektor-Darstellung mit Dirichlet-Randbedingungen gelöst, deren Randwerte als Differenz die angelegte Spannung aufweisen. Dies kann in den meisten Fällen mittels LU-Zerlegung erfolgen. In manchen Fällen ist jedoch die rechte Seite von (9.29) so ungünstig besetzt, dass die LU-Zerlegung stark fehlerbehaftet ist. In dem Fall bietet sich eine direkte Integration von (9.29) als Präkonditionierung für ein iteratives Verfahren, z.B. für die Methode der bikonjugierten Gradienten, an.

Die Dichtematrix $C(t)$ wird zeilenweise in einem Vektor abgespeichert. Deshalb kann der Liouville-Operator $\hat{\mathcal{L}}$ unter Berücksichtigung der Randbedingungen als komplexe Bandmatrix implementiert werden. Die rechte Seite von (9.30) lässt sich damit einfach auswerten und wird zu einem Vektor. Das so zu jedem diskreten Zeitpunkt lineare Gleichungssystem wird mit einer Variante der stabilisierten Methode der bikonjugierten Gradienten für nicht symmetrische komplexe Bandmatrizen gelöst.

Während der Simulation werden Veränderungen im Hartree-Potenzial V_{sc} und in den Teilchen- und Stromdichten beobachtet, um die numerische Konvergenz zu überprüfen. Als Konvergenzmaß wird zu jedem Zeitpunkt die Standardabweichung der Werte während der zurückliegenden 100 fs Simulationszeit gewählt.

Der beschriebene Programmablauf ist im Flussdiagramm der Abbildung 9.3 dargestellt.



9.3 Simulationsergebnisse

Der beschriebene Algorithmus wird auf eine AlGaAs/GaAs-Doppelbarrieren-Heterostruktur angewandt, die den Kern einer RTD bildet (Abb. 9.4). Sie besteht aus einem undotierten 5 nm dicken GaAs-Quantentopf, zwei nicht dotierten 4 nm dicken $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$ -Barrieren und je einer hoch n-dotierten ($N_D = 10^{24} \text{ m}^{-3}$), 20 nm dicken GaAs-Kathode und -Anode mit jeweils einer nicht dotierten 6 nm dicken GaAs-Pufferschicht.

Alle den folgenden Ergebnissen zugrunde liegenden Berechnungen erfolgen bei einer Um-

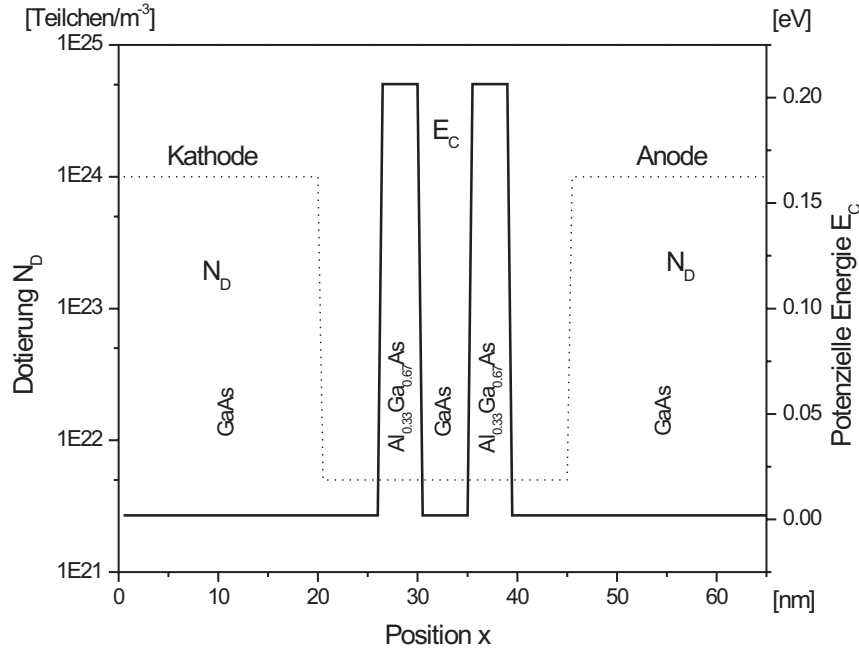


Abbildung 9.4: Verlauf der Leitungsbandkante und der Dotierung der betrachteten Struktur

gebungstemperatur von 300 K. Bei allen Energieangaben in den folgenden Abbildungen wurde die Kathoden- bzw. Anoden-Bandkante als Nullpunkt gewählt. Die räumliche Diskretisierung erfolgt variabel bei Schrittweiten unterhalb 1 nm.

9.3.1 Thermodynamisches Gleichgewicht

Zunächst wird die selbstkonsistente Lösung von Schrödinger- und Poisson-Gleichung nach den Überlegungen aus Abschnitt 9.1 durchgeführt. Abbildung 9.5 zeigt das selbstkonsistente Potenzial und die Teilchendichten für den semiklassischen Fall, die quantenmechanische Rechnung führt zu einem deutlich abgeflachten Verlauf der Teilchendichten (Abb. 9.6), wie dies schon in Abschnitt 6.1 gefordert wurde. Durch Tunnelprozesse haben die Elektronen eine wesentlich höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit auch in den Barrieren.

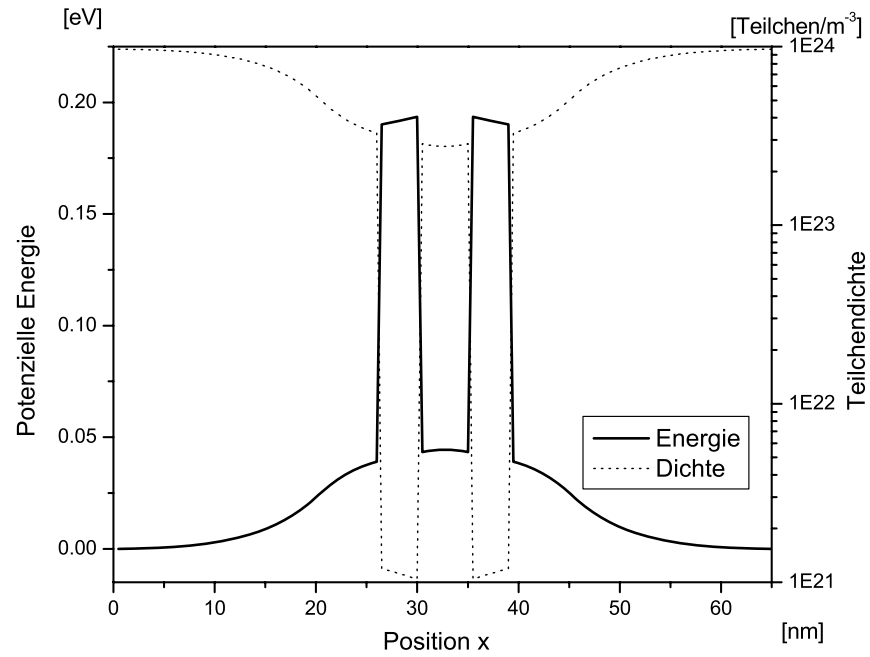


Abbildung 9.5: Semiklassisches, selbstkonsistentes Potenzial und Elektronendichte

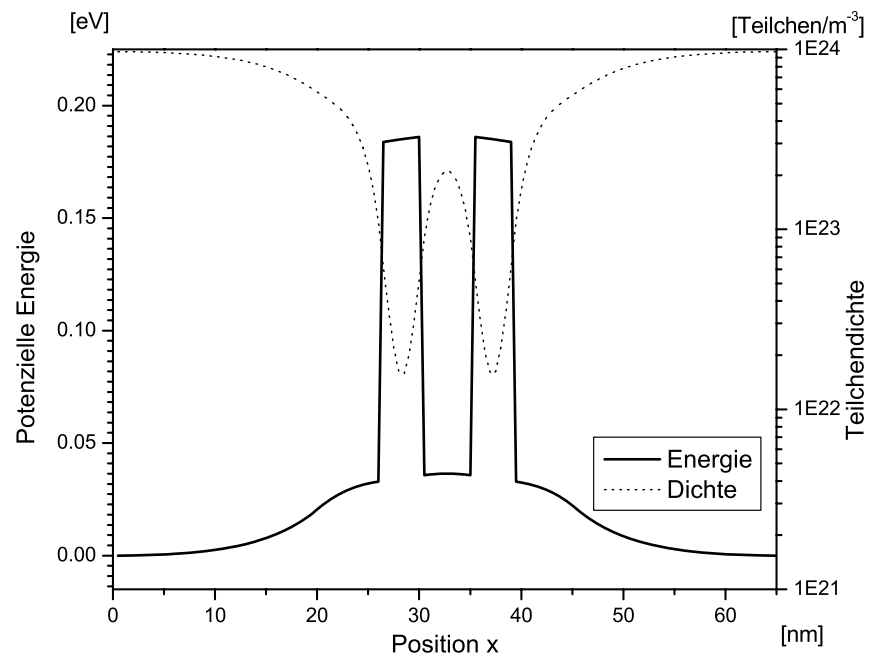


Abbildung 9.6: Quantenmechanisches Potenzial und Elektronendichte

In Abbildung 9.7 setzt sich die Dichtematrix aus der Lösung für die Schrödinger-Gleichung nach Abschnitt 9.2.2 zusammen. Dabei wird für die Energie eine Diskretisierungsweite von 1 meV gewählt, in den resonanten Bereichen jedoch wesentlich feiner aufgelöst.

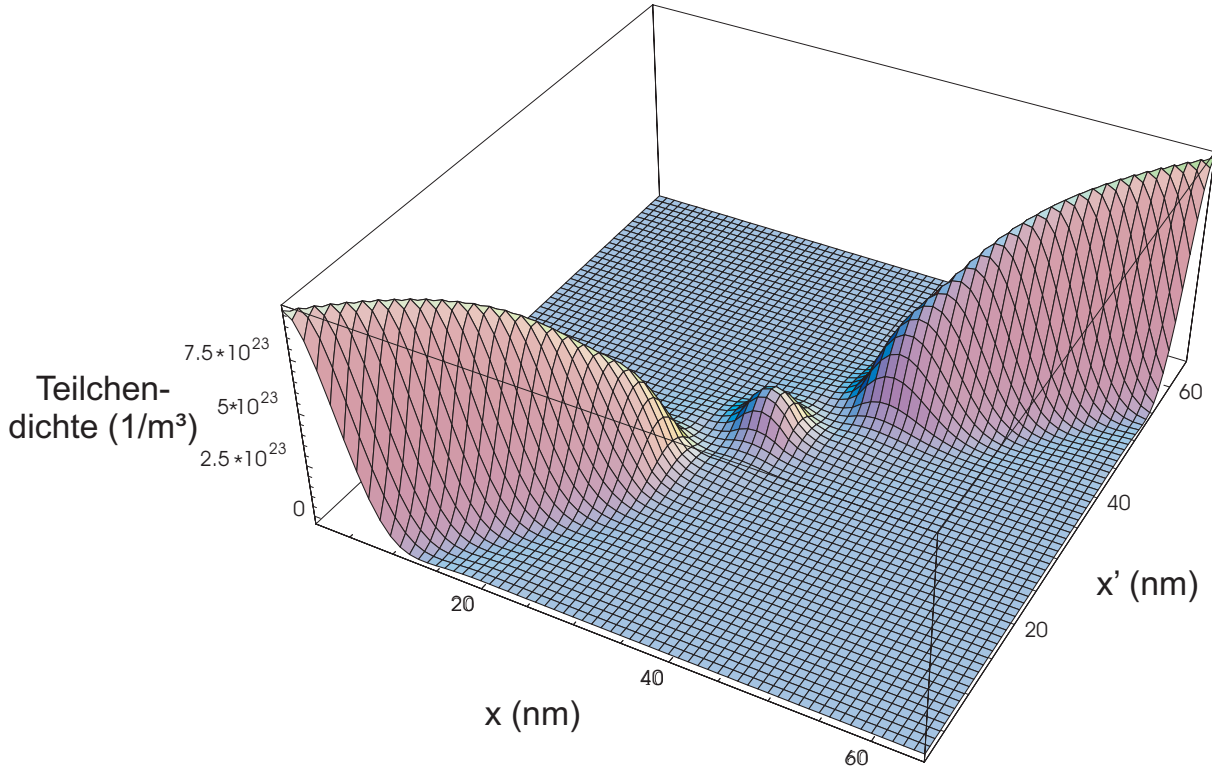


Abbildung 9.7: Gleichgewichts-Dichtematrix (Realteil) für die betrachtete Struktur

9.3.2 Ungleichgewicht, transientes Verhalten

Die in Abschnitt 9.2.3 vorgestellten Randbedingungen führten nur bei niedrigen Spannungen (≤ 150 meV) zu einer ausreichenden Stabilität des Algorithmus und lieferten unphysikalische Kennlinien. Bei dem Versuch, mit anderen Randbedingungen für numerische Stabilität zu sorgen und andererseits glaubwürdige Ergebnisse zu ermöglichen, haben sich letztlich gewöhnliche transmittierende Randbedingungen für die Bereiche der Dichtematrix, die Korrelationen zwischen Anode und Kathode beschreiben, als zweckmäßig erwiesen. Dabei wird angenommen, dass sich die Dichtematrix an den Rändern des Rechengebietes wie eine ebene Welle ausbreitet. Für jeden Zeitschritt wird dann eine von Neumann-Randbedingung neu errechnet. Man extrapoliert deshalb die Dichtematrix C_0^{t+1} außerhalb des Rechengebiets zum Zeitpunkt $t+1$ aus dem benachbarten Punkt innerhalb des Gebiets C_1^{t+1} , indem das komplexe Verhältnis der inneren benachbarten Punkte zum Zeitpunkt t beibehalten wird:

$$C_0^{t+1} = \frac{C_1^t}{C_2^t} C_1^{t+1} . \quad (9.31)$$

Also werden die Frensey-Randbedingung (9.25) nur jeweils auf den Rand der Ohmschen Kontakte und die von Neumann-Randbedingung in kartesischen Richtungen (9.26) auf die

Ränder der Potenzialbarrieren angewandt. An den Rändern, die Korrelationen zwischen Elektronen an der Anode und Elektronen an der Kathode beschreiben, wird die gerade diskutierte transmittierende Randbedingung genutzt.

