

Theorie des ballistischen Transportes
heißer Elektronen in inhomogen dotierten
Submicronstrukturen

von
Claus-D. Hillebrand

Diplomarbeit in Physik
vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule

im April 1989

angefertigt im

Institut für Festkörperforschung

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Zeit als Diplomand am Institut für Festkörperforschung (IFF) der KFA Jülich.

Ich möchte Herrn Dr. A. Bringer für die Anregung zum Thema und die großzügige Unterstützung herzlich danken.

Herrn Prof. Dr. P. H. Dederichs bin ich für die fruchtbaren Diskussionen während der Erstellung der Arbeit sowie für die Ausgabe der Diplomarbeit zu großem Dank verpflichtet.

Für die wertvolle Unterstützung der Schreibarbeiten möchte ich mich bei Fr.Ch. Hake besonders bedanken.

Nicht zuletzt möchte ich dem Institut für Festkörperforschung und der KFA Jülich für die außerordentlichen Arbeitsbedingungen und die finanzielle Unterstützung meinen Dank aussprechen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Warum kinetische Transporttheorie ?	3
3	Grundlagen des Elektronentransportes	4
4	Einige Worte zur Boltzmann-Gleichung	7
5	Konzepte zum eindim. Elektronentransport in einer einfachen Geometrie	8
6	Momentengleichung	10
7	Stoßintegral der Boltzmann-Gleichung	13
8	Lösung der Momentengleichung	16
9	Höhere Hierarchieansatz	20
10	Anwendung der selbstkonsistenten Gleichungen für eine inhomogene Struktur	22
11	Diskussion der Ergebnisse	23
	1. Elektronendichte und gedriftete Elektronen	23
	2. Potential und ballistische Elektronen	24
	3. Temperatur	27
	4. Die Verteilungsfunktion	29
	5. Vergleich der verschiedenen Verteilungsfunktionen	31
	6. Strom-Spannungs-Charakteristik	33
12	Warum dreidimensionalen Elektronentransportrechnungen ?	35
13	Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung	36
14	Die Übergangswahrscheinlichkeit	38
15	Stoßintegral der Boltzmann-Gleichung	41

16	Berechnung der Matrixelemente	42
17	Diskussion der Ergebnisse	46
	1.Potential und Elektrisches Feld	46
	2.Driftgeschwindigkeit	46
	3.Temperatur des realist. Elektronentransportes	47
	4.Verteilungsfunktion	48
	5.Strom-Spannungs-Charakteristik	48
18	Abschließende Diskussion	50
	Anhang A	53
	Anhang B	56
	Literatur	57
	Tabellen	59
	Bildanhang	61

1. EINLEITUNG

Transportprozesse gelten in der Physik als interessante aber auch schwierige Themen. Neuere Entwicklungen um halbleitende Schichten haben bei Theoretikern große Resonanz ausgelöst. Bisher wurde der Transport heißer Elektronen in homogen dotierten Materialien ausgiebig studiert (s. Reggiani¹ mit der Monte-Carlo-Methode, Fawcett² mit iterativer Lösung der Boltzmann-Gleichung). Die Elektronen werden durch ein von außen vorgegebenes elektrisches Feld beschleunigt und heizen sich auf.

In inhomogen dotierten Submicronstrukturen – von uns auch Xenostrukturen genannt – zeigen heiße Elektronen ein bemerkenswertes Verhalten. Sie bewegen sich im Slab ballistisch. Wenn sie in die Struktur eindringen, werden sie abgekühlt, beim Austritt erhitzen sie die Schicht. Mit einer Xenostruktur bezeichnet man ein von zwei Banks sandwichartig "eingepacktes" Slab. Banks und Slab sind unterschiedlich stark dotiert, das Slab besitzt eine laterale Länge kleiner als ein Micrometer (Submicronstruktur). Als Material verwendet man meist GaAs, da sich die Elektronen dort um einen Faktor 5 schneller bewegen als in Silicium. Mit GaAs läßt sich der ballistische Elektronentransport recht einfach und gut realisieren, dies bedeutet einen wechselwirkungsfreien und noch schnelleren Transport durch die Schicht. Einzelne Experimente haben schon einige Informationen über Xenostrukturen geliefert, zum einen die Bestimmung des totalen Widerstandes (Hollis, Eastman, Wood³) durch Strom-Spannungs-Messungen und zum anderen den Transportanteil der ballistischen Elektronen durch Spin-Polarisationsmessungen. Die Energieverteilung der heißen Elektronen läßt sich durch spektroskopische Methoden bestimmen (Hayes, Levi, Wiegman⁴). Aber noch sind viele Probleme unverstanden.

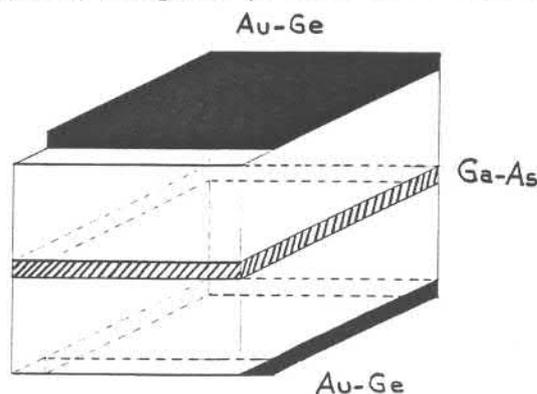


Fig1. Die Abbildung zeigt eine Xenostruktur, auf der die Breite des Slabs

0.4 μm (schraffierter Bereich) und die der Banks 100 μm beträgt. Die Au-Ge-Kontakte sind auf dem Substrat aufgedampft. Die Banks sind n-hochdotiert 10^{18}cm^{-3} und das Slab ist niederdotiert $2 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$.

Um den Elektronentransport in Xenostrukturen beschreiben zu können, eignen sich die oben genannten Methoden, die für die Beschreibung homogener dotierter Schichten konzipiert wurden, nicht. So erlauben die Methoden nicht die selbstkonsistente Berechnung des elektrischen Feldes (Monte-Carlo-Methode), bzw. können sie die unterschiedliche Elektronendichte in der Struktur nicht berücksichtigen.

Einige Theoretiker haben deshalb Konzepte entwickelt, die den ballistischen Effekt und den Temperaturverlauf im Slab erklären, und zwar zum einen für realistische Bandstrukturen Baranger⁵ mittels einer modifizierten Boltzmann-Gleichung und zum anderen unter dem Aspekt der Kopplung des Elektronenstromes mit dem Phononenbad. Dieser Beitrag stammt von Bringer und Schön⁶, die in ihrem Konzept die Boltzmann-Gleichung selbstkonsistent mit der Poisson-Gleichung lösen. Sie verwenden einen Momentenansatz, der es ihnen erlaubt, einige physikalische Größen, wie die Temperatur und den Wärmestrom, zu gewinnen. Mit Hilfe der Momentenmethode läßt sich auch der Einfluß jeder Art von Streuprozessen simulieren, unter Einbezug des voll quantenmechanisch berechneten Stoßoperators. Dies erlaubt den Elektronentransport, d.h., die Geschwindigkeitsverteilung nicht nur in Stromrichtung sondern auch in den Querkomponenten zu berechnen. Damit ergäbe sich die Chance, den realistischen Elektronenfluß in der Schicht besser zu verstehen. Für die Geschwindigkeitsverteilungen quer zum Elektronenfluß erwartet man eine Abweichung vom Gleichgewicht; obwohl keine Nettoströme in Querrichtung fließen, werden z.B. durch die Elektron-Phonon-Streuung dennoch Nichtgleichgewichtsbeiträge erzeugt.

Wenn Streuprozesse unterscheidbar und unabhängig voneinander sind, addieren sich die Übergangswahrscheinlichkeiten und folglich die Relaxationszeiten. Somit läßt sich der Widerstandsbeitrag jedes Streuprozesses zum totalen Widerstand qualitativ vorhersagen, was wir von der Matthiessen-Regel her kennen. So schließt sich der Kreis der Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment.

2. Warum kinetische Transporttheorie ?

Die kinetische Theorie nimmt an, daß alle makroskopische Variablen im Prinzip von den Eigenschaften des Systems, das heißt, aus der Kenntnis der Wechselwirkungen und der Struktur der Ladungsträger abgeleitet werden können. Im Gleichgewicht werden die Elektronen nicht durch äußere Felder (elektr. Feld oder Temperaturgradienten) beschleunigt. Ein Elektronentransport kommt erst dann zu stande, wenn die Ladungsträger zum Driften angeregt werden, z.B. durch ein von außen angelegtes elektrisches Feld. Dabei muß noch die Diffusion betrachtet werden, die lokale Dichtegradienten, die beim Transport entstehen, abbaut. Man unterscheidet den stationären (zeitunabhängigen) und den nichtstationären (zeitabhängigen) Transport. Den Bewegungsprozessen wirken meist binäre Stoßprozesse, z.B., Elektron-Gitter-Stöße entgegen, die auch eine Energie- und Impulsänderung verursachen. Um so ein Vielteilchensystem exakt beschreiben zu können, müßte die Information über die Position \vec{r} und die Geschwindigkeit \vec{v} zur Zeit t aller Teilchen und über deren Wechselwirkung (WW.) untereinander vorliegen. Mit den Variablen \vec{r}, \vec{v}, t beschreibt man die Bewegungszustand eines Teilchens. Schon bei mehr als zwei Teilchen treten rechnerische Probleme auf, so daß man gezwungen ist, das statistische Verhalten eines Teilchens zu studieren, welches die Gesamtheit der Teilchen durch eine Verteilungsfunktion repräsentiert. Die Bewegungsprozesse bringen die Verteilungsfunktion aus der Gleichgewichtsform. Diese Nichtgleichgewichtsform sind meist physikalisch und mathematisch schwierig zu behandeln, besonders dann, wenn die Felder in Xenostrukturen inhomogen werden. Den Elektronentransport in diesen Strukturen zu berechnen und zu verstehen ist eine Aufgabe, die wir uns gestellt haben.

3. Grundlagen des Elektronentransportes

Das statistische Verhalten eines Elektronenstromes beschreibt eine Gleichung aus der kinetischen Theorie: die Boltzmann-Transportgleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{e\vec{E}}{m^*} \frac{\partial}{\partial \vec{v}}\right) f(\vec{r}, \vec{v}, t) = -I_{\text{coll}}[f], \quad (1a)$$

$$I_{\text{coll}}(f) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{\text{coll}} f = \int d\vec{v}' (W(\vec{v}, \vec{v}') f(\vec{r}, \vec{v}, t) - W(\vec{v}', \vec{v}) f(\vec{r}, \vec{v}', t)). \quad (1b)$$

Der kinetische Term der Boltzmann-Gleichung (1a) beschreibt die Bewegung der Elektronen, welche durch zwei Transportprozesse charakterisiert wird. Die freie Bewegung (Ableitung nach dem Ort) bestimmt den Stromfluß ohne äußere Kraft. Der Feldterm (Ableitung nach der Geschwindigkeit) erzeugt einen Strom homogener Dichte unter der Wirkung eines äußeren Kraftfeldes. Das zeitliche Verhalten der Verteilungsfunktion wird durch die Ableitung nach der Zeit berücksichtigt. Jedoch soll das stationäre Verhalten der Verteilungsfunktion in dieser Arbeit untersucht werden, somit ist die Verteilung nur noch eine Funktion im Ort und in der Geschwindigkeit $f(\vec{r}, \vec{v})$.

Die Wirkung der mikroskopischen WW auf den Elektronentransport beschreibt der Stoßterm (1b). Wir verwenden die linearisierte Boltzmann-Gleichung (Begründung s.u.), was auch an dem Stoßintegral der Boltzmann-Gl. — die gesuchte Verteilungsfunktion geht linear in das Integral ein — zu erkennen ist. Mit dem Stoßintegral werden wir uns später noch intensiver beschäftigen. Deshalb schicken wir nur voran, daß $W(\vec{v}', \vec{v})$ die Übergangswahrscheinlichkeit darstellt. Sie wird mittels quantenmechanischer Störungstheorie berechnet und bestimmt mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Elektron gestreut und wie groß die Energie- und Impulsänderung der Streuung von $\vec{v} \rightarrow \vec{v}'$ ist. Die Streuung wirkt dem Beschleunigungsterm entgegen, d.h. sie relaxiert die durch das Feld verursachte Störung der Verteilungsfunktion. Durch das Feld wird Energie zugeführt, durch den Stoßterm wird sie abgegeben, er ist deshalb für die Dissipation des Elektronentransportes verantwortlich.

In unserer Untersuchung behandeln wir keine realistische Bandstruktur. Die Bandstruktur von GaAs erlaubt die Näherung des parabolischen Leitungsbands mit der effektiven Masse $m^* = 0.07m_e$.

Die direkte Energielücke zwischen parabolischem Leitungs- und Valenzband beträgt $E_{gap} = 1.5[eV]$. Mit Temperaturen größer als $O^\circ[K]$ geht somit die Fermiverteilung der Elektronen in eine einfachere Statistik, nämlich die Boltzmannverteilung über. In unserem Fall ist die Besetzung der Leitungsbandzustände stets sehr gering, deshalb ist es zulässig, daß wir die nichtlinearen Beiträge der Verteilungsfunktion

$$(1 - f(t, \vec{r}, \vec{v}')) = (1 - f(t, \vec{r}, \vec{v})) \approx 1$$

gleich Eins setzen, womit wir die Boltzmanngl. linearisiert haben. Der Stoßoperator $I[f]$ umfasst sowohl die Streuung der Elektronen mit Impurities $I_{imp}[f]$ als mit Phononen $I_{ep}[f]$. Mit Hilfe der Bornschen Näherung ist diese Separation erlaubt

$$I[f] = I_{imp}[f] + I_{ep}[f].$$

Dies bedeutet, daß man theoretisch die Stoßprozesse einzeln untersuchen kann. Das Studium einzelner Stoßprozesse ist für Experimentatoren sehr interessant, da sie nur den integralen Widerstand (d.h. alle Stoßprozesse gemeinsam) messen können.

Da wir den Elektronentransport in einer inhomogenen dotierten Struktur untersuchen, müssen wir die niedrigere Dotierung im Slab berücksichtigen, anders formuliert: die Berechnung des Elektronentransportes muß um das elektrische Feld ergänzt werden, welches allein durch die unterschiedliche Dotierung erzeugt wird. Wir verwenden die Poissongleichung

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{4\pi}{\epsilon} e(N(\vec{r}) - N_D^+(\vec{r})), \quad (2)$$

dabei ist $e(N(\vec{r}) - N_D^+(\vec{r}))$ die totale Raumladungsdichte. Die Poissongl. muß für die Lösung der Boltzmanngl. berücksichtigt werden. Man spricht deshalb auch von einer selbstkonsistenter Lösung beider Gleichungen.

Das Problem der inhomogen dotierten Struktur soll nun anhand des Gleichgewichtsfalls diskutiert werden. Den Effekt der Inhomogenität ohne angelegten Strom stellen die Elektronendichte (volle Linie), potentielle Energie (Strichpunktlinie) und das elektrische Feld (gestrichelte Linie) bereits gut dar (Abb.1). Alle

drei Kurven zeigen deutlich, daß der Effekt der Inhomogenität recht groß ist. Die Dichte ändert sich auf $d=0.1[\mu m]$ stärker als zwei Größenordnungen. Das Potential steigt steil in das Slab, und das elektrische Feld bildet Spitzen mit mehr als $E=20[\frac{kV}{cm}]$ an den Übergängen. Der große örtliche Gradient in der Elektronendichte wird durch die Elektronen erzeugt, die von den Banks in das Slab überlaufen. Er besitzt eine Ausdehnung einer Debyelänge (darauf wird später noch eingegangen). Der Elektronenüberlauf baut eine Dipolschicht auf, die die scharfen Spitzen im elektrischen Feld an den Übergängen und den Aufbau der Potentialbarriere bewirkt. Bei nichtangelegter Spannung sind Kurven symmetrisch bzgl. der Slabmitte, eine angelegte Spannung zerstört die Symmetrie. Im Gleichgewicht $I = 0[\frac{A}{cm^2}]$ hat die Barriere eine Höhe von $V = .15[eV]$, die Potentialdifferenz zwischen den Übergängen ist Null. Die negativen Elektronen fließen von links nach rechts, der Strom fließt in die andere Richtung. Während die logarithmisch aufgetragene Dichte im Slab drastisch variiert, ist die Nettoladung so klein, daß $E(x)$ sich dort langsamer verändert als an den Übergängen. Auf dieses Problem kommen wir später noch zurück, und zwar wenn wir ein äußeres Feld anlegen.

4. Einige Worte zur Boltzmann-Gleichung

In der Boltzmann-Gleichung ist die Verteilungsfunktion eine Funktion von Geschwindigkeit und Ort $f(\vec{v}, \vec{x})$, wir glauben das System durch Einteilchenverteilungsfunktionen klassifizieren zu können. Der kinetische Operator und der Stoßoperator, den wir quantenmechanisch berechnen, wirken auf die Verteilungsfunktion. Um den Elektronentransport mit der Boltzmann-Gleichung semiklassisch beschreiben zu können, müssen Näherungen durchgeführt werden. Diese semiklassische Annahme umfasst unter anderem folgende Näherungen:

- a) Die Stöße der Teilchen mit dem Gitter oder auch mit sich selbst sind instantan im Raum und Zeit.
- b) Das elektrische Feld hat keine Auswirkung auf die Stoßprozesse.
- c) Die Elektronenverteilung ist nicht entartet, d.h., Fermi-Statistik kann durch die Boltzmann-Statistik ersetzt werden $E_G \gg k_B T$.