Die folgenden Abbildungen 9.8 bis 9.15 zeigen das transiente Verhalten der Dichtematrix (Real- und Imaginärteil) bei einer Vorspannung von 110 meV zu den verschiedenen Zeitpunkten 50, 100, 500 und 1000 fs. Die Relaxationszeit ist zu $\tau = 100$ fs gewählt und die Diskretisierung beträgt $\Delta t = 1$ fs.

Auf der Diagonalen des Realteils der Dichtematrix ist jeweils die Verteilung der Ladungsträger zu finden. Die Nichtdiagonalelemente zeigen Korrelationen der Teilchen an verschiedenen Orten, eine Folge ihres quantenmechanischen Charakters. Ausgleichsströme finden zunächst in unmittelbarer Nähe der Hauptdiagonalen statt, sie beruhigen sich aber mit der Zeit.

Der Verlauf der Dichtematrix nach 1000 fs im Bereich der Potenzialbarrieren (in den kartesischen Richtungen) lässt erkennen, dass die in diesen Bereichen beschriebenen resonanten Elektronenzustände mit den quasi-freien Elektronenzuständen in der Kathode und der Anode interferieren. Die Ortsfrequenz dieser Schwingungen zeigt weiterhin, dass die Kohärenz der resonanten Zustände bei Anlegen einer Spannung erhalten bleibt.

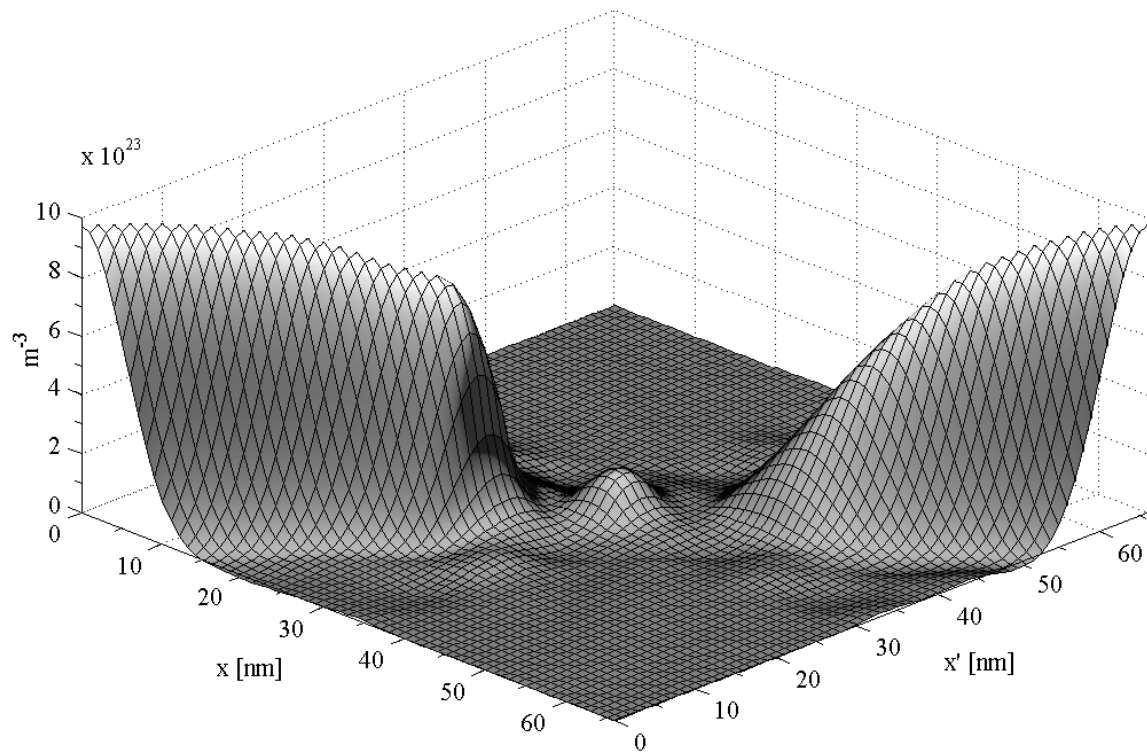


Abbildung 9.8: Realteil der Dichtematrix bei $t = 50$ fs

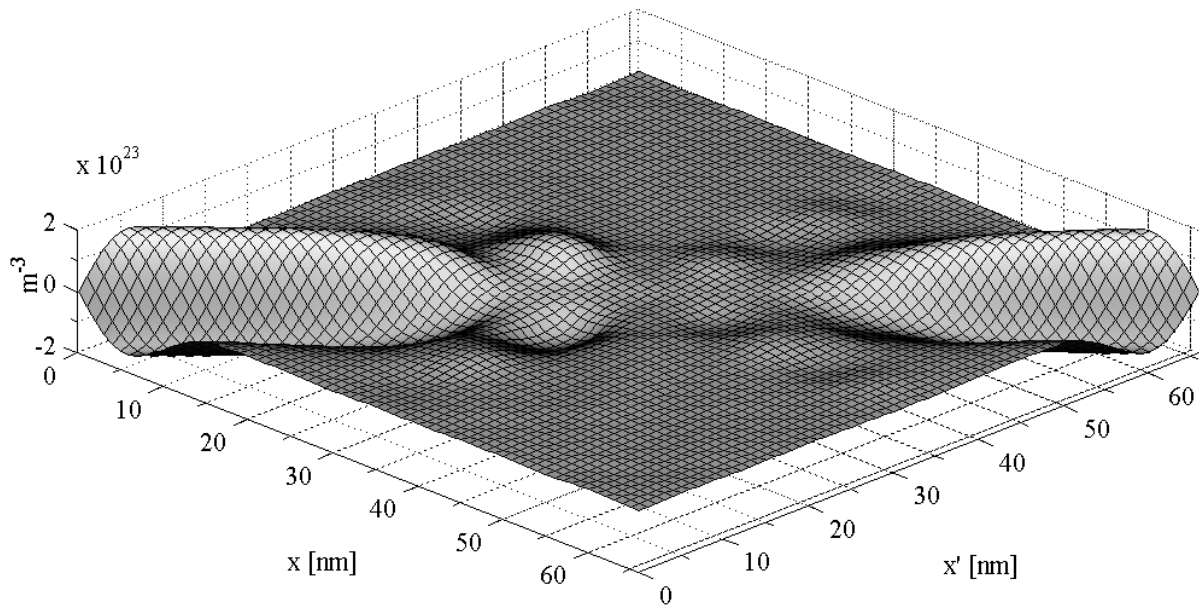
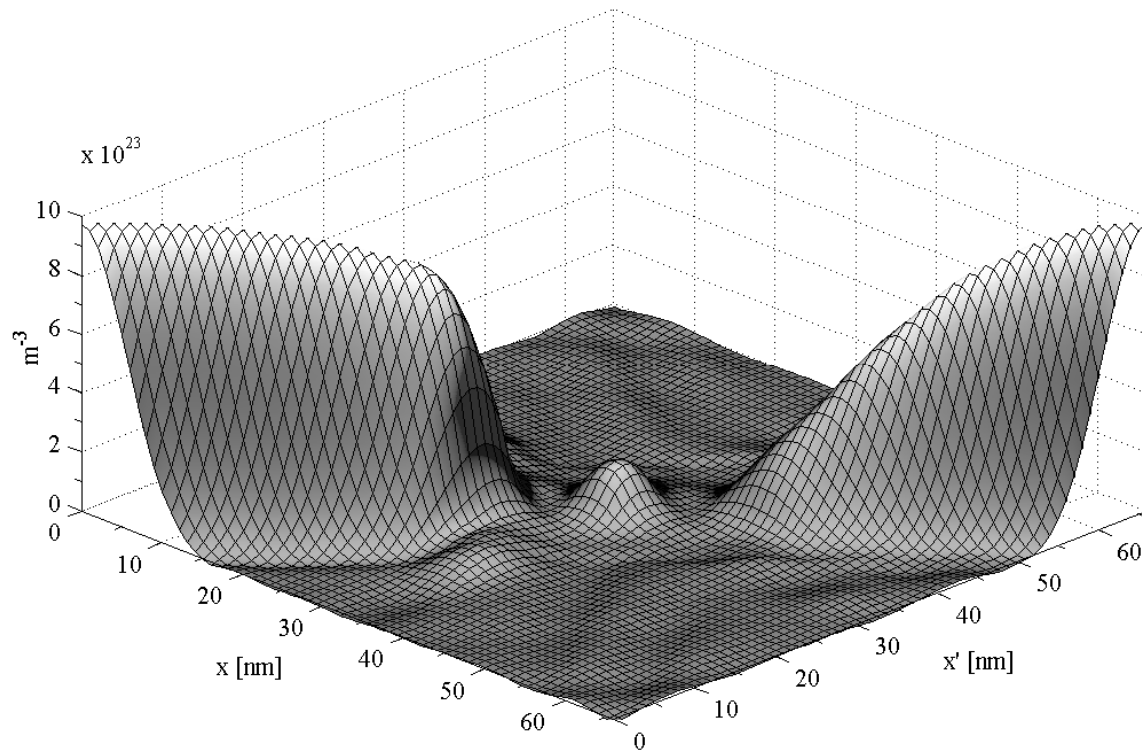
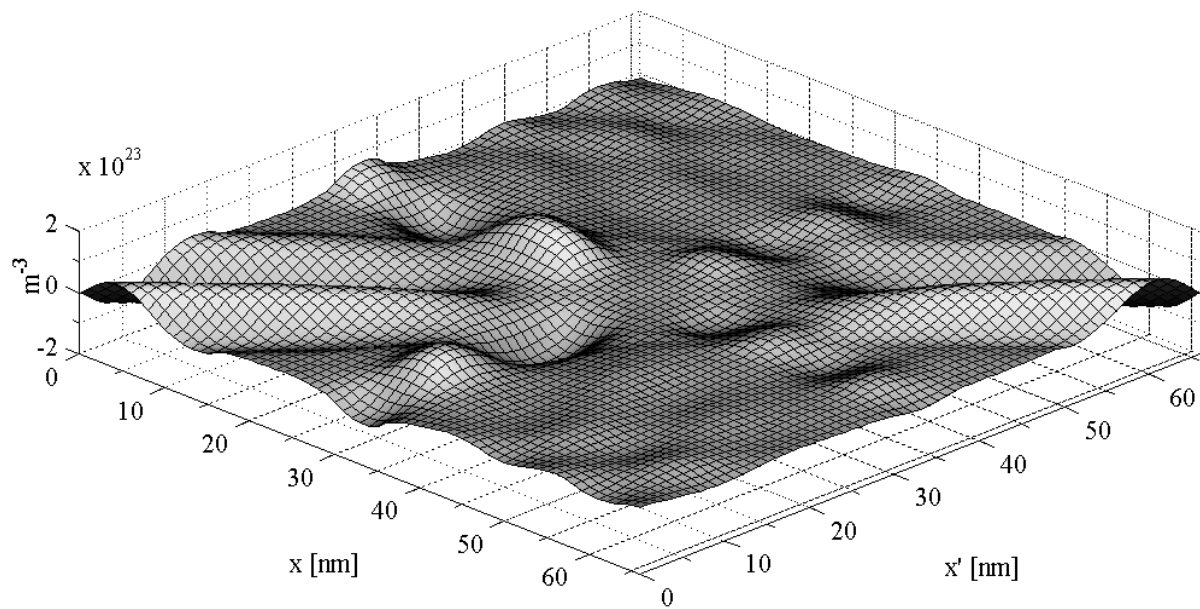