Nun betrachten wir ein System, in dem Felder örtlich stark variieren. Bis heute ist nicht geklärt, auf welchen Längenskalen das Feld wie stark variieren darf, damit die Boltzmann-Gleichung gültig bleibt. Wir nehmen die thermische Wellenlänge $\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mk_B T}} \simeq 0.005 [\mu m]$ als untere Grenze der Längenskala an, auf der die mikroskopischen Felder gegenüber den äußeren Feldern irrelevant werden. So liegen wir für die Variationsbreite des E-Feldes deutlich unter der mittleren freien Weglänge.

5. Konzepte zum eindim. Elektronentransport in einer einfachen Geometrie

Vorab sei bemerkt, daß die Driftdiffusionsgleichung eine phänomenologische Methode ist, die bisher gewöhnlich für die Berechnung des Stromes J , der Dichte $N(x)$ und des elektrischen Feldes von inhomogenen Halbleitern benutzt wurde - (Sze⁷). Diese Gleichung verbindet die Poissongl. mit einem Ausdruck für den Strom als Summe des Driftterms, welcher proportional zum Feld ist, und eines Diffusionsterms, welcher proportional zum Gradienten der Dichte ist

$$J = e N(x) \mu(E) E(x) + e D(E) \frac{dN}{dx}. \quad (3)$$

Die Mobilität μ und die Diffusion D stellen Funktionen des elektrischen Feldes dar. Die Gleichung ist stationär, d.h., eine Zeitabhängigkeit wird nicht betrachtet (s.a. Momentenansatz Gl. (7b)). Die Poisson- und die Driftdiffusionsgleichungen werden gleichzeitig für $N(x)$ und $E(x)$ bei einem angelegten Strom gelöst. Die Beschränkung auf diese beiden Gleichungen liefert eine simple Methode, welche insofern praktisch ist, da nur zwei Differentialgleichungen gelöst werden müssen. Diese Methode beinhaltet grobe Näherungen, z.B. vernachlässigt sie die Temperaturänderung im Slab, dies zieht ein Verlust an physikalische Information nach sich. Die Nichtlinearitäten des elektrischen Feldes müssen auf eine ortsabhängige Mobilität bzw. Diffusion eine Wirkung haben. Diese Relation kann die Methode genauso wenig berücksichtigen wie ballistische Effekte. Eine ausführliche Diskussion dieser Methode, ebenso wie die der verschobenen Verteilungsfunktion- und Monte-Carlo-Methode liefert Baranger⁵ in seiner Arbeit.

Wir gehen auf die Methoden nicht weiter ein, sondern skizzieren die Lösungsmethode, die Baranger⁵ zugrunde gelegt hat, bevor wir die von uns benutzte Momentenmethode präsentieren.

Das Lösungsverfahren von Baranger⁵ basiert auf der bekannten Näherung des diagonalen Stoßoperators. Seine Verteilungsfunktion enthält die Einteilcheninformation des semiklassischen Systems. Poisson- und Boltzmann-Gleichung werden selbstkonsistent gelöst

$$\frac{-eE}{m^*} \frac{\partial f}{\partial v} + v \frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{f(v, x) - f_{eq}(v, x)}{\tau}. \quad (4, a)$$

$$\operatorname{div} E = \frac{4\pi e}{\epsilon} [N_D(x) - N(x)]. \quad (4, b)$$

Die lokale Gleichgewichtsfunktion, in die die Elektronen relaxieren, $f_{eq}(v, x)$, ist einfach eine Maxwellverteilung bei fester Gittertemperatur T_0 und lokalen Elektronendichte $N(x)$:

$$f_{eq}(v, x) = N(x) \left(\frac{m^*}{2\pi k T_0} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m^* v^2}{2k T_0}\right). \quad (5)$$

Für ein parabolisches Band (single-valley) führt er folgende Basisprozedur durch: Er nimmt eine Initialdichte $N^{in}(x)$ und erzeugt damit die Gleichgewichtsverteilungsfunktion $f_{eq}(v, x)$ und das elektrische Feld $E(x)$. Die Variablen der Boltzmanngl. werden transformiert von $(x, v) \rightarrow (x, w)$, wobei $w = \frac{v^2}{2m^*} + v(x)$, d.h., die Gesamtenergie zur Position x darstellt. Danach löst er einen Satz gekoppelter, gewöhnlicher Differentialgleichungen im Energie- und Raumgitter, im Gegensatz zu partiellen Differentialgleichungen. Für die Grenzwerte von $f(x, v)$ an den Kontakten zum Slab erhält man bereits eine Lösung für das homogene Feld E_0 (Bulklösung). Mit $N^{aus}(x) = \int dv f(v, x)$ bekommt Baranger eine Ausgangsdichte, welche zur Bestimmung der Ladungsneutralität skaliert wird. Weiterhin benutzt er eine simple Abschirmprozedur, um die Ladungsszillation zu dämpfen, somit wird die Konvergenz der Lösung verbessert.

Obwohl Baranger⁵ mit seiner Methode Bandstruktureffekte leicht in die Rechnungen einbeziehen kann, nämlich indem er für jedes Band einen Satz von Gleichungen löst und schon eine relative gut Konvergenz der Lösung erhält, leistet sie bis heute keine Beschreibung eines realistischen Elektronenflusses. Die Anforderung erfüllt unsere Momentengleichung bei voller Beschreibung der Stoßprozesse. Zu Testzwecken vergleichen wir unsere Methode des eindimensionalen Elektronentransport für die eindimensionale Geometrie mit der von Baranger, was die nun folgende Aufgabe ist. Doch zuerst stellen wir unsere Lösungsmethode vor.

6. Momentengleichung

Die Boltzmann-Gleichung hat die Form einer Integrodifferentialgleichung. Eine solche Gleichung ist nicht mehr analytisch lösbar. Um die Gleichung numerisch zu lösen, bietet es sich an, sie nach Momenten zu entwickeln (Momentenmethode). Integriert man die Verteilungsfunktion $f(\vec{v}, \vec{r}, t)$ über d^3v und multipliziert sie unter dem Integral mit höheren Geschwindigkeitspotenzen \vec{v}^n ($n = 0, 1, 2, \dots$), so erhält man folgende Momente

$$N(\vec{r}, t) = \int d^3v f(\vec{v}, \vec{r}, t), \quad (6a)$$

$$J_i(\vec{r}, t) = \int d^3v v_i f(\vec{v}, \vec{r}, t), \quad (6b)$$

$$K_{ij}(\vec{r}, t) = \frac{m}{2} \int d^3v f(\vec{v}, \vec{r}, t) \cdot v_i v_j, \quad (6c)$$

$$Q_{ijk}(\vec{r}, t) = \frac{m}{2} \int d^3v f(\vec{v}, \vec{r}, t) v_i v_j v_k. \quad (6d)$$

$$R_{ijkl}(\vec{r}, t) = \frac{m^2}{2} \int d^3v f(\vec{v}, \vec{r}, t) v_i v_j v_k v_l. \quad (6e)$$

Die ersten vier Momente haben alle eine physikalische Bedeutung. $N(\vec{r}, t)$ steht für die Dichte der Leitungselektronen, $\vec{J}(\vec{r}, t)$ ist die Stromdichte, $K(\vec{r}, t)$ steht für die kinetische Energiedichte und $Q(\vec{r}, t)$ die Wärmestromdichte. $R(\vec{r}, t)$ ist das erste Moment, welches sich nicht mehr anschaulich interpretieren läßt, aber dennoch für das Abschließen der Gleichungshierarchie wichtig sein wird. Bei allen Momenten handelt es sich um Funktionen im Ort und in der Zeit. Die Störung der Gleichgewichtsverteilung als Funktion vom Ort geht in die Momente ein. Es lassen sich somit die Dichte der Elektronen, deren ballistische und Driftgeschwindigkeit sowie der Temperaturverlauf und der Wärmestrom der Elektronen in Abhängigkeit von der Position im Slab ermitteln.

Integrieren wir die Boltzmann-Gl. 1a-b auch über $\int d^3v v^n$ ($n = 0, 1, \dots$), so erhalten wir für n (1-4) vier Gleichungen, in denen die obigen Momente wieder auftreten.

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \text{div} \frac{J_i}{e} = \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_{cr} N, \quad (7a)$$

$$\frac{\partial J_i}{\partial t} + \frac{2e}{m} \sum \frac{\partial}{\partial r_i} K_{ij} - \frac{e^2}{m} E_i N = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{\text{coll}} J_i, \quad (7b)$$

$$\frac{\partial K_{ij}}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial}{\partial r_k} \cdot Q_{ijk} - \frac{e}{2} (E_i J_j + E_j J_i) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{\text{coll}} K_{ij}, \quad (7c)$$

$$\frac{\partial Q_{ijk}}{\partial t} + \frac{2}{m} \sum_l \frac{\partial}{\partial r_l} R_{ijkl} - \frac{e}{m} (E_i K_{jk} + E_j K_{ik} + E_k K_{ij}) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{\text{coll}} Q_{ijk}. \quad (7d)$$

Dies ist die allgemeine Gleichungsform, welche auch erlaubt die transversale Geschwindigkeitskomponenten und die dreidimensionale Geometrie sowie den instationären Transport zu beschreiben.

Jede Gleichungshierarchie muß noch um 2 weitere Gleichungen ergänzt werden.

$$\text{div } \vec{E} = \frac{4\pi}{\epsilon} e(N - N_D^+), \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} N_D^+ = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{cr} N_D^+. \quad (7e)$$

Die Poissongl. gewährleistet die selbstkonsistente Lösung des Problems und die zweite Gleichung ist notwendig falls Rekombination bzw. Generationsprozesse vorliegen.

Die erste Gleichung ist die Kontinuitätsgleichung für die Teilchenzahlerhaltung. Sie kann als allgemeine Bilanzgleichung verwendet werden, auf der rechten Seite der Gleichung müssen dann die Produktion bzw. Vernichtung von Ladungsträgern mitaufgeführt werden. Wir berücksichtigen aber keine Prozesse, die zu einer Teilchenzahländerung führen, so ist $\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{cr} N = 0$. Die zweite Gleichung (7b) entspricht der instationären Drift-Diffusionsgleichung. Herkömmliche Verfahren schließen mit dem Ansatz $K_{ij} = kN \frac{k_B T}{2} \delta_{ij}$, um die Gleichungshierarchie abzuschließen, wobei T die unveränderte Gittertemperatur darstellt. D.h., daß die Temperatur der Elektronen unverändert bleibt. Viele bis heute durchgeführte Rechnungen bzw. Simulationen schließen mit der 2. Hierarchie (s.a. Kapitel 5) ab.

Bringer und Schön⁶ haben in ihrem Konzept des Elektronentransportes diese beiden Gleichungen auf eine allgemeine Form gebracht, die es erlaubt, beliebig hohe Gleichungshierarchien zu berechnen. Eine erweiterte Gleichung ist z.B. Gl. (7c); sie beschreibt die zeitliche Änderung der Energiedichte im Gleichgewicht

mit der Jouleschen Wärme, mit der räumlichen Divergenz des Wärmestromes und der Relaxation mit dem Phononenbad. Die letzte Momentengl. beschreibt die zeitliche Änderung der Energiestromdichte. R_{ijkl} ist ein höheres Moment, das zwar keine direkte physikalische Bedeutung mehr besitzt, aber dennoch für den Abschluß der 4-er Gleichungshierarchie wichtig ist. Dieses Moment läßt sich im 1-dim. Fall noch durch niedrige Momente definieren (s.a. Appendix A). Man kann auch, wenn die Konvergenz der Lösung es erlaubt, in dieser Definition den Wärmestrom Q_{ijk} und den Strom J_i gleich Null setzen. Die Definition des abschließenden Moments K_{ij} für die 2-er Hierarchie und R_{ijkl} für die 4-er Hierarchie muß auf jeden Fall die Dichte umfassen (s.a. Appendix A oder auch den Abschluß der 2-H), da wir in unserem Konzept jedes Moment in der Xenostruktur, auch die Dichte, ortsabhängig behandeln möchten. Analog gilt dies für die Definition der abschließenden Momente noch höhere Hierarchien. Wir nennen diese Art des Gleichungsabschlusses auch Normalabschneidung. Die Struktur der Gln. (7a)–(7d) ist gleich. Die Gleichung für das n -te Moment ist mit dem $(n-1)$ -ten und der Ableitung des $(n+1)$ -ten Moments gekoppelt. Der entscheidende Punkt für die Lösung jeder beliebig hohen Gleichungshierarchie bleibt nach wie vor, die Gleichungen so gut abzuschließen, daß die Lösung gut gegen die exakte Lösung konvergiert. Mit n Gleichungen ($n \rightarrow \infty$) approximiert man die Verteilungsfunktion am besten. (s.a. Gl. (15))

7. Stoßintegral der Boltzmann-Gleichung

Der Stoßterm der Boltzmann-Gleichung über $\int d\vec{v} \cdot \vec{v}_i$ ($i = 0, 1, \dots$) integriert wird zu

$$\int d\vec{v} \vec{v}_i I[f] = \int d\vec{v} \vec{v}_i \int d\vec{v}' (W(\vec{v}, \vec{v}') \cdot f(\vec{r}, \vec{v}) - W(\vec{v}', \vec{v}) \cdot f(\vec{r}, \vec{v}')). \quad (8)$$

$I[f]$ wird unsere Bezeichnung für den Stoßoperator sein.

Für den Gleichgewichtsfall, d.h., der Stoßoperator $I[f]$ wird gleich Null, kompensieren sich die freie Bewegung und der Beschleunigungsterm. Dies legt folgende Beziehung nahe, die man detailliertes Gleichgewicht nennt

$$W(\vec{v}, \vec{v}') \cdot e^{-\frac{v^2}{2}} = e^{-\frac{v'^2}{2}} \cdot W(\vec{v}', \vec{v}), \quad (9)$$

und die für alle physikalischen Stoßprozesse erfüllt ist. Zwischen den Streuwahrscheinlichkeiten in Hin- und Rückrichtung besteht eine Symmetrierelation.

Das detaillierte Gleichgewicht besagt, daß Streuprozesse mit einer Erhöhung der Energie weniger wahrscheinlich sind als solche, die zu einer Verminderung der Energie führen. Anders formuliert: Hin- und Rückstreuprozesse halten sich die Waage. Für den Nichtgleichgewichtszustand beschreibt das detaillierte Gleichgewicht die Relation zwischen Hin- und Rückstreuprozessen, in die die Gewichtsfunktionen $\exp(-\frac{v^2}{2})$ und $\exp(-\frac{v'^2}{2})$ eingehen (s. Appendix B). Die Gleichungen, die bisher verwendet worden sind, beschreiben den kinetischen Transport der Elektronen. Es bietet sich an, die Gleichungen systematisch abzuleiten bzw. zu erweitern, dazu führen wir eine orthogonale Entwicklung nach Hermitefunktionen durch. Dies stellt ein nützliches Konzept dar, um die Gln. vom Integralcharakter zu befreien, zugunsten reduzierter gewöhnlicher Dgln. Bringen wir die Gleichungen erst einmal in eine dimensionslose Form. Wir benutzen die Debyeabschirmlänge λ_D , die inverse Plasmafrequenz t_0 und die thermische Energie $k_B T$ als Längen-, Zeit- und Energieskala

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon k_B T}{4\pi e^2 N_0} \right)^{1/2}$$

$$t_0 = \left(\frac{\epsilon m}{4\pi e^2 N_0} \right)^{1/2} \quad (10a + b)$$

Die Skalen sind im allgemeinen Funktionen der Elektronendichte. Innerhalb des Slabs ist die Debyelänge $1/3$, außerhalb $1/94$, bedingt durch unterschiedlichen Elektronendichten. Desweiteren wird eine Dichteskala N_0 gewählt, die im Zusammenhang mit unserem Problem die asymptotische Elektronendichte $N_D = N_{th}(x \rightarrow \infty)$ darstellt. Das elektrische Feld besitzt dann die Einheit

$$\frac{k_B T}{e \lambda_D}. \quad (10c)$$

Die Stoßintegrale haben folgende allgemeinen Eigenschaften:

- i) Die Stoßprozesse $I[f]$ lassen eine thermische Verteilung auch dann invariant, wenn die totale Dichte außerhalb des Gleichgewichts ist. In niedriger Dichtegrenze bedeutet dies $I[N \exp(-\frac{v^2}{2})] = 0$. Die Generations- und Rekombinationsprozesse $I_{cr}[f, N_D^+]$ verschwinden nur, falls die Dichten wahre Gleichgewichtsfunktionen sind $I_{cr}[N_{th} \exp(-\frac{v^2}{2}); N_{th}]$
- ii) Abweichungen der Elektronenverteilung von der thermischen Form zerfallen in der Zeit exponentiell, d.h., die Stoßoperatoren sind positiv definit (Gl. (4a)). Diese Eigenschaften legen es nahe, die Verteilungsfunktion in eine orthogonale Reihenentwicklung von Hermite-Polynomen $He_n(v)$ zu approximieren, allein schon um die Boltzmann-Gleichung vom Integralcharakter zu befreien

$$f(\vec{v}, \vec{r}, t) = \exp(-\frac{\vec{v}^2}{2}) \cdot \sum_n f_{\vec{n}}(\vec{r}, t) \cdot He_n(\vec{v}) \quad (11)$$

Für den dreidimensionalen Elektronenfluß ist $He_{\vec{n}}(\vec{v}) = he_{n_x}(v_x) \cdot he_{n_y}(v_y) \cdot he_{n_z}(v_z)$ ein Produkt von Hermitepolynomen, eins für jede Geschwindigkeitsrichtung. Der Satz der Hermitefunktionen ist vollständig und orthonormalisiert. Die Koeffizienten haben die Bedeutung von Momenten.

$$N = f_{000}; 2K_{xy} = f_{110}$$

$$Q_{xxx}/3 - J_x/2 = f_{300}; 2R_{xxyz} - K_{yz} = f_{311}$$

$$J_x = f_{100}; K_{xx} - N/2 = f_{200}$$

$$Q_{xxy} - J_x/2 = f_{210}; R_{xxyy} - (K_{xx} + K_{yy})/2 + N/2 = f_{220}$$

$$R_{xxxx}/6 - K_{xx}/2 + N/8 = f_{400}$$

$$2R_{xxxx}/3 - K_{xy} = f_{310}$$

$$2Q_{xyz} = f_{111}. \quad (12)$$

Sie haben auch die Bedeutung von verallgemeinerten thermodynamischen Variablen und sind in den Indizes zyklisch. In dieser n -Darstellung transformieren sich die Streuintegrale für die Boltzmann-Gleichung, welche das detaillierte Gleichgewicht erfüllen, in eine positiv definite symmetrische Matrix

$$I[f] = (2\pi)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\vec{v}^2}{2}\right) \sum_{nn'} H e_n(\vec{v}) \sqrt{\frac{[n']!}{[n]!}} \langle \vec{n} | I | \vec{n}' \rangle f'_n \quad (13)$$

mit $[n]! = n_x! n_y! n_z!$. Der Vorfaktor berücksichtigt die Normierung der Hermitepolynome. Diese Form umfaßt den realistischen Elektronenfluß, die Zeitabhängigkeit der Verteilungsfunktion sowie den allgemeinen Stoßoperator $\langle \vec{n} | I | \vec{n}' \rangle$. Mit ihrer Hilfe lassen sich Momente bis zu beliebig hohen Ordnungen entwickeln.

8. Lösung der Momentengleichung

Für die Berechnung der inhomogenen Struktur muß ein nichtlineares inhomogenes gekoppeltes Differentialgleichungssystem gelöst werden. Für den eindimensionalen stationären Elektronentransport reduzieren sich die obigen Gleichungen unter Verwendung der dimensionslosen Einheiten $E_x = E$, $J_x = J$, $K_{xx} = k$, $Q_{xxx} = q$, $R_{xxxx} = r$, $s_{xxxxx} = s$ und $u_{xxxxxx} = u$ zu

$$\frac{dE}{dx} = N - N_D, \quad (14a)$$

$$J = \text{const}, \quad (14b)$$

$$-E \cdot N + 2dk/dx = -\frac{1}{\tau}J, \quad (14c)$$

$$-E \cdot J + dq/dx = -\frac{1}{\tau}(k - N/2), \quad (14d)$$

$$-3E \cdot K + 2dr/dx = -\frac{1}{\tau}q, \quad (14e)$$

$$-4E \cdot q + 2ds/dx = -\frac{1}{\tau}r, \quad (14f)$$

$$-5E \cdot r + 2du/dx = -\frac{1}{\tau}s, \quad (14g)$$

$$u = \frac{9N}{8} - \frac{9k}{2} - 4r. \quad (14h)$$

Um das Prinzip des Lösungsverfahrens zu demonstrieren, legen wir die 2-H zugrunde, die höheren Hierarchien lösen sich entsprechend. Die Gleichungen 14 (a + c) sind über die Dichte und das elektrische Feld miteinander gekoppelt. Das abschließende Moment wird durch den Ansatz $k = Nk_B T$ definiert, bei konstanter Temperatur T. Die Gleichungen lauten dann

$$\frac{dE}{dx} = N - N_D, \quad (14, I)$$

$$J = \text{const}, \quad (14, II)$$

$$-E \cdot N + 2dk/dx = -\frac{1}{\tau}J, \quad (14, III)$$

wir setzen $k_B T = 1$. Mit J können wir den äußeren Strom vorgeben. Als ersten Schritt führen wir die Bulkanalyse durch. Dabei nimmt man an, daß keine Veränderung in der Dotierung ($N_D(x) = const.$) vorliegt, dies bedeutet, daß das elektrische Feld und die Dichte im Bulk konstant sind. Aus den Gleichungen erhalten wir, da die Ableitungen nun wegfallen, die Bulkwerte E_{Bulk} und N_{Bulk} . Die Bulkwerte werden von der inhomogenen Dichte bzw. von dem elektrischen Feld subtrahiert.

$$e = E - E_{Bulk}$$

$$n = N - N_{Bulk}$$

Die Beziehung wird in die Gleichungen (14, I + II) eingesetzt

$$\frac{de}{dx} = n, \quad (14, III)$$

$$\frac{dn}{dx} = ne + eN_D + E_{Bulk}n + E_{Bulk}N_D + J/\tau, \quad (14, IV)$$

Die letzten beiden Terme der zweiten Gleichung heben sich auf. Aufgrund des Terms $-ne$ ist die Gleichung nichtlinear. Im asymptotischen Bereich (Übergang zum Bulk) können wir diesen Term vernachlässigen. Mittels linearer Analyse des linearisierten Differentialgleichungssystems können wir die Eigenwerte λ_n und die Eigenvektoren V_n berechnen. Sie sind für den Lösungsansatz:

$$z(a_i) = \sum_n a_i \cdot V_n \cdot \exp(-\lambda_n x)$$

$$w(a_i) = \sum_n b_i(a_i) \cdot V_n \cdot \exp(-\lambda_n x), \quad (14, a + b)$$

notwendig. a_i ist der Startvektor, mit $i=n/2$, für die 2-er H ist $n=2$. Für den Übergang vom linken Bank steht der Lösungsansatz $z(a_i)$ und den zum rechten $w(a_i)$ Mit diesem Ansatz lassen sich generell die Lösungen des Differentialgleichungssystems gewinnen. Die Exponentialfunktionen bestimmen das Lösungsverhalten, welches von dem Vorzeichen der Eigenwerte λ_n abhängt. Der Lösungsansatz liefert für die vollständige mathematische Lösung, eine Linearkombination, zweier Exponentialfunktionen mit Eigenwerten unterschiedlichen Vorzeichens. Um die Bulkbedingung auf beiden Seiten des Slabs zu erfüllen, muß jeweils der exponentiell wachsende Teil der Linearkombination gleich Null werden. Dies erreicht man,

indem man die Koeffizienten a_i und b_i , die miteinander korreliert sind, entsprechend anpaßt. Im Fall der 2-H läßt sich der Koeffizient a_i , Startvektor genannt, mit dem Schießverfahren bestimmen. Das Schießverfahren basiert darauf, daß man einen Startvektor in den Lösungsansatz für die linke Seite einsetzt, es berechnet dann die Lösung für die rechte Seite. Das Lösungsverhalten bei gegebenem Startvektor analysiert und variiert man sooft, bis der 'unerwünschte' Eigenvektor herausfällt. Dieses 'manuelle' Startvektorsuchverfahren ermöglicht die Lösung des Randwertproblems, es hat aber den Nachteil, daß es ein sehr mühsames Verfahren ist, besonders dann wenn, man es für höhere Hierarchien anwendet. Wir wollen erstmals die Lösung für die 6-Hierarchien bestimmen. Die lineare Mannigfaltigkeit des Lösungsraums für 6 Gleichungen reduziert sich, analog zum 2-H Beispiel, von 6 auf 3 Dimensionen, d.h., $i=3$. Die Nichtlinearität führt zu Singularitäten, welche eine empfindliche Abhängigkeit der Lösung von den zu bestimmenden gekoppelten Konstanten bewirkt. Wir sind bestrebt einen Startvektor \vec{A} zu finden, der die Koeffizienten des exponentiell wachsenden Terms, des Lösungsansatzes der anderen Seite zu Null macht

$$\vec{B}(\vec{A}) = \vec{0}, \quad (15).$$

Man ist geneigt, dieses numerische Problem mit einem Iterationsverfahren, etwa mit dem Newtonverfahren, lösen zu wollen

$$\vec{A}_{n+1} = \vec{A}_n - \vec{B}(\vec{A}) \left(\frac{\partial}{\partial \vec{A}} \vec{B}(\vec{A}) \right)^{-1}, \quad (16)$$

Dieses Verfahren aber eignet sich erst dann zur Iteration, falls der Vektor in dessen Attraktionsbereich liegt. In unserem Fall ist die erforderliche Genauigkeit 10 Stellen hinter dem Komma. Da die Gln. nichtlinear sind, reagiert die Lösung sehr empfindlich auf Variation schon einer Konstanten. Bei manueller Iteration (Schießverfahren) gelangt man unter großem Aufwand in den Konvergenzbereich des Newtonverfahrens.