Abbildung 9.9: Imaginärteil der Dichtematrix bei $t = 50$ fs

Abbildung 9.10: Realteil der Dichtematrix bei $t = 100 \text{ fs}$ Abbildung 9.11: Imaginärteil der Dichtematrix bei $t = 100 \text{ fs}$

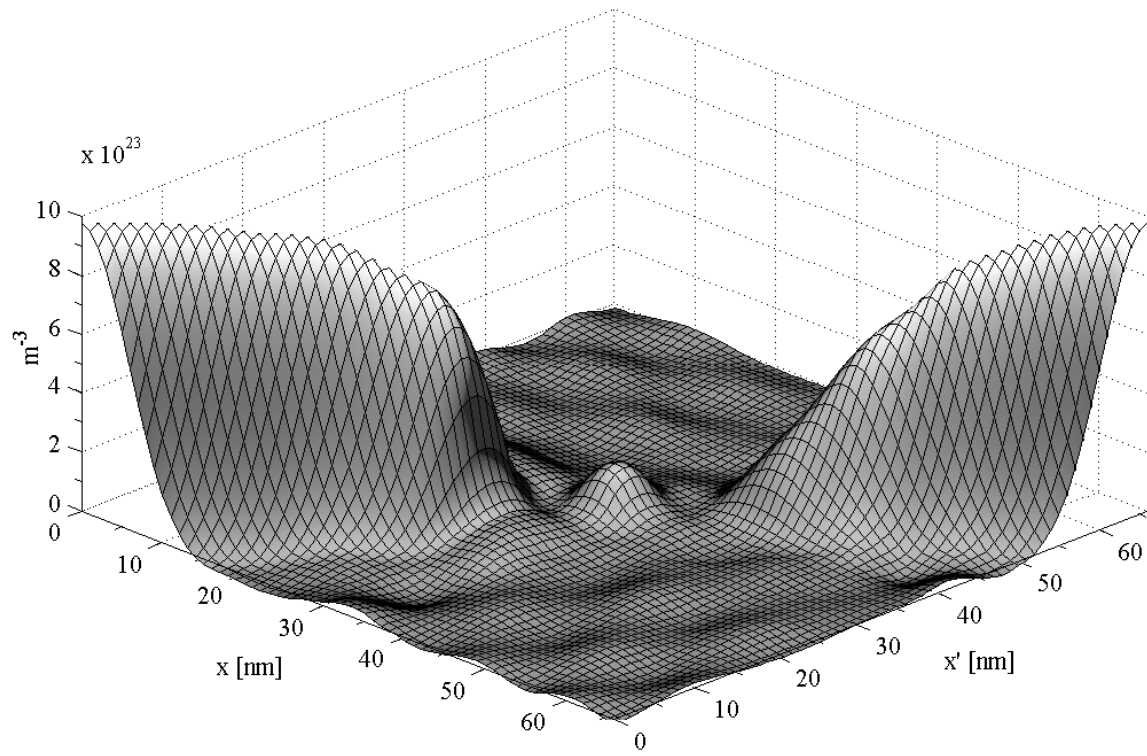


Abbildung 9.12: Realteil der Dichtematrix bei $t = 500$ fs

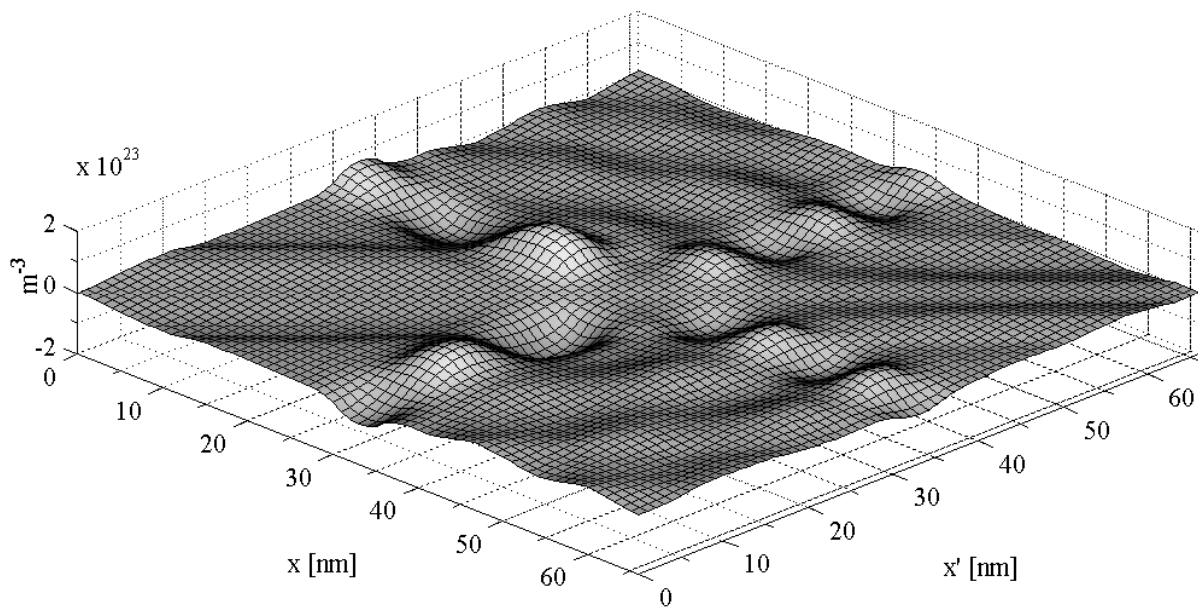


Abbildung 9.13: Imaginärteil der Dichtematrix bei $t = 500$ fs

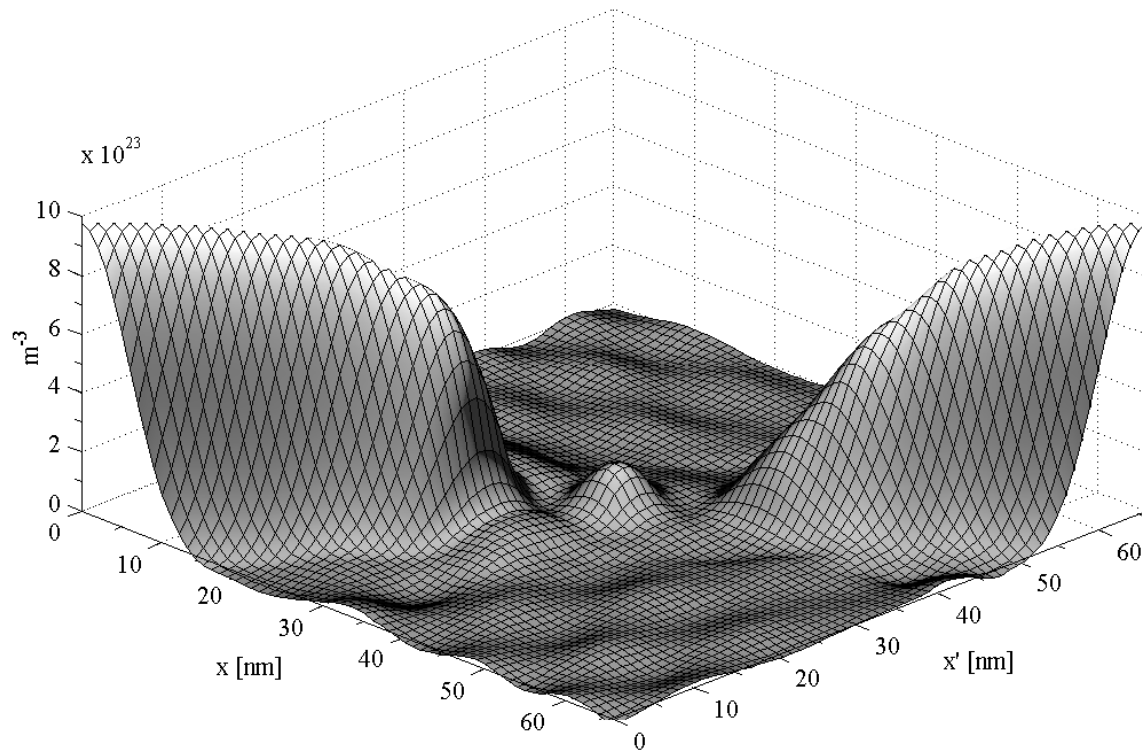


Abbildung 9.14: Realteil der Dichtematrix bei $t = 1000 \text{ fs}$

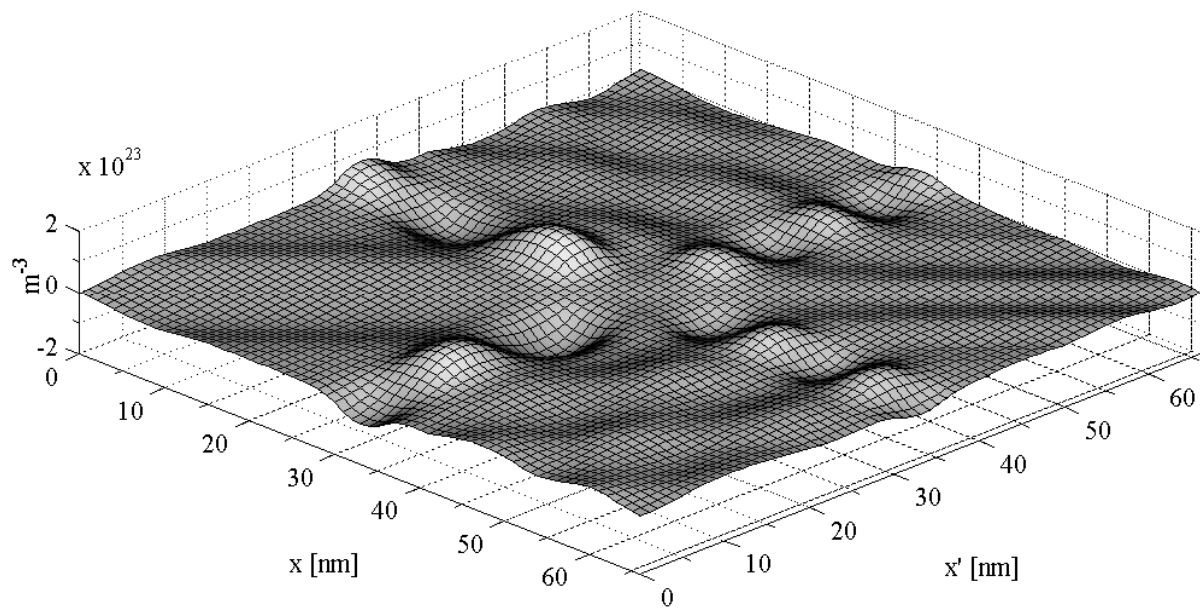


Abbildung 9.15: Imaginärteil der Dichtematrix bei $t = 1000 \text{ fs}$

Den Verlauf der zugehörigen Stromdichte zeigt Abbildung 9.16. Aufgrund der Vernachlässigung eines Verschiebungsstroms in der Berechnung sind die ermittelten Werte für die Stromdichte an der Kathode/Anode um Größenordnungen größer als die entsprechenden Werte innerhalb der Barrieren. Alle Werte konvergieren aber gegen denselben Grenzwert. Zu allen Zeitpunkten kann die Stromdichte an der Kathode/Anode als resultierende Stromdichte betrachtet werden, da an diesen Punkten die Zeitableitung des selbstkonsistenten Potenzials aufgrund der Randbedingungen mitsamt dem Verschiebungsstrom verschwindet. Der stationäre Zustand wird nach etwa 1300 fs erreicht. Das selbstkonsistente Potenzial und die Elektronendichte nach 1500 fs sind in Abbildung 9.17 dargestellt.

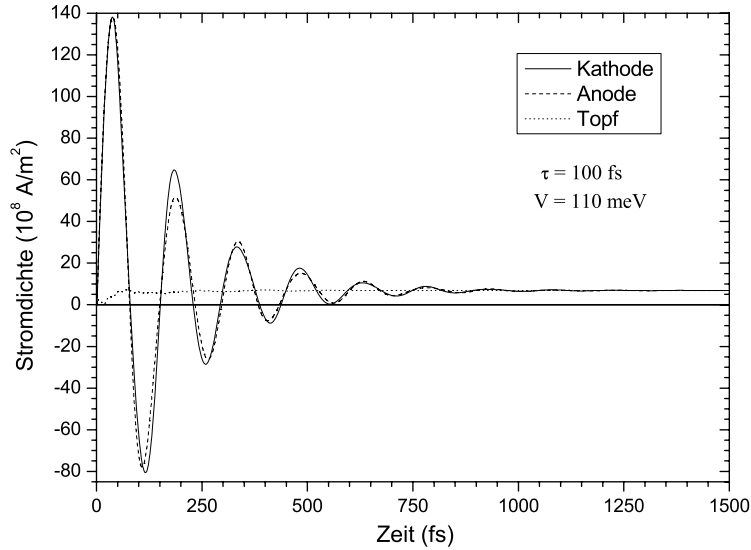


Abbildung 9.16: Einschwingverhalten des Stromes bei Anlegen einer Spannung $V=110$ eV

Die Strom-Spannungs-Charakteristik der Heterostruktur setzt sich aus der wiederholten Berechnung der einzelnen stationären Zustände bei verschiedenen Vorspannungen ($\Delta V=2,5$ meV) zusammen. Abbildung 9.18 zeigt eine starke Abhängigkeit von der Relaxationszeit. Für kleinere Relaxationszeiten treten häufigere Kollisionen mit dem Gitter auf, was die Kohärenz der resonanten Zustände zunehmend stört. Der Prozess des sequenziellen Tunnelns (vgl. Abschnitt 2.1) überwiegt den des resonanten Tunnelns.

Abschließend kann von einem sinnvollen Ansatz zur Lösung des Transportproblems mithilfe der Elektronen-Dichtematrix gesprochen werden. Anhand der Doppelbarrierenstruktur zeigt sich ein sinnvolles Verhalten des durch den vorgestellten Algorithmus modellierten Bauteils. Die Wahl geeigneter Randbedingungen im Dichtematrixmodell ist schwierig, wurde aber hinsichtlich der betrachteten Strukturen erfolgreich gelöst. Das komplizierte Verhältnis der Randbedingungen und des Relaxationsansatzes macht das Modell im Allgemeinen allerdings recht unflexibel. Mit Dichtematrizen allein ist deshalb eine effiziente Simulation von Transportprozessen im Halbleiter nur unzureichend möglich. In Zukunft ist zu klären, ob ein äquivalenter Ansatz über die Wigner-Funktion zu einem numerisch günstigeren Modell führen würde.

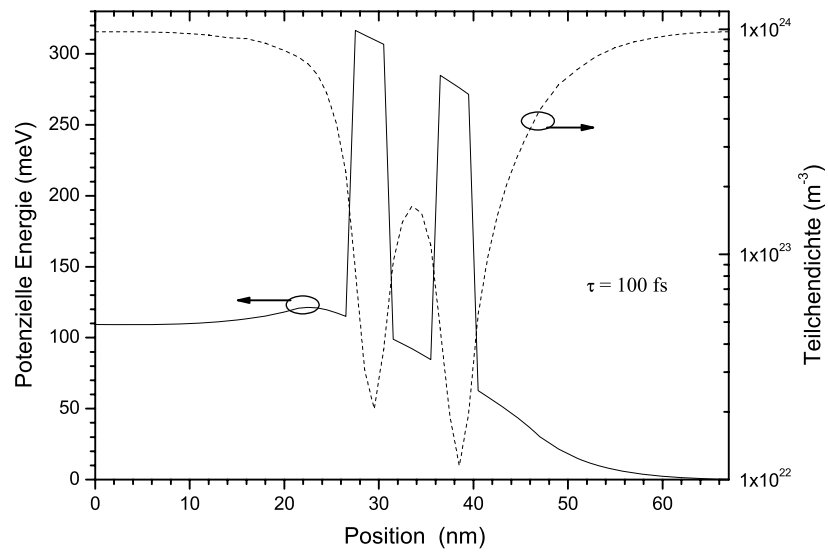


Abbildung 9.17: Stationäres, selbstkonsistentes Potenzial und Elektronendichte

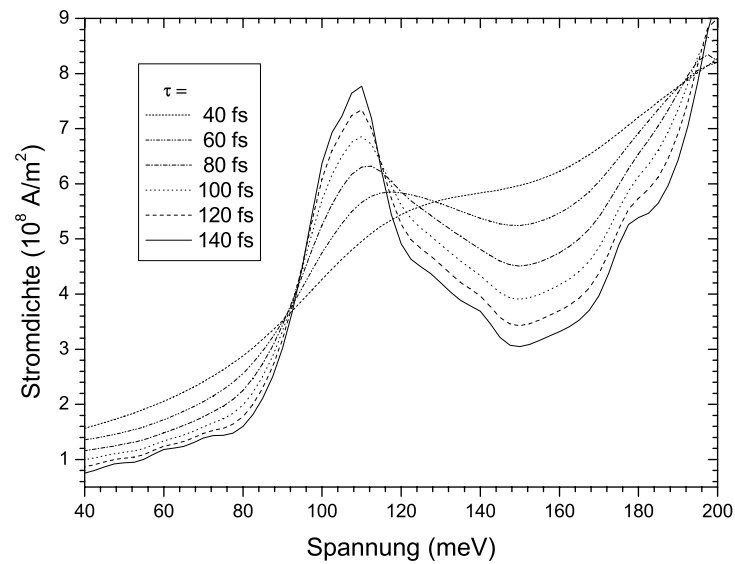


Abbildung 9.18: τ -Abhängigkeit der I-V-Kennlinie

10 Spinabhängiger Transport in MRAM-Speichern

Überblick: *Die Verwendung magnetoresistiver Speicher, der MRAMs, verspricht, zukünftige Speicherarchitekturen zu revolutionieren. Da der Hauptmechanismus ein spinabhängiger Tunnelstrom ist, liegt es nahe, die vorgestellten Transportmodelle um die Spinabhängigkeit zu erweitern und so die Grundlage für die Modellierung von MRAM-Zellen zu schaffen. Hier werden kurz die wichtigsten magnetoresistiven Effekte eingeführt, anschließend wird das erweiterte Transportmodell gezeigt.*

In der Speichertechnologie deutet sich derzeit eine Revolution an. Alle namhaften Unternehmen entwickeln die so genannten MRAMs (Magnetoresistance Random Access Memory), Speicher, deren Informationsgehalt in ihrem von der magnetischen Konstellation abhängigen Widerstand steckt.

Heute werden in Rechnern kurze Speicherzugriffszeiten benötigt. Deshalb setzen aktuelle Speicherkonzepte auf die Si-basierte DRAM-Technologie. Die Kondensatoren der einzelnen Speicherzellen entladen sich jedoch nach kurzer Zeit, so dass ein erneutes Aufladen (Refresh) ca. alle 40 ms unumgänglich ist. Zudem gehen beim Auslesen des Wertes oder beim Abschalten des Systems alle Daten verloren.

Diese Nachteile können mit den neuen MRAMs vermieden werden. Die Nutzung des Magnetwiderstandseffektes führt zu schnellen Zugriffszeiten und hoher Datenbeständigkeit. Dabei wird der Stromverbrauch denkbar gering gehalten. Damit ist diese Technologie vor allem für mobile Anwendungen interessant, bei denen keine ständige Stromzufuhr gewährleistet ist. Außerdem kann das Betriebssystem eines Computers im MRAM gespeichert werden, das Laden desselben entfällt entsprechend, der Rechner kann jederzeit abgeschaltet werden.

Im Prinzip besteht eine MRAM-Zelle aus zwei magnetischen Schichten, die durch eine dünne isolierende, nichtmagnetische Schicht voneinander getrennt sind (s. Abb. 10.1). Der Tunnelstrom, bzw. der Widerstand der Konstellation ist nun abhängig davon, ob die beiden Magnetschichten parallel oder antiparallel zueinander ausgerichtet sind. Bei paralleler Ausrichtung ist der Widerstand deutlich geringer, die Widerstandsänderung kann bis zu 50% betragen.

Typischerweise besitzt eine der Schichten eine feste Magnetisierungsrichtung, während die Magnetisierung der anderen durch ein äußeres Feld beeinflusst wird. Durch einen Stromimpuls kann diese Magnetisierungsrichtung umklappen, der Zelle damit ein anderer Wert gegeben werden. Mit einem kleinen Lesestrom dagegen lässt sich der Widerstand der Zelle bestimmen, ohne sie zu beeinflussen. Die Schaltzeiten solcher Zellen liegen im Nanosekunden-Bereich, sie sind also ebenso schnell wie die herkömmlichen DRAMs.

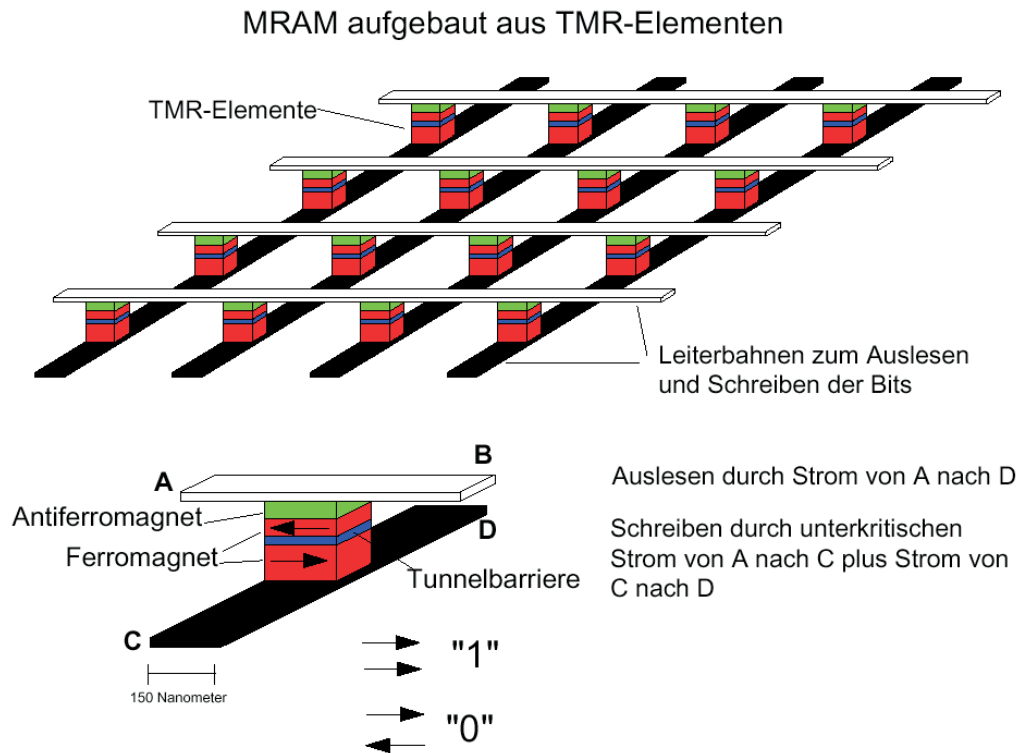


Abbildung 10.1: MRAM und TMR-Zelle

Die Modellierung solcher MRAM-Bausteine ist bisher noch nicht sehr fortgeschritten. Inwiefern das vorgestellte Transportmodell spinabhängig formuliert werden kann, um so den Transport durch die Tunnelschicht zu beschreiben, soll im Folgenden dargelegt werden.

Magnetoresistive Effekte

Zunächst werden einige wichtige Grundlagen der Magnetoelektronik vorgestellt.

Die magnetischen Eigenschaften resultieren aus dem Eigendrehimpuls und dem Spin einzelner Elektronen. Die Ausrichtung dieser Elementarmagneten kann parallel zum Magnetfeld liegen, dies kennzeichnet die Majoritätsladungsträger (die Benennung erfolgt in Anlehnung an die Halbleiterelektronik, es besteht Verwechslungsgefahr). Elektronen mit antiparalleler Ausrichtung werden Minoritätsladungsträger genannt. Majoritätsladungsträger werden entsprechend durch das Feld beschleunigt, während Minoritätsladungsträger abgebremst werden. Es ist also anschaulich, dass eine MRAM-Zelle bei paralleler Ausrichtung der beiden Schichten einen geringen Widerstand für die Majoritätsladungsträger aufweist, eine antiparallele Ausrichtung der Schichten jedoch die Majoritätsladungsträger der einen Schicht zu Minoritätsladungsträgern der anderen Schicht macht. Dies erhöht den Widerstand also beträchtlich, er ist so vom angelegten Magnetfeld abhängig [66].

Externe Magnetfelder können den Widerstand eines Festkörpers senken, dies ist ein negativer Magnetwiderstand, oder erhöhen, der positive Magnetwiderstand. Vorteilhaft ist dabei, dass mit geringen Feldern große Widerstandsänderungen hervorgerufen werden. Von Bedeutung sind hauptsächlich die folgenden negativen Magnetwiderstandseffekte:

- AMR - Anisotroper Magnetwiderstand
- GMR - Riesenmagnetwiderstand
- TMR - Tunnelmagnetwiderstand
- CMR - Kolossaler Magnetwiderstand,

bei deren Benennung offensichtlich allgemeine Ratlosigkeit geherrscht haben muss.

Der **AMR** weist im Allgemeinen eine hohe Magnetempfindlichkeit auf, er ist daher vor allem in der Sensortechnik von Bedeutung. Ursache sind spontane Anisotropien des spezifischen Widerstandes in Ferromagneten [66].