Ein Ausweg bietet ein eigens für dieses Problem entwickelte Verfahren, dieses bezeichnen wir als Homotopieverfahren (Stoer, Bulirsch⁸). Wir nutzen für unser Verfahren die Tatsache, daß wir für die Lösung physikalische Parameter wie Temperatur, Slabdicke und Strom vorgeben. Wir interessieren uns ohnehin für Lösungen verschiedener Stromwerte I

$$\vec{B}(\vec{A}, I) = \vec{0}. \quad (17a).$$

Mit diesem gewählten Parameter ist es uns möglich, die Konstanten als Funktion vom Strom schrittweise zu generieren.

$$\vec{B}(\vec{A}, I + \Delta I) = \vec{0}, \quad (17b)$$

Für den Gleichgewichtsfall $I = 0 [\frac{Amp}{cm^2}]$

$$\vec{B}(\vec{A}, 0) = \vec{0}, \quad (17c)$$

ist die Lösung des Anfangswertproblems A_0 recht simpel; mit zunehmender Stromstärke läßt sich die Lösung anderer Anfangswertprobleme A_n bei kleiner Schrittfolge $I + \Delta I$; leicht gewinnen. Das Verfahren funktioniert nur unter der Voraussetzung, daß die Schritte hinreichend klein sind. Kombiniert haben wir dieses Homotopieverfahren mit einem quadratischen Extrapolationsverfahren, da sich eine quadratische Abhängigkeit der Startvektoren vom Strom erkennen ließ. Die Extrapolation ermöglicht es die Schrittweite zu vergrößern, sie unterstützt das Homotopieverfahren in Bezug auf Schnelligkeit und Rechenaufwand.

Das Homotopieverfahren besitzt gegenüber dem Schießverfahren nicht nur den Vorteil, daß der manuelle Aufwand minimiert wird, sondern auch den, daß es für alle Parameterwerte, für die die Gleichungen lösbar sind, den Untervektorraum der entsprechenden Startvektoren berechnet. Dieser Vorteil erweist sich als sehr nützlich. Beim herkömmlichen Schießverfahren gibt es nämlich keinen Hinweis auf Nichtlösbarkeit des Gleichungssystems. Weiterhin meinen wir, ein sehr effizientes Verfahren für das oben skizzierte numerische Problem gefunden zu haben. Die Nichtlösbarkeit unserer implementierten Gleichungen für Stromwerte um 13300 $[\frac{A}{cm^2}]$ (der variierte Parameter) zeigt sich durch Abbruch des Verfahrens.

Die Genauigkeit und Leistungsfähigkeit unseres Verfahrens ist gewährleistet. Wir waren daran interessiert, den Einfluß der Materialcharakteristik und die externe Wirkung von physikalischen Parametern auf das qualitative und quantitative Verhalten der relevanten Lösung zu studieren. Die Behebung des Abbruchs erfordert eine Analyse von numerischen Problemen; dies ist aus Zeitgründen nicht durchgeführt worden.

9. Höhere Hierarchieansatz

Für die Entwicklung der Verteilungsfunktion nach orthogonalen Hermitefunktionen ist es sinnvoll, deren Konvergenzverhalten zu untersuchen. Das asymptotische Verhalten der Hermiteschen Orthogonalfunktionen läßt sich in Abbildung (2) für positive und negative Abzissenwerte ablesen. Alle Funktionen streben für $v \rightarrow \pm\infty$ gegen Null. Mit steigendem Grad der Polynome oszillieren die Funktionen stärker, dies führt auch zu einer Zunahme von Knoten (einfache Nullstellen).

Da der Polynomanteil von He_n bei geraden n für $v \rightarrow \pm\infty$ gegen $+\infty$ und bei ungeraden n hingegen für $v \rightarrow \infty$ gegen $+\infty$ und für $-v \rightarrow -\infty$ strebt, liefern die Hermitefunktionen mit ungeraden Polynomen für $v \rightarrow -\infty$ negative Entwicklungsbeiträge. Daher ist die durch eine endliche Hermiteentwicklung approximierte Verteilungsfunktion nicht durchweg positiv, was mit der physikalischen Interpretation der Verteilungsfunktion nicht vereinbar ist. Für die Ermittlung der physikalisch relevanten Modellgrößen (Momente) wird über die Verteilungsfkt integriert, bei denen die negativen Entwicklungsbeiträge nicht von Belang sind. Die Approximation von beliebig oft differentierbaren Funktionen (d.h. auch Potenzreihen) birgt ein Problem, welches mit der Hermiteentwicklung gekoppelt ist. Wird eine Funktion (hier: die Verteilungsfkt) durch N -Gleichungen beschrieben, so oszilliert die approximierte Kurve um die wahre Funktion auf der negat. Seite und schneidet diese N -mal. Diese Oszillationen sind merklich und haben ihre Ursache in der Approximation, repräsentieren aber nicht die Physik. Die Approximation der Verteilungsfkt durch zwei Momente ist problematisch, da die negativen Entwicklungsbeiträge zu groß sind. Bei vier Momenten ist die Approximation schon wesentlich besser. Deutlich erkennbar ist dort (s.a.Kapitel 11 (s.dort Abb.11 im Vergleich zu Abb.13)) schon die ballistische Peakstruktur. Sie ist nicht mit den Konvergenzschwierigkeiten behaftet, da die ballistischen Geschwindigkeiten positiv sind. Dies liegt daran, daß die Reihe unsere Hermitefunktionen bei positiven Geschwindigkeiten konstruktiv konvergiert. Wählt man nun eine höhere Gleichungshierarchie, so läßt sich a priori ein 'besseres Abschneiden' der Reihenentwicklung der Verteilungsfunktion (nach orthogonalen Hermitepolynomen) vorhersagen. "Besseres Abschneiden" bedeutet hier, mehr Reihenglieder für die Reihenentwicklung zu berechnen, damit man eine numerisch genauere Verteilungsfunktion erhält. Bis-

her wurde die 4-te Gleichung mit der $R_{ijk\ell}$ -Definition (s. Appendix A) und bei Normalabschneidung näherungsweise gelöst (Bringer und Schön⁶). Wir haben uns in dieser Arbeit das Ziel gesetzt, eine noch höhere Gleichungshierarchie berechnen. Die Wahl der 6-ten Gleichungshierarchie ist ein Versuch, eine bessere Näherung der Verteilungsfunktion zu finden. Danach vergleichen wir alle Näherungen und entscheiden uns für eine Lösung, die die Physik am besten repräsentiert.

10. Anwendung der selbstkonsistenten Gleichungen für eine inhomogene Struktur

Für unser Problem betrachten wir vorerst eine eindimensionale Geometrie. Wir nehmen ein $d = 0.4 \mu m$ dickes, niederdotiertes Slab ($N_D = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$), umgeben von zwei hochdotierten Banks ($N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Baranger hat für diese Geometrie, d.h. Geschwindigkeitsverteilung in einer Richtung (Stromflußrichtung) und für die gleiche Probe bereits eine numerische Lösung mit seiner Methode erhalten. Wir nehmen seine Ergebnisse als Richtschnur, um einen Vergleich mit unserer Lösung anzustellen. Er vernachlässigt die Impurity- und Elektron-Elektron-Streuung $1/\tau_{imp} = 1/\tau_{el} = 0$. Eine spezielle Wahl der Stoßintegrale erlaubt ihm, die senkrechte Geschwindigkeitsabhängigkeit der Verteilungsfunktion zu entkoppeln, da er nur die Diagonalelemente des Stoßoperators verwendet und diese durch Relaxationszeiten nähert, hat er somit das Problem auf eine eindim. Geschwindigkeitsverteilungsfunktion reduziert.