Der **GMR** spielt nur in Schichtsystemen eine Rolle. Dabei koppeln durch dünne nicht-magnetische Schichten voneinander getrennte Ferromagnete mit unterschiedlichen Koerzitivfeldstärken miteinander. Die Magnetisierungsrichtung einer Schicht wird dabei durch eine benachbarte antiferromagnetische Schicht vorgegeben, die andere (weichmagnetische) Schicht einem äußeren Magnetfeld ausgesetzt. Geht man für ein negatives Feld von paralleler Orientierung der beiden magnetischen Schichten aus und erhöht nun die Feldstärke für die eine Schicht zu positiven Werten, so klappt dessen Orientierung um, man erhält eine antiparallele Ausrichtung. Wird die Feldstärke noch weiter erhöht, überwiegt ihre Kopplung mit der anderen magnetischen Schicht deren Austauschkopplung mit der antiferromagnetischen Schicht. Auch diese zweite magnetische Schicht klappt um und es ist wieder eine parallele Orientierung erreicht (Abb. 10.2).

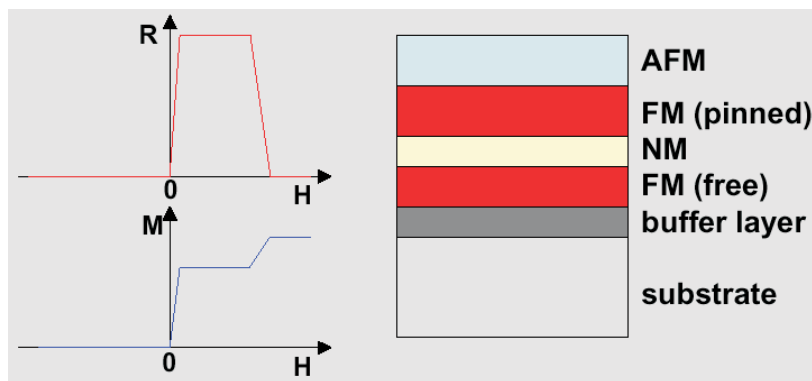


Abbildung 10.2: GMR-Effekt

Für die Funktionsweise von MRAMs wird jedoch in erster Linie der **TMR** genutzt. Die schon beim GMR verwandte nichtmagnetische Schicht ist nun so dünn, dass ein Tunnelstrom zwischen den magnetischen Schichten fließen kann, der von der relativen Orientierung der Magnetisierungsrichtungen abhängt. Bei diesem Tunnelprozess bleiben die Spinausrichtungen der Ladungsträger erhalten. Die Ausrichtungen der magnetischen Schichten bewirken dann für Majoritäts- und Minoritätsladungsträger jeweils unterschiedliche Tunnelwahrscheinlichkeiten. So finden sich bei paralleler Ausrichtung die Majoritätsladungsträger in der anderen Schicht erneut als Majoritätsladungsträger wieder. Gleiches gilt für die Minoritätsladungsträger. Ist die Ausrichtung der magnetischen Schichten jedoch antiparallel, dann sind die Majoritätsladungsträger der einen Schicht in der anderen plötzlich Minoritätsladungsträger.

Die Konstellation mit verschiedenen Koerzitivfeldstärken wird vom GMR übernommen. So ist auch die Funktionsweise zunächst die gleiche. Hier werden jedoch die unterschiedlichen Zustandsdichten der Majoritäts- und Minoritätsladungsträger wichtig (s. Abb. 10.3), die die Tunnelwahrscheinlichkeit bestimmen. Majoritätsladungsträger finden bei antiparalleler Orientierung der beiden Schichten deutlich weniger Zustände in der anderen Schicht vor, da sie dort ja zu Minoritätsladungsträgern geworden sind. Dies senkt die Tunnelwahrscheinlichkeit für die antiparallele Orientierung und erhöht deshalb den Widerstand. Die Widerstandsänderung ist dabei beträchtlich, für Übergangsmetalle bis zu 40%, bei Übergangsmetalloxiden ergeben sich sogar 100%.

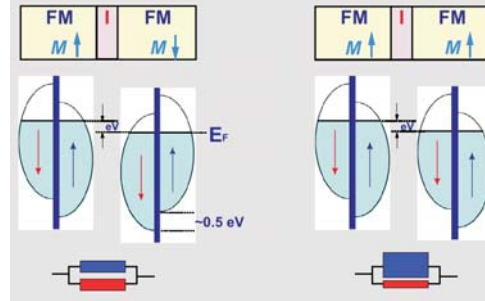


Abbildung 10.3: TMR-Effekt

Der **CMR** ist der stärkste der hier betrachteten Effekte. Dabei wird die Widerstandsänderung von der paramagnetisch-halbleitenden in die ferromagnetisch-metallische Phase von dotierten Manganaten ausgenutzt.

Für den für MRAMs wichtigen Tunnelmagnetwiderstand bietet sich die Anwendung der in dieser Arbeit vorgestellten Transportmodelle an, da für den Tunnelvorgang die gleichen Bedingungen gelten. Statt zweier Ladungsträgersorten unterschiedlicher Ladung liegen hier zwei unterschiedliche Spinausrichtungen vor.

Der Übergang von Ladungsträgern unterschiedlicher Magnetisierung, ein $\uparrow\downarrow$ -Übergang, verhält sich formal ähnlich wie ein pn-Übergang. Prinzipiell ist zum Beispiel ein Spin-Transistor denkbar, dessen Verstärkung durch das angelegte Magnetfeld beeinflusst wird. So lässt sich analog zu Bipolarschaltungen eine für Speichermedien interessante Logik entwickeln.

Spinabhängiger Transport

Nun stellt sich die Frage, wie die Transportgleichungen modifiziert werden müssen, um spinabhängige Effekte beschreiben zu können. Zunächst beschreibt unmagnetische Materialien, die einem äußeren Magnetfeld ausgesetzt sind, der Hall-Effekt. Anschließend wird die Boltzmann-Gleichung um Spindiffusion erweitert.

Doch zunächst muss das **Magnetfeld als äußere Kraft** in die wohl bekannte Boltzmann-Gleichung (5.45) integriert werden. Die äußere Kraft besteht nun sowohl aus dem E -Feld als auch aus der Lorentz-Kraft

$$\vec{F} = e(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}). \quad (10.1)$$

Mithilfe der Boltzmann-Gleichung ist es nun möglich, ein resultierendes elektrisches Feld herzuleiten, welches den Einfluss des Magnetfeldes berücksichtigt. Mit dem spezifischen Widerstand ρ_0 ergeben sich zwei Feldkomponenten.

$$E_{||} = \rho_0 J \quad (10.2)$$

beschreibt den Strom durch das Bauelement. Das äußere Magnetfeld wirkt sich also nicht auf den hier interessierenden Widerstand aus.

$$E_H = \frac{e\tau}{m} \rho_0 B J \quad (10.3)$$

ist das transversale Hall-Feld. Es entsteht zur Kompensation der Lorentz-Kraft.

Für den Ladungsträgertransport in MRAM-Strukturen ist entscheidender, dass der spinabhängige Transport in **magnetischen Materialien** beschrieben wird. Dazu wird die Spinorform der Liouville-Gleichung [67, 68] herangezogen:

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{e}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \hat{f} (\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}) + \frac{\hbar \vec{k}}{m} \nabla_{\vec{r}} \hat{f} - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_s, \hat{f}] = - \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right)_{coll}. \quad (10.4)$$

$\hat{H}_s = \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ ist der spinabhängige Hamiltonoperator mit dem Bohrschen Magneton μ_B und dem Vektor der Pauli-Spinmatrizen $\vec{\sigma}$. \hat{f} repräsentiert die spinabhängige Verteilungsfunktion und teilt sich in zwei Komponenten auf:

$$\hat{f} = f \hat{I} + \vec{\sigma} \vec{f}_s. \quad (10.5)$$

f ist die herkömmliche spinunabhängige Verteilungsfunktion, \hat{I} die Einheitsmatrix und \vec{f}_s der spinabhängige Anteil der Verteilungsfunktion, so dass für den Kommutator in Gleichung (10.4) nur noch ein Anteil, der \vec{f}_s enthält, bleibt. Unter Vernachlässigung des äußeren Magnetfeldes $\nabla_{\vec{k}} \hat{f} (\vec{u} \times \vec{B})$, welches den Hall-Effekt hervorruft, soll hier nur der spinabhängige Teil interessieren.

Der Kollisionsoperator kann zu [68]

$$\left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{\hat{f} - \bar{f}}{\tau} + \frac{2}{\tau_s} \left(\bar{f} - \frac{\hat{I}}{2} \text{Sp}\{\bar{f}\} \right) \quad (10.6)$$

angegeben werden. Darin ist $\bar{f} = 1/(4\pi) \int \hat{f} d\Omega_k$ die Relaxationsgröße.

Wie aus Abschnitt 6.2 bekannt, wird nun die Momentenmethode angewandt, die Gleichungen werden aber gleich in einen spinunabhängigen und einen spinabhängigen Anteil aufgeteilt. Die Erhaltungsgleichungen für den spinunabhängigen Teil stimmen mit den Gleichungen des hydrodynamischen Modells überein. Für den spinabhängigen Teil ergeben sich nun neue Erhaltungsgleichungen für die Spindichte \vec{m} und die Spinstromdichte \vec{j}_m [68]:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} + \nabla \vec{j}_m - 2 \frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{B} \times \vec{m}) = - \frac{\vec{m}}{\tau_s} \quad (10.7)$$

$$\frac{\partial \vec{j}_m}{\partial t} + \vec{u}^2 \nabla \vec{m} + \frac{eE}{m} \vec{m} - 2 \frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{B} \times \vec{j}_m) = - \frac{\vec{j}_m}{\tau}. \quad (10.8)$$

Dabei wurde die "mean field approximation" $\langle u^2 \nabla \hat{f} \rangle \approx u^2 \langle \nabla \hat{f} \rangle$ angewendet, um so die Gleichungshierarchie zu beenden.

In Verbindung mit dem QHD-Modell, welches den Tunnelstrom durch die nichtmagnetische Schicht einer MRAM-Zelle beschreiben kann, steht so ein spinabhängiger Formalismus zur Verfügung.

Die Anwendung dieser Transportgleichungen auf MRAM-Strukturen sollte Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein.

11 Ausblick

Mit dem quantenhydrodynamischen Modell steht ein Instrument zur Verfügung, welches in der Halbleitersimulation zu neuen Möglichkeiten führt, da auf effiziente Weise Strukturen untersucht werden können, die Schichtdicken im Bereich der Elektronenwellenlänge enthalten. Damit eröffnet sich ein Weg, Doppelbarrierenstrukturen zu simulieren, die essenziell für Resonante Tunneldioden sind. RTDs wiederum gewinnen in zunehmendem Maße an Bedeutung für den Einsatz in logischen Schaltungen. Ihre ungewöhnlichen Eigenschaften reduzieren den Bedarf an Bauelementen, so dass eine höhere Packungsdichte auf Halbleiterchips entstehen kann. Darüber hinaus führt die Miniaturisierung von Komponenten in die Welt der Quantenmechanik - die die ursprüngliche Funktionsweise nicht mehr gewährleistet. Mit der RTD ist aber ein auf den Prinzipien der Quantenmechanik fußendes Bauelement vorhanden, das genau in diesem Bereich beheimatet ist.

Nun stehen resonante Strukturen aber nicht für sich alleine, sie werden ihre Rolle in Verbindung mit Transistoren und anderen Dioden spielen, welche allerdings aus der klassischen Physik stammen. Was läge also näher, als zur Simulation solcher Strukturen Mittel zu wählen, die einen fließenden Übergang zwischen klassischen und quantenmechanischen Strukturen ermöglichen? Genau dies zu leisten, ist das quantenhydrodynamische Modell in der Lage. Es erweitert eine klassische Transporttheorie, das hydrodynamische Modell, zu einer quantenmechanischen Theorie. Korrekturterme sorgen dabei für die Erfassung der Quanteneffekte. Sie können in der Implementierung je nach Charakter der zu berechnenden Schicht hinzugeschaltet werden. So lässt sich auf triviale Art und Weise eine Struktur berechnen, in der eine Doppelbarriere z.B. in einen Hetero-Bipolartransistor integriert ist. Dabei werden für die Doppelbarriere Quantenkorrekturen berücksichtigt, während die klassische Struktur mit dem einfachen hydrodynamischen Modell erfasst wird. Im Gegensatz zu anderen Simulationsverfahren ist damit ein flexibles Vorgehen möglich, das grundlegend für die Erfassung zukünftiger Konzepte ist.

Diese Arbeit hat die Theorie und Implementierung des quantenhydrodynamischen Modells, des zugehörigen gemittelten Quantenpotenzials und des Dichtematrixmodells für den Intrabandtransport vollständig dargelegt. Dabei hat sich die Berechnung des quantenhydrodynamischen Modells als numerisch sehr instabil herausgestellt. Dies wird auf den großen Einfluss des Temperaturgradienten in der Energiegleichung zurückgeführt. Da hier ein iteratives Modell für die sukzessive Lösung der einzelnen Gleichungen verwendet wurde, bietet sich zukünftig eine Untersuchung an, die das Modell als geschlossenen Satz nichtlinearer Differenzialgleichungen löst. Weiterhin muss ein Vergleich mit einem auf Green-Funktionen basierenden Algorithmus zeigen, wie gut Streuprozesse modelliert werden können.

Schließlich wurde die Möglichkeit erörtert, mithilfe des QHD-Modells den spinabhängigen Transport in MRAM-Zellen zu simulieren. Deshalb wurde das Transportmodell modifiziert und die Grundlage geschaffen, zu einem besseren Verständnis des TMR-Effektes zu gelangen. Dies kann als Ansatz für zukünftige Untersuchungen dienen.

A Mathematische Hilfen

A.1 Relativkoordinaten

Definition und Ableitungen der Schwerpunkts- und Relativkoordinaten:

$$\begin{aligned}\vec{r} &= (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2 && \text{Schwerpunktskoordinate} \\ \vec{r}' &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 && \text{Relativkoordinate}\end{aligned}\tag{A.1}$$

Die Differenziation nach zwei Variablen erfolgt nach folgender Gesetzmäßigkeit:

Eine Funktion

$$w = f(x, y)$$

hängt indirekt von den Variablen u und v ab. Die Berechnungsvorschrift ist

$$x = \varphi(u, v) \quad \text{und} \quad y = \psi(u, v).$$

Dann ergeben sich die Ableitungen zu

$$\frac{\partial w}{\partial u} = \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial u} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial u} \quad \text{und} \quad \frac{\partial w}{\partial v} = \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial v} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial v}.$$

1. Ableitungen:

$$\begin{aligned}\nabla_{\vec{r}} &= \nabla_1 + \nabla_2 & \nabla_1 &= \frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}} + \nabla_{\vec{r}'} \\ \nabla_{\vec{r}'} &= \frac{1}{2}(\nabla_1 - \nabla_2) & \nabla_2 &= \frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}} - \nabla_{\vec{r}'}\end{aligned}\tag{A.2}$$

2. Ableitungen:

$$\begin{aligned}\nabla_{\vec{r}}^2 &= \nabla_1^2 + 2\nabla_1\nabla_2 + \nabla_2^2 & \nabla_1^2 &= \frac{1}{4}\nabla_{\vec{r}}^2 + \nabla_{\vec{r}}\nabla_{\vec{r}'} + \nabla_{\vec{r}'}^2 \\ \nabla_{\vec{r}'}^2 &= \frac{1}{4}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_1\nabla_2 + \frac{1}{4}\nabla_2^2 & \nabla_2^2 &= \frac{1}{4}\nabla_{\vec{r}}^2 - \nabla_{\vec{r}}\nabla_{\vec{r}'} + \nabla_{\vec{r}'}^2 \\ \nabla_{\vec{r}}\nabla_{\vec{r}'} &= \frac{1}{2}(\nabla_1^2 - \nabla_2^2) & \nabla_1\nabla_2 &= \frac{1}{4}\nabla_{\vec{r}}^2 - \nabla_{\vec{r}'}^2\end{aligned}\tag{A.3}$$

A.2 Einsteinsche Summenkonvention

Eine lineare Transformation im dreidimensionalen Raum wird durch eine Matrix $[A]$ bestimmt

$$\vec{y} = [A]\vec{x}.\tag{A.4}$$

Diese Vorschrift beinhaltet die Summe

$$y_i = \sum_{j=1}^3 a_{ij} x_j, \quad (\text{A.5})$$

welche nach der Einsteinschen Summenkonvention

$$y_i = a_{ij} x_j \quad (\text{A.6})$$

abgekürzt werden kann. Über den doppelt auftretenden Index j wird summiert, die Gleichung gilt vektoriell für alle einfach auftretenden Indizes i [56].

A.3 Kugelkoordinaten

Koordinaten k, φ, θ mit:

$$k \geq 0; \quad 0 \leq \varphi < 2\pi; \quad 0 \leq \theta \leq \pi.$$

Definition:

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k \cos \varphi \sin \theta \\ k \sin \varphi \sin \theta \\ k \cos \theta \end{pmatrix}$$

Volumenelement:

$$d^3k = k^2 \sin \theta \, dk \, d\varphi \, d\theta$$

A.4 Fermi-Integrale

Fermi-Integral der Ordnung j :

$$F_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{y^j}{e^{y-x} + 1} dy \quad (\text{A.7})$$

mit der Gamma-Funktion

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad \text{und} \quad \Gamma(j+1) = j\Gamma(j).$$

In den Berechnungen explizit verwendete Fermi-Integrale:

$$F_{1/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{y^{1/2}}{e^{y-x} + 1} dy \quad (\text{A.8})$$

$$F_{3/2}(x) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{y^{3/2}}{e^{y-x} + 1} dy \quad (\text{A.9})$$

$$F_{5/2}(x) = \frac{16}{15\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{y^{5/2}}{e^{y-x} + 1} dy \quad (\text{A.10})$$

B Zeitabhängige Probleme

Die Lösung von zeitabhängigen, also physikalischen Problemen der Art

$$\frac{\partial y}{\partial t} = F(y) , \quad (\text{B.1})$$

mit einer zeitabhängigen Funktion y und einem ebenfalls zeitabhängigen Funktional F , bedarf der näheren Betrachtung. Nach dem bekannten Finite Differenzen-Verfahren ließe sich die Zeitskala der Einfachheit halber konstant diskretisieren, so dass die Differenzial-Gleichung (B.1) mit zentralen Differenzen zu

$$\frac{y^{t+1} - y^{t-1}}{\Delta t} = F^t(y^t) \quad (\text{B.2})$$

wird. Bei Kenntnis von y zu den Zeitpunkten t und $t - \Delta t$ lässt sich dann die Lösung zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ durch die Auswertung von

$$y^{t+1} = \Delta t F^t(y^t) + y^{t-1} \quad (\text{B.3})$$

einfach ermitteln. Dies ist ein sogenanntes *Propagationsverfahren*.

Wird (B.1) dagegen mit Vorwärtsdifferenzen diskretisiert, so ergeben sich die einfach auszuwertenden Ausdrücke

$$\frac{y^{t+1} - y^t}{\Delta t} = F^t(y^t) , \quad (\text{B.4})$$

die bei Kenntnis von y^t einen sogenannten *expliziten* Algorithmus darstellen. Dieser wird bei vielen physikalischen Problemstellungen erst unterhalb sehr kleiner Diskretisierungsweiten Δt konvergent.

Wird dagegen mit Rückwärtsdifferenzen diskretisiert, so ergibt sich eine in y^{t+1} implizite Gleichung:

$$\frac{y^{t+1} - y^t}{\Delta t} = F^t(y^{t+1}) . \quad (\text{B.5})$$

Ist diese lösbar, stellt der so genannte *implizite* Algorithmus eine wesentlich stabilere Methode dar als der explizite.

Mischformen expliziter und impliziter Algorithmen sind möglich und lassen sich durch

$$\frac{y^{t+1} - y^t}{\Delta t} = s \cdot F^{t+1}(y^{t+1}) + (1 - s) \cdot F^t(y^t) \text{ mit } 0 \leq s \leq 1 \quad (\text{B.6})$$

formulieren, wobei für $s = 0$ ein expliziter Algorithmus und für $s = 1$ ein Rückwärtsdifferenzenschema vorliegt. Eine verbreitete Mischform ist das *Crank-Nicolson-Verfahren* mit $s = 0,5$.

C Übersicht Quantenkorrekturen

Q bezeichnet jeweils den Anteil des quantenmechanischen Korrekturterms.

Entwicklung der Wigner-Funktion

Drucktensor und Energiedichte:

$$P_{ij}^Q = -\frac{\hbar^2 n}{12mk_B T} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} V \quad (C.1)$$

$$W^Q = \frac{\hbar^2 n}{24mk_B T} \nabla^2 V \quad (C.2)$$

Bohm-Potenzial (Potenzialenergie) und Korrektur des klassischen Potenzials:

$$Q_B = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \Rightarrow V^Q = \frac{Q_B}{3} \quad (C.3)$$

Wigner-Potenzial und Korrektur der Energiedichte:

$$Q_W = -\frac{\hbar^2}{8m} \nabla^2 \ln(n) \Rightarrow W^Q = n \frac{Q_W}{3} \quad (C.4)$$

Gemittelte Quantenpotenziale:

Drucktensor und Energiedichte:

$$P_{ij}^Q = -\frac{\hbar^2 n}{4mk_B T} \frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x_i \partial x_j} = -n V_{\text{sm}ij} \Rightarrow V^Q = V_{\text{sm}} + \int \frac{\nabla n}{n} V_{\text{sm}ij} dx \quad (C.5)$$

$$W^Q = \frac{\hbar^2 n}{8mk_B T} \nabla^2 \bar{V} = \frac{1}{2} n V_{\text{sm}} \quad (C.6)$$

D Formelzeichen und Abkürzungen

Zeichen	Einheit	Erläuterung
AMR	–	Anisotroper Magnetwiderstand
\vec{A}	Vs m^{-1}	magnetisches Vektorpotenzial
\vec{B}	Vs m^{-2}	magnetische Flussdichte
B_{Sp}	m^3s^{-1}	optische Absorptionsrate
CMR	–	Kolossaler Magnetwiderstand
C	m^{-3}	Elektronendichtematrix
C^0	m^{-3}	Elektronendichtematrix im Gleichgewicht
\tilde{C}	m^{-3}	Elektronendichtematrix im Relativraum
C_{Aug}	m^6s^{-1}	Auger-Koeffizient
c	ms^{-1}	Lichtgeschwindigkeit ($= 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$)
\vec{D}	As m^{-2}	elektrische Flussdichte
D	m^{-3}	Löcherdichtematrix
D^0	m^{-3}	Löcherdichtematrix im Gleichgewicht
D_e	m^2s^{-1}	Diffusionskonstante der Elektronen
D_h	m^2s^{-1}	Diffusionskonstante der Löcher
DDM	–	Drift-Diffusions-Modell
E	J	Energie
E_c	J	Energie der Elektronen im Leitungsband
$E_{e,0}$	J	Bandkantenenergie des Leitungsbandes
$E_{h,0}$	J	Bandkantenenergie des Valenzbandes
E_{Fe}	J	Quasi-Ferminiveau der Elektronen
E_{Fh}	J	Quasi-Ferminiveau der Löcher
E_{Fi}	J	intrinsisches Ferminiveau
E^{Aug}	J	Aktivierungsenergie des direkten Auger-Mechanismus
E^{CCCH}	J	Aktivierungsenergie des direkten Auger-Mechanismus mit Energieabgabe an ein anderes Elektron
E^{CHHS}	J	Aktivierungsenergie des direkten Auger-Mechanismus mit Energieabgabe an ein anderes Loch
\vec{E}	Vm^{-1}	elektrisches Feld
e	As	Elementarladung ($= 1,6021892 \cdot 10^{-19} \text{ As}$)
\vec{F}	–	Vektorfeld (allgemein)
F_j	–	Fermi-Integral der Ordnung j
f	m^{-3}	klassische Verteilungsdichtefunktion
\hat{f}	m^{-3}	spinabhängige Verteilungsdichtefunktion
\bar{f}	m^{-3}	Relaxationsgröße für die spinabhängige Verteilungsdichtefunktion
\vec{f}_s	m^{-3}	spinabhängiger Anteil der Verteilungsdichtefunktion

Zeichen	Einheit	Erläuterung
f_W	m^{-3}	Wignerfunktion
f_e	–	Fermifunktion für Elektronen
f_h	–	Fermifunktion für Löcher
GMR	–	Riesenmagnetwiderstand
\vec{H}	Am^{-1}	magnetisches Feld
\hat{H}	J	Hamiltonoperator
\hat{H}_s	J	spinabhängiger Hamiltonoperator
\hat{H}_{cv}	J	Hamiltonoperator für Exzitonen
\hat{H}_{cc}	J	Hamiltonoperator für Elektronen
\hat{H}_{vv}	J	Hamiltonoperator für Löcher
HDM	–	hydrodynamisches Modell
HEMT	–	High Electron Mobility Transistor
HFET	–	Heterostruktur-Feldeffekttransistor
h	Js	Plancksches Wirkungsquantum ($= 6,626176 \cdot 10^{-34}$ Js)
\hbar	Js	$= h/(2\pi) = 1,0545887 \cdot 10^{-34}$ Js
\vec{I}_P	A	Maximal-Strom
\vec{I}_V	A	Tal-Strom
i	–	Imaginäre Einheit, $i = \sqrt{-1}$
\vec{J}	Am^{-2}	elektrische Gesamtstromdichte
\vec{J}_e	Am^{-2}	Elektronenstromdichte
\vec{J}_h	Am^{-2}	Löcherstromdichte
\vec{j}	$\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$	Teilchenstromdichte
\vec{j}_m	$\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$	Spinstromdichte
\vec{k}	m^{-1}	Wellenvektor
k	m^{-1}	Wellenzahl
$k_{x,y,z}$	m^{-1}	Wellenzahl der entsprechenden Ausbreitungsrichtung
k_B	JK^{-1}	Boltzmannkonstante ($= 1,380658 \cdot 10^{-23}$ JK^{-1})
L	m	Länge einer Elementarzelle
M_{12}	Asm	Matrixelement des optischen Übergangs
MBE	–	Molecular Beam Epitaxy
MOBILE	–	Momostable Bistable Transition Logic Element
MOCVD	–	Metal-Organic Chemical Vapor Deposition
MOVPE	–	Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy
MQW	–	Multiple Quantum Well
MRAM	–	Magnetoresistance Random Access Memory
m	kg	effektive Masse
m_0	kg	Ruhemasse des Elektrons ($= 9,109534 \cdot 10^{-31}$ kg)
m_e^*	kg	effektive Masse der Elektronen
m_h^*	kg	effektive Masse der Löcher
\vec{m}	m^{-3}	Spindichte
NDR	–	negative differential resistance
NDW	–	negativer differentieller Widerstand
N_A	m^{-3}	Konzentration der ionisierten Akzeptoren
N_D	m^{-3}	Konzentration der ionisierten Donatoren
N_e	m^{-3}	eff. Zustandsdichte der Elektronen für parabolische Bänder