Da wir später die Geschwindigkeitsverteilungsfkt im dreidim. Geschwindigkeitsraum mit unseren Momentengleichungen untersuchen möchten, liegt es nahe, unsere Gln (7) auf den eindimensionalen Elektronentransport zu reduzieren (s. Gl. (14)) und die Lösung mit der von Baranger zu vergleichen. Die Gln. (14a)–(14d) behandeln die Gleichungshierarchie 4. Ordnung der Momentenentwicklung, welche bereits von Bringer und Schön numerisch berechnet wurde. Sie haben das Gleichungssystem mit $\tau = 3k - 3N/4 + \tau[E(2q - 3J) - 2dq/dx]$ abgeschlossen.

In dieser Arbeit werden erstmals die ersten 6 Gln (Gl. (14a)–(14h)) der Hierarchie gelöst. Von diesem Ansatz versprechen wir uns eine bessere Näherung der Verteilungsfkt und folglich eine bessere Approximation der Momente. Die Darstellung der Momente ist von der numerischen Berechnung der Verteilungsfkt abhängig, die Dichte geben wir als Moment für die Xenostruktur vor.

Es wurden die Relaxationszeiten $\tau = \tau^{diag} = \tau^{ep} = \tau^{th} = 3 \cdot 10^{-13} \text{ [sec]}$ innerhalb des Slabs gewählt, welche einer Mobilität von $\mu_e = 7500 \text{ [cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \text{ sec}^{-1}]$ und $\tau = 10^{-13} \text{ [sec]}$ in den Banks entspricht. Die Temperatur beträgt $T = 300^\circ \text{ [K]}$, und um weitere Übereinstimmung mit Baranger zu erreichen, nehmen wir an, daß $N_D^+ = N_D$ entspricht. Hier muß man einräumen, daß unter realistischen Bedingungen beide Werte wesentlich differieren können.

11. Diskussion der Ergebnisse

In diesem Abschnitt sollen die numerisch berechneten Ergebnisse vorgestellt und verglichen werden. Die Ergebnisse liegen in Form von Graphiken vor, die unser Programm produziert hat. Als Diskussionsgrundlage nehmen wir Ergebnisse der ersten vier Gleichungen der Hierarchie mit der Definition des R -Momentes (s.a. Appendix A), gekennzeichnet mit (α) , und vergleichen sie mit den Normalabschnidungen der Gleichungshierarchie 2-H (β) , 4-H (γ) und 6-H (δ) .

11.1. ELEKTRONENDICHTE UND GEDRIFTETE ELEKTRONEN

Um den Einfluß des Elektronentransportes auf das Dichteprofil $N(x)$ der Elektronen über die Slablänge zu demonstrieren, haben wir für unterschiedlich stark aufgeprägte Stromwerte die Elektronendichte logarithmisch als Funktion vom Ort in Abbildung (3 (α)) aufgetragen. Zwischen Banks und Slab besteht eine große Differenz in der Ladungsträgerdichte. Wie leicht zu sehen ist, fällt die Elektronendichte im Slab nicht auf Null ab. Die geringe Asymmetrie bzgl. der Slabmitte wird durch die Ströme verursacht (siehe auch Abb. 1). Die Übergänge zwischen Bank und Slab weisen trotz logarithmischer Skala starke Dichtegradienten im Ort auf. Die Abweichung von der Symmetrie bei $I > 0[\frac{A}{cm^2}]$ hat über die Poissongl. (Gl. (2)) Einfluß auf das elektrische Feld und Potential im Slab. Bei den nun folgenden Vergleichen wollen wir die durchschnittliche Driftgeschwindigkeit der Elektronen anstatt der Elektronendichte als Funktion der Position diskutieren. Zwischen beiden Größen besteht folgende Relation :

$$N(x) = J/e \cdot v_D, \quad (18)$$

sodaß bei konstantem Strom die Driftgeschwindigkeit umgekehrt proportional zur Elektronendichte ist. Eine Kurve, die die Driftgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Ort darstellt, ist physikalisch interessanter, weil man die mittlere Driftgeschwindigkeit direkt ablesen und das Relaxationsverhalten besser studieren kann. Für den Fall sehr kleiner Ströme ist der 'Driftweg' genauso lang wie der 'Relaxationsweg', die Geschwindigkeitfunktion ist quasisymmetrisch (Abb.4 (γ)). Ansonsten ist die Geschwindigkeitfunktion direkt abhängig vom äußeren Feld und von der Gleichungshierarchie. Das äußere Feld wird bestimmt durch den Strom, den wir vorgeben (s.a. Kapitel 8). Mit zunehmender Stromstärke verschiebt sich das

Maximum der Driftgeschwindigkeit in das Slab hinein und der Betrag wird größer (Abb.5 (δ)). Physikalisch bedeutet diese Tatsache, daß der Driftprozess über einen größeren Bereich dominiert und die Nichtgleichgewichtslage stärker ausgeprägt ist. Alle Lösungen von ($\alpha - \delta$) zeigen absolut gleiches Verhalten bzgl. des Stromes, die Wirkung der verschiedenen Lösungen auf die Driftgeschwindigkeit läßt sich besser anhand der Verteilungsfunktionen diskutieren. Die zweite Kurve in der (Abb.5 (δ)) stellt die Ortsabhängigkeit der ballistischen Geschwindigkeit dar, die wir im Zusammenhang mit dem Potential diskutieren wollen.

11.2. POTENTIAL UND BALLISTISCHE ELEKTRONEN

Das elektrische Feld und Potential ohne angelegten Strom im Slab haben wir auf Seite 5ff. bereits diskutiert. Für den Fall eines äußeren aufgeprägten Feldes ist aus dem vorherigen Abschnitt bekannt, daß die Symmetrie der Elektronendichte gestört wird. Die Korrelation dieser beiden physikalischen Größen ist über die Poissongl. bekannt. Wir erwarten deshalb auch einen Einfluß auf das elektrische Feld im Slab. Eine graphische Darstellung des Potentials ist der des elektrischen Feldes vorzuziehen, da das Potential eine integrierte Größe ist, an der man Unterschiede besser erkennen kann. Sie berechnet sich aus der Integration des Feldes über den Ort

$$V(x) = \int E dx. \quad (19)$$

Alle Potentialkurven weisen die erwartete Asymmetrie auf (Abb. 6 ($\alpha + \delta$)). Das Potential ist charakteristisch, der angelegte Strom erniedrigt das Potentialmaximum der Barriere (s.a. Kapitel 3) und erhöht die Potentialdifferenz zwischen den Kontakten, was deutlich beim Austritt der Elektronen in das Bank zu erkennen ist. Höhere Stromwerte verstärken diese Eigenschaften des charakteristischen Potentials, d.h., die Potentialdifferenz wächst mit zunehmender Stromstärke; wie diese Abhängigkeit aussieht, wird im letzten Abschnitt dieses Kapitels untersucht.

Kommen wir nun zu der im vorherigen Abschnitt aufgeworfenen Frage, welchen Einfluß die Lösungen der verschiedenen Hierarchiegleichungen auf die Ergebnisse haben.

Der Vergleich zwischen den Lösungen der Hierarchiegleichungen bei Normalabschnidungen zeigt, daß mit höherer Hierarchie die charakteristischen Eigenschaften des Potentials wiederum (Abb.14 ($\alpha + \delta$) bzw. Abb. 6 ($\alpha + \delta$)) verstärkt

werden. Das bedeutet, mit höheren Hierarchielösungen nimmt die Potentialdifferenz zu. Inwieweit dieses Verhalten gegen einen festen Spannungswert konvergiert soll später diskutiert werden.

Welche Wirkung hat nun das charakteristische Potential auf den Elektronentransport? Ein Elektronenstrom mit einer Geschwindigkeitsbandbreite muß die Potentialbarriere überwinden. Nehmen wir an, daß diese Elektronen ballistisch sind, was für das betrachtete Material zutreffen kann. "Niederenergetische" Elektronen können die Barriere nicht passieren, sondern ändern auf dem Weg zum Potentialmaximum die Richtung, wie ein Ball, der an einer Wand reflektiert. Die "hochenergetischen" Elektronen aber werden, nachdem sie das Potentialmaximum überwunden haben — man nennt dies auch thermionische Emission — durch den Gewinn an kinetischer Energie beschleunigt. Mit ballistischen Elektronen bezeichnet man Elektronen, welche diese Beschleunigung erfahren und sich quasi wechselwirkungsfrei bewegen, wie Elektronen in einer Vakuumröhre. Die minimale ballistische Geschwindigkeit für Elektronen, die die Barriere passieren, errechnet sich aus der Energiebeziehung

$$\frac{m^* v_D^2}{2} + V(x) = V(x_{max}). \quad (16)$$

Ballistische Elektronen, das werden wir später sehen, stören die typische Maxwellform der Verteilungsfunktion. Der Elektronenstrom im Slab stellt ein System dar, das stark von der Gleichgewichtsverteilung abweicht. Einzelne Transporteffekte wie Beschleunigung und Rückstreuung der Elektronen lassen sich anhand der Verteilungsfunktion und der anderen Momente ablesen.