Zeichen	Einheit	Erläuterung
N_h	m^{-3}	eff. Zustandsdichte der Löcher für parabolische Bänder
n	m^{-3}	Elektronenkonzentration
n_0	m^{-3}	Elektronenkonzentration im Gleichgewicht
P_{ij}	Nm^{-2}	kinetischer Drucktensor
PML	–	Perfectly Matched Layer
PVR	–	Maximal- zu Tal-Strom-Verhältnis (peak-to-valley current ratio)
p	m^{-3}	Löcherkonzentration
p_0	m^{-3}	Löcherkonzentration im Gleichgewicht
\vec{p}	kg ms^{-1}	Impuls
\vec{p}'	kg ms^{-1}	mikroskopischer Impuls eines bewegten Ensembles
\mathcal{P}	Jm	Impuls-Matrixelement
Q_B	J	Bohm-Potenzial(energie)
$Q_{e,h}$	V	Bohm-Potenzial für verspannte Quantenstrukturen (als Potenzial)
Q_W	J	Wigner-Potenzial(energie)
QHD	–	quantenhydrodynamisches Modell
QTBM	–	quantum transmitting boundary method
QW	–	Quantum Well
q	As	Ladung (allgemein)
\vec{q}	$\text{Jm}^{-2}\text{s}^{-1}$	Wärmeflussvektor
\vec{r}	m	(Schwerpunkts-) Ortsvektor (3D)
\vec{r}_e	m	Ortsvektor für Löcher (3D)
\vec{r}_h	m	Ortsvektor für Elektronen (3D)
\vec{r}'	m	Ortsvektor (3D) im Relativraum
R	$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$	Rekombinations-Generationsrate
R^{Aug}	$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$	Rekombinations-Generationsrate nach dem Auger-Mechanismus
R^{CCCH}	$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$	Rekombinations-Generationsrate des direkten Auger-Mechanismus mit Energieabgabe an ein anderes Elektron
R^{CHHS}	$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$	Rekombinations-Generationsrate des direkten Auger-Mechanismus mit Energieabgabe an ein anderes Loch
R^{Sp}	$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$	Rekombinations-Generationsrate durch spontane Rekombination
R^{SRH}	$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$	Rekombinations-Generationsrate nach dem Shockley-Read-Hall-Mechanismus
REM	–	Raster-Elektronen-Mikroskop
RTBT	–	Resonant Tunneling Bipolar Transistor
RTD	–	Resonant Tunneling Diode
RTT	–	Resonant Tunneling Transistor
r	–	bezogenen Temperatur
SCFL	–	Source-Coupled FET-Logic
T	K	Temperatur
T_0	K	Gleichgewichtstemperatur
TDM	–	Time-Devided Multiplex
TMR	–	Tunnelmagnetwiderstand

Zeichen	Einheit	Erläuterung
t	s	Zeit
U	V	Spannung
U_T	V	Temperaturspannung
UTC-PD	–	Uni-Travelling Carrier Photodiode
\vec{u}	ms^{-1}	Driftgeschwindigkeit eines Ensembles
u	–	exponentielle Schreibweise des Quasi-Fermi-Potenzials der Elektronen
v	–	exponentielle Schreibweise des Quasi-Fermi-Potenzials der Löcher
V	J	Potenzialenergie
V_e	J	Potenzialenergie der Elektronen
V_h	J	Potenzialenergie der Löcher
\bar{V}	J	geglättete(s) Quantenpotenzial(energie)
V_{eff}	J	effektives geglättetes Quantenpotenzial
V_{sm}	J	Quantenkorrektur des effektiven Potenzials
\vec{v}_e	ms^{-1}	Driftgeschwindigkeit der Elektronen
\vec{v}_h	ms^{-1}	Driftgeschwindigkeit der Löcher
W	Jm^{-3}	Energiedichte
$X_{C,D,Y}$	Jm^{-3}	Austauschterme für Elektronen, Löcher und Exzitonen
Y	m^{-3}	Exzitonendichtematrix
z, z_e, z_h	m	Ortskoordinate in Schichtungsrichtung, allgemein, für Elektronen, für Löcher
z, z'	m	Schwerpunkts- und Relativkoordinate in Schichtungsrichtung
β	J^{-1}	$(k_B T)^{-1}$
Δz	m	Diskretisierungsweite in z -Richtung
δ	–	Dirac-Delta-Distribution
δ_{ij}	–	Kronecker-Symbol
δ_{B12}	m^{-3}	bandlimitierte Delta-Funktion
γ	–	Korrekturfaktor, verbindet Boltzmann- und Fermi-Verteilung
Γ	s^{-1}	inverse Relaxationszeit-Konstante
ε_r	–	relative Dielektrizitätszahl
ε_0	$\text{AsV}^{-1}\text{m}^{-1}$	elektrische Feldkonstante ($= 8,854187818 \cdot 10^{-12} \text{AsV}^{-1}\text{m}^{-1}$)
ε	$\text{AsV}^{-1}\text{m}^{-1}$	Dielektrizität ($= \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r$)
η_e	–	Argument des Fermi-Integrals für Elektronen
η_h	–	Argument des Fermi-Integrals für Löcher
κ	$\text{WK}^{-1}\text{m}^{-1}$	Wärmeleitfähigkeit
λ_D	m	Debye-Wellenlänge
λ_T	m	thermische Kohärenzlänge
μ	$\text{VsA}^{-1}\text{m}^{-1}$	Permeabilität
μ_r	–	relative Permeabilitätszahl
μ_0	$\text{VsA}^{-1}\text{m}^{-1}$	magnetische Feldkonstante ($= 4\pi \cdot 10^{-7} \text{VsA}^{-1}\text{m}^{-1}$)
μ_e	$\text{m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	Beweglichkeiten der Elektronen
μ_h	$\text{m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	Beweglichkeiten der Löcher
μ_B	Am^2	Bohrsches Magneton ($= e\hbar/(2m_e) \approx 9,2740 \cdot 10^{-24} \text{Am}^2$)
∇, ∇_r	m^{-1}	Nabla-Operator im Ortsraum
∇_k	m	Nabla-Operator im Impulsraum

Zeichen	Einheit	Erläuterung
ξ	m^{-1}	relative Wellenzahl der Partikularbewegung
$\vec{\Pi}$	kgm^{-2}s	Impulsdichte
Φ_e	V	Quasi-Fermi-Potenzial der Elektronen
Φ_h	V	Quasi-Fermi-Potenzial der Löcher
Ψ	V	elektrostatisches Potenzial
Ψ_D	V	Diffusions-Potenzial
Ψ_{ext}	V	externes Potenzial an den Kontakten
ψ	$\text{m}^{-3/2}$	Wellenfunktion
ψ_k	$\text{m}^{-3/2}$	Wellenfunktion des Zustandes k
$\hat{\rho}$	m^{-3}	Dichteoperator
$\tilde{\rho}$	m^{-3}	Dichteoperator im Relativraum
ρ_0	$\Omega\text{mm}^2\text{m}^{-1}$	spezifischer Widerstand
ϱ	As m^{-3}	elektrische Raumladungsdichte
$\vec{\sigma}$	–	Pauli-Spinmatrizen
σ	Sm^{-1}	elektr. Leitfähigkeit
τ	s	Relaxationszeit
τ_e	s	Relaxationszeit der Elektronen (Ladungsträgerlebensdauer)
τ_h	s	Relaxationszeit der Löcher (Ladungsträgerlebensdauer)
τ_p	s	Relaxationszeit des Impulses
τ_s	s	Spin-Relaxationszeit
Ω	s^{-1}	Hamilton-Frequenz ($\hat{H} = \hbar\Omega$)
ω	s^{-1}	Kreis-Frequenz

Materialparameter

Werte nach [69].

Größe/Formelzeichen	Einheit	GaAs
Effektive Masse m_e^*	m_0	0,063
m_h^*	m_0	0,50
Gitterkonstante a	nm	0,565
Effektive Zustandsdichte N_e	cm^{-3}	$4,7 \cdot 10^{17}$
N_h	cm^{-3}	$9,0 \cdot 10^{18}$
Beweglichkeit μ_e	cm^2/Vs	9200
μ_h	cm^2/Vs	400

Literaturverzeichnis

- [1] E. M. Azoff, „Generalized Energy-Momentum Conservation Equations in the Relaxation Time Approximation,“ *Solid-State Electr.*, Bd. 30, Nr. 9, S. 913–917, 1987.
- [2] K. Fröjdth, P. Holmström und U. Olin, „Simulation of Optoelectronic Semiconductor Structures, Technical Report TR310,“ Institute of Optical Research, Stockholm, Sweden, 1996.
- [3] G. Klimeck, R. Lake, R. C. Bowen, W. R. Frensley und D. Blanks, „NanoElectronic MOdeling (NEMO),“ in *53rd Annual Device Research Conference Digest*, New York, 1995, S. 52–53, IEEE Press.
- [4] F. Capasso (Ed.), *Physics of Quantum Electron Devices*, Bd. 28 von *Springer Series in Electronics and Photonics*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1990.
- [5] S. Luryi, „Frequency Limit of Double-Barrier Resonant-Tunneling Oscillators,“ *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 47, Nr. 5, S. 490–492, 1985.
- [6] R. Tsu und L. Esaki, „Tunneling in a Finite Superlattice,“ *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 22, Nr. 11, S. 562–564, 1973.
- [7] L. L. Chang, L. Esaki und R. Tsu, „Resonant Tunneling in Semiconductor Double Barriers,“ *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 24, Nr. 12, S. 593–595, 1974.
- [8] S. Sen, F. Capasso, A. C. Gossard, R. A. Spah, A. L. Hutchinson und S. N. G. Chu, „Observation of Resonant Tunnelling through a Compositionally Graded Parabolic Quantum Well,“ *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 51, S. 1428–1430, 1987.
- [9] P. Glösekötter, C. Pacha, K. F. Goser, G. I. Wirth, W. Prost, U. Auer, M. Agethen, P. Velling und F. J. Tegude, „Digital Circuit Design Based on the Resonant-Tunneling-Hetero-Junction-Bipolar-Transistor,“ in *Proceedings 13th Symposium on Integrated Circuits and Systems Design*, Los Alamitos, CA, USA, 2000, IEEE Comput. Soc., S. 150–155.
- [10] C. Pacha, O. Kessler, P. Glösekötter, K. F. Goser, W. Prost, A. Brennemann, U. Auer und F. J. Tegude, „Parallel Adder Design with Reduced Circuit Complexity Using Resonant Tunneling Transistors and Threshold Logic,“ *Analog Integrated Circuits and Signal Processing*, Bd. 24, Nr. 1, S. 7–25, 2000.
- [11] C. Pacha, U. Auer, C. Burwick, P. Glösekötter, A. Brennemann, W. Prost, F. J. Tegude und K. F. Goser, „Threshold Logic Circuit Design of Parallel Adders Using