Die Kurven in (Abb. 7 ($\alpha + \delta$)) zeigen die ballistische Geschwindigkeit als Funktion vom Ort und als Funktion des aufgeprägten Stromes. Höhere Ströme verschieben das Minimum der Kurve in den vorderen Bereich des Slabs, dies hängt damit zusammen, daß sich das Potentialmaximum in die vordere Slabhälfte verschiebt und gleichzeitig an Potentialhöhe verliert. Für die ballistischen Elektronen bedeutet die Veränderung des Potentials eine Verschiebung und Erhöhung der minimalen Geschwindigkeit, somit wird der Anteil der ballistischen, beschleunigten Elektronen erhöht und der der rückstreuenden vermindert. Wir erwarten deshalb einen Unterschied in der zu berechnenden Verteilungsfunktion.

An dieser Stelle seien noch einige Erläuterungen zur Begriffsbildung des Terminus Xenostruktur angefügt. Das charakteristische Potential im Slab kann nur durch zwei andersdotierte Banks erzeugt werden. Die Elektronendichte im Slab wird bestimmt durch die benachbarten Banks, sie ist also fremdbestimmt. Der Terminus Xenostruktur soll sich von dem der Heterostruktur abgrenzen. Denn mit einer Heterostruktur bezeichnet man eine halbleitende Verbindung, welche nicht nur aus andersdotierten Komponenten, sondern auch aus mindestens zwei verschiedenen Materialien, z.B. AlGaAs-GaAs aufgebaut ist. Heterostrukturen weisen bei Übergängen (Junctions) charakteristische Bandverbiegungen auf, welche auch zu Potentialbarrieren führen, aber mit einer wesentlich kleineren Ausdehnung. Da diese Ausdehnung im Bereich einiger bis hundert Ångström liegt, leistet der Tunnelstrom neben der thermionischen Emission einen wesentlichen Beitrag zum Elektronentransport.

11.3. TEMPERATUR

Bisher wurden die Dichte, das Potential und die Drift- und ballistische Geschwindigkeit als Funktionen vom Ort diskutiert. Nun möchten wir zu einer weiteren physikalischen Größe kommen, welche wir durch ein höheres Moment berechnen können.

Die Strom- und die kinetische Energiedichte sind als Momente definiert

$$J(\vec{r}, t) = \int dv \cdot v_i f(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (6b)$$

$$K(\vec{r}, t) = \int dv \cdot v_i v_j f(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (6c)$$

Während der Strom bzw. seine Driftgeschwindigkeit und die Elektronendichte in einer recht einfachen Beziehung stehen:

$$J = e \cdot n(x) \cdot v_D, \quad (18)$$

wobei der Strom J konstant ist, gibt es für die kinetische Energie einen etwas aufwendigeren Ausdruck. Die kinetische Energie setzt sich zusammen aus der Elektronentemperatur T_{el} und aus einem Beitrag der Driftgeschwindigkeit

$$K = N \cdot \left(\frac{1}{2} m^* v_D^2 + \frac{3}{2} k_B T_{el} \right). \quad (21)$$

Für die Elektronentemperatur gilt :

$$k_B T_{el} = m^* \langle v - \langle \bar{v} \rangle \rangle^2, \quad (22)$$

mit $\langle v - \langle \bar{v} \rangle \rangle^2$ bezeichnen wir die mittl. quad. Abweichung. Mit der Beziehung für K läßt sich nun die Elektronentemperatur T_{el} bestimmen. Ein äußeres Feld E hat über den Driftterm der Boltzmann-Gleichung Einfluß auf die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen. Die Halbwertsbreite der Verteilung nimmt zu, dies entspricht nach Gl.(21) einer Temperaturerhöhung. Somit erklärt sich auch der Begriff *heiße Elektronen*. Unsere Struktur hat bereits ein elektrisches Feld, welches durch die Inhomogenität erzeugt wird (s.a. Kapitel 3) . Welchen Effekt hat nun diese Inhomogenität auf die Elektronentemperatur im Slab, wenn ein äußeres Feld angelegt wird ? Und wie geben die verschiedenen Lösungen den Temperaturverlauf im Slab wieder ?

Beginnen wir mit der zweiten Frage. Bei allen Lösungen treten die Elektronen mit der gleichen Temperatur $300^{\circ}[K]$ in das Slab ein, welche der Bulk- bzw. der Raumtemperatur entspricht (Abb. $8\alpha - \delta$). Für die β -Lösung zeichnet sich keine Temperaturänderung im Slab ab, dies ist auch leicht erklärt, diese Gleichungshierarchie wird mit $K_{ij} = \frac{kNk_B T \delta_{ij}}{2}$ bei konstanter Temperatur abgeschlossen. Hingegen zeigt schon die γ -Lösung eine Temperaturänderung. Weit über die erste Raumhälfte des Slabs ist die Temperatur niedriger als die Bulktemperatur, die Erwärmung der Elektronen ist sehr schwach ausgebildet. Die δ -Lösung liefert eine gleichstarke Temperaturabnahme wie -zunahme auch bzgl. der beiden Raumhälften. Die α - Lösung nähert den Temperaturverlauf schon wesentlich besser. Sie ist offensichtlich dem Entwicklungsproblem nicht in so starkem Maße unterworfen. Im ersten Bereich des Slabs nimmt die Elektronentemperatur relativ schwach ab und heizt sich, nachdem die Elektronen die Barriere überwunden haben, stark auf. Bevor die Elektronen in das Bank eintreten, fällt deren Temperatur auf die Bulktemperatur ab. Wie läßt sich der Temperaturverlauf in der Xenostruktur verstehen ? Wir meinen anhand des Potentials abschätzen zu können, wie der Temperaturverlauf im Slabs ungefähr aussieht. Im ersten Bereich muß die Elektronentemperatur leicht abfallen , da die Elektronen an kinetischer Energie verlieren, dies bedeutet, daß die Halbwertsbreite der Verteilung enger wird. Die darauffolgende ballistische Beschleunigung bewirkt, daß die Temperatur außerordentlich stark zunimmt. Bei höheren Strömen rechnen wir mit einem geringeren Abkühleffekt, da die Potentialbarriere dann kleiner wird (s.a. Abschnitt 11.2), die Aufheizung, bedingt durch die größere Potentialdifferenz, nimmt hingegen sehr stark zu. Dies wird zumindest beim Vergleich zwischen verschiedenen Stromwerten deutlich (s.a. die Temperaturverläufe für 10000 mit 20000 ($\frac{Amp}{cm^2}$) Abb.9 α). Die Temperaturabnahme zum Ende des Slabs deutet auf einen Dissipationseffekt an diesem Übergang hin, man kann den Temperaturabfall bzw. -übergang auch mit der Relaxation der Verteilungsfunktion in die Gleichgewichtsform erklären. Die beiden Temperaturverläufe der $\alpha - -$ und γ -Lösung (Abb 8) sind physikalisch nicht erklärbar, sie werden vielmehr verursacht durch die Entwicklung der Verteilungsfunktion nach orthogonalen Hermitefunktionen (s.a. Kapitel 5). Der Vergleich der 4-H und 6-H legt nahe, daß höhere Gleichungshierarchien den Temperaturverlauf besser wiedergeben, da die Verteilungsfunktion offensichtlich besser approximiert wird.

11.4. DIE VERTEILUNGSFUNKTION

Alle Momenten definieren eine gemeinsame, auf die Dichte normierte Verteilungsfunktion. Für unsere Arbeit haben wir auch eine solche Verteilungsfunktion als Funktion der Geschwindigkeit generiert, wie z.B. in Abb. 10 (α). Dort sind vier Verteilungsfunktionen für jeweils vier verschiedene Positionen im Slab geplotet. Alle Verteilungsfunktionen beschreiben Fälle, in denen das Elektronensystem schwach bis stark von der Gleichgewichtsverteilung abweicht.

Für die erste Position (I) besitzt die Verteilungsfunktion eine Form der Maxwellverteilung, die nur ein wenig zu positiven Geschwindigkeiten verschoben ist ($x = 0.16d$).

Bei der zweiten Position (II) $x = 0.48 d$ erkennt man deutlich eine schwächere Intensität des nun stärker verschobenen Verteilungspeak. Eine kleine