- Resonant Tunneling Devices," *IEEE Trans. on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems*, Bd. 8, Nr. 5, S. 558–572, 2000.
- [12] R. Brent und H. T. Kung, „A Regular Layout for Parallel Adders," *IEEE Trans. Comput.*, Bd. 31, S. 260–264, 1982.
- [13] K. Sano, K. Murata, T. Otsuji, T. Akeyoshi, N. Shimizu und E. Sano, „An 80-Gbit/s Optoelectronic Delayed Flip-Flop IC Using Resonant Tunneling Diodes and Uni-Traveling-Carrier Photodiode," *IEEE J. Solid State Circuits*, Bd. 36, Nr. 2, S. 281–289, 2001.
- [14] K. Sano, K. Murata und H. Matsuzaki, „SCFL-Compatible 40-Gbit/s RTD/HEMT Selector Circuit," *IEICE Trans. Electron.*, Bd. E83-C, Nr. 10, S. 1690–1692, 2000.
- [15] P. Glösekötter, *Resonanz-Tunneldioden und Heterobipolar-Transistoren in dynamischen Digitalschaltungen hoher Funktionsdichte*, Dissertation, Universität Dortmund, 2002.
- [16] U. Auer, W. Prost, G. Janßen, M. Agethen, R. Reuter und F. J. Tegude, „A Novel 3-D Integrated HFET/RTD Frequency Mutliplier," *IEEE J. of Sel. Topics in Quantum Electr.*, Bd. 2, Nr. 3, S. 650–654, 1997.
- [17] V. Pellegrini, R. Colombelli, I. Carusotto, F. Beltram, S. Rubini, R. Lantier, A. Franciosi, C. Vinegoni und L. Pavesi, „Resonant Second Harmonic Generation in ZnSe Bulk Mircocavity," *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 74, Nr. 14, S. 1945–1947, 1999.
- [18] J. P. Sun, G. I. Haddad, P. Mazumder und J. N. Schulman, „Resonant Tunneling Diodes: Models and Properties," *Proc. of the IEEE*, Bd. 86, Nr. 4, S. 641–660, 1998.
- [19] H. Beneking, *Halbleiter-Technologie*, Teubner, Stuttgart, 1991.
- [20] „LOCOM - Final Report, Logic Circuits with Reduced Complexity Based on Devices with Higher Functionality," 2000, www.hlt.uni-duisburg.de-research-d_research_main.asp.
- [21] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, C. Fernando, D. Jovanovic, D. Blanks, T. S. Moise, M. Leng und W. R. Frensley, „Experimentally Verified Quantum Device Simulationis Based on Multiband Models, Hartree Self-Consistency, and Scattering Assisted Charging," in *54th Annual Device Research Conference Digest*, New York, 1996, S. 174–175, IEEE Press.
- [22] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, Springer Verlag, Wien, New York, 1984.
- [23] T. Ohtoshi, K. Yamaguchi, C. Nagaoka, T. Uda, Y. Murayama und N. Chione, „A Two-Dimensional Device Simulator for Semiconductor Lasers," *Solid-State Electronics*, Bd. 30, Nr. 6, S. 627–638, 1987.
- [24] S. Asada, S. Sugou, K. Kasahara und S. Kumashiro, „Analysis of Leakage Current in Buried Heterostructure Lasers with Semiinsulating Blocking Layers," *IEEE J. Quantum Electron.*, Bd. 25, Nr. 6, S. 1362–1368, 1989.

- [25] K. Yokohama, T. Yamanaka und S. Seki, „Two-Dimensional Numerical Simulator for Multielectrode Distributed Feedback Laser Diodes,“ *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Bd. 29, Nr. 3, S. 856–863, 1993.
- [26] G.E. Shtengel, D.A. Ackermann, P.A. Morton, E.J. Flynn und M.S. Hybertsen, „Impedance-Corrected Carrier Lifetime Measurements in Semiconductors,“ *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 67, S. 1506–8, 1995.
- [27] EMIS (editor), *Properties of Indium Phosphide*, EMIS Datareviews series No. 6, INSPEC, 1991.
- [28] G. P. Agrawal und N. K. Dutta, *Semiconductor Lasers*, Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1993.
- [29] J. Jäckle, *Einführung in die Transporttheorie*, Vieweg, Braunschweig, 1978.
- [30] E. Wigner, „On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium,“ *Phys. Rev.*, Bd. 40, S. 749–759, 1932.
- [31] W. R. Frensley, „Boundary Conditions for Open Quantum Systems Driven Far from Equilibrium,“ *Rev. of Mod. Phys.*, Bd. 62, Nr. 3, S. 745–791, 1990.
- [32] A. Stahl und I. Balslev, *Electrodynamics of the Semiconductor Band Edge*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1987.
- [33] M. Schubert und G. Weber, *Quantentheorie*, Spektrum, Akad. Verlag, Heidelberg, Berlin, Oxford, 1993.
- [34] G. J. Iafrate, H. L. Grubin und D. K. Ferry, „Utilization of Quantum Distribution Functions for Ultra-Submicron Device Transport,“ *Journal de Physique (Paris)*, Bd. 42, Nr. C-7, S. 307–312, 1981.
- [35] C. L. Gardner, „The Quantum Hydrodynamic Model for Semiconductor Devices,“ *SIAM J. Appl. Math.*, Bd. 54, Nr. 2, S. 409–427, 1994.
- [36] D. Bohm, „A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of 'Hidden' Variables,“ *Phys. Rev.*, Bd. 85, Nr. 2, S. 166–193, 1952.
- [37] G. J. Iafrate, H. L. Grubin und D. K. Ferry, „The Wigner Distribution Function,“ *Physics Letters A*, Bd. 87A, Nr. 4, S. 145–148, 1982.
- [38] M. Ploszajczak und M. J. Rhoades-Brown, „Approximation Scheme for the Quantum Liouville Equation Using Phase-Space Distribution Functions,“ *Phys. Rev. Lett.*, Bd. 55, Nr. 2, S. 147–149, 1985.
- [39] R. Makowitz, *Simulation des nicht-stationären Transportes in unipolaren III/IV-Halbleiter-Bauelementen*, Dissertation, Gesamthochschule Kassel, 1990.
- [40] M. G. Ancona und G. J. Iafrate, „Quantum Correction to the Equation of State of an Electron Gas in a Semiconductor,“ *Phys. Rev. B*, Bd. 39, Nr. 13, S. 9536–9540, 1989.

- [41] M. G. Ancona und H. F. Tiersten, „Macroscopic Physics of the Silicon Inversion Layer,“ *Phys. Rev. B*, Bd. 35, Nr. 15, S. 7959–7965, 1987.
- [42] H. L. Grubin, J. P. Kreskovsky, T. R. Govindan und D. K. Ferry, „Uses of the Quantum Potential in Modelling Hot-Carrier Semiconductor Devices,“ *Semic. Sci. Technol.*, Bd. 9, S. 855–858, 1994.
- [43] J.-R. Zhou und D. K. Ferry, „Simulation of Ultra-Small GaAs MESFET Using Quantum Moment Equations,“ *IEEE Transactions on Electron Devices*, Bd. 39, Nr. 3, S. 473–478, 1992.
- [44] C. L. Gardner und C. Ringhofer, „Smooth Quantum Potential for the Hydrodynamic Model,“ *Phys. Rev. E*, Bd. 53, Nr. 1, S. 157–167, 1996.
- [45] C. L. Gardner, „Resonant Tunneling in the Quantum Hydrodynamic Model,“ *VLSI Design*, Bd. 3, Nr. 2, S. 201–210, 1995.
- [46] D. K. Ferry und J.-R. Zhou, „Form of the Quantum Potential for Use in Hydrodynamic Equations for Semiconductor Device Modeling,“ *Phys. Rev. B*, Bd. 48, Nr. 11, S. 7944–7950, 1993.
- [47] A. Ahland, *Transportphänomene und optische Effekte in Wellenleitermodulatoren aus III-V-Halbleitern*, Dissertation, Universität Dortmund, Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik, 2001.
- [48] T. Rustige, *Modellierung der Transporteigenschaften in Halbleiterstrukturen*, Diplomarbeit am Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik, Universität Dortmund, 1999.
- [49] H. K. Gummel, „A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations,“ *IEEE Trans. Electron Devices*, Bd. 11, Nr. 10, S. 455–465, 1964.
- [50] D. L. Scharfetter und H. K. Gummel, „Large-signal Analysis of a Silicon Read Ddiode Oscillator,“ *Solid State Electronics*, Bd. 16, Nr. 1, S. 64–77, 1969.
- [51] R. Andrew, „Improved formulation of Gummel’s algorithm,“ *Solid State Electronics*, Bd. 15, Nr. 1, S. 1–4, 1972.
- [52] M. Wiedenhaus, *Dynamische Analyse optoelektronischer Bauelemente*, Diplomarbeit am Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik, Universität Dortmund, 2000.
- [53] T. P. Fontana, D. M. McGregor und R. P. Lowther, *DEFINES: A Semiconductor Device Finite Element Simulation*, Electrocon International Inc., 1982.
- [54] H. L. Grubin, „Density Matrix Simulations of Semiconductor Devices,“ in *Quantum Transport in Ultrasmall Devices*, Editiert von: D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni und A. P. Jauho, Bd. 342, S. 241–279. NATO ASI Series, 1995.
- [55] C. Koch, *Untersuchung gemittelter Quantenpotenziale zur Modellierung von Quantenbauelementen*, Studienarbeit am Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik, Universität Dortmund, 2004.

- [56] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew et al., *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 1995.
- [57] J. L. Tinoco, *Quantenmechanische Analyse des Elektronentransports in Halbleiter-Heterostrukturen*, Diplomarbeit am Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik, Universität Dortmund, 2001.
- [58] C. S. Lent und D. J. Kirkner, „The Quantum Transmitting Boundary Method,“ *J. Appl. Phys.*, Bd. 67, Nr. 20, S. 6353–6359, 1990.
- [59] R. K. Mains und G. I. Haddad, „Time-Dependent Modeling of Resonant-Tunneling Diodes from Direct Solution of the Schrödinger Equation,“ *Journal of Applied Physics*, Bd. 64, Nr. 7, S. 3564–3569, 1988.
- [60] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, S. 379–389, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [61] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics, Third Edition*, chapter 20, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.
- [62] I. B. Levinson, „Translational Invariance in Uniform Fields and the Equation for the Density Matrix in the Wigner Representation,“ *Soviet Physics JETP*, Bd. 30, Nr. 2, S. 362–367, 1970.
- [63] A. O. Caldeira und A. J. Leggett, „Path Integral Approach to Quantum Brownian Motion,“ *Physica*, Bd. 121A, S. 587–616, 1983.
- [64] W. R. Frensley, „Simulation of Resonant-Tunneling Heterostructure Devices,“ *J. Vac. Sci. Technol.*, Bd. 3, Nr. 4, S. 1261–1266, 1985.
- [65] H. Mizuta und C. J. Goodings, „Transient Quantum Transport Simulation Based on the Statistical Density Matrix,“ *J. Phys.: Condens. Matter*, Bd. 3, S. 3739–3756, 1991.
- [66] R. Gross und A. Marx, *Grundlagen der Magnetoelektronik*, Vorlesungsskript WS 2000/2001, Lehrstuhl für Technische Physik, Walther-Meissner-Institut, 2000.
- [67] G. D. Gaspari, „Bloch Equation for Conduction-Electron Spin Resonance,“ *Phys. Rev.*, Bd. 151, Nr. 1, S. 215–219, 1966.
- [68] Y. Qi und S. Zhang, „Spin Diffusion at Finite Electric and Magnetic Fields,“ *Phys. Rev. B*, Bd. 67, Nr. 052407, 2003.
- [69] E. Voges und K. Petermann, *Optische Kommunikationstechnik: Handbuch für Wissenschaft und Industrie*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2002.

Danksagung

Der erste Dank gilt meiner großartigen Familie.

Die Basis für konzentriertes Arbeiten legten im richtigen Leben Achim, Dirk, Evelyn, Fred, Martin, Sandra, Susanne und Uli.

Ich habe mich am Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik wohl gefühlt. Die Atmosphäre dort ist sehr angenehm und freundschaftlich, Herr Professor Voges hat mit offenem Ohr, dem nötigen Vertrauen und zahlreichen Anregungen und Hilfestellungen zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen.

Meine Kollegen Dr. Dirk Schulz und Dr. Andreas Ahland haben mich für dieses Projekt vorbereitet und darin wesentlich unterstützt. Petra Sauerland und Iris Spengler sind fleißige Helfer in jeder Notlage. Dirk Nüsse und Martin Zehren haben diese Arbeit kritisch begutachtet, und auch die sehr fruchtbare Zusammenarbeit mit José Luis Tinoco möchte ich nicht unerwähnt lassen.

Ich danke allen Kollegen, da ich am Lehrstuhl eine gute Zeit hatte. Hinzu kommen zahlreiche Studenten, die als Mitarbeiter und in Studien- und Diplomarbeiten ihren Beitrag geleistet haben.

Ermöglicht hat diese Arbeit die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) durch die Förderung dieses Projekts.

Lebenslauf

Name	Marco Wiedenhaus
Geburtsdatum	06.01.1974
Geburtsort	Lippstadt

Berufliche Tätigkeit

09/2004 - laufend	Mitarbeiter bei der Infineon Technologies AG
03/2000 - 06/2004	Wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik der Universität Dortmund

Weiterer Bildungsweg

10/1995 - 02/2000	Studium der Elektrotechnik an der Universität Dortmund; Diplomarbeit: „Dynamische Analyse optoelektronischer Bauelemente“ am Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik (Prof. Dr.-Ing. E. Voges)
-------------------	---

Schullaufbahn

1980 - 1984	Grundschule: Brinkmann-Schule Langenberg
1984 - 1993	Ratsgymnasium Rheda-Wiedenbrück (Abschluss: Abitur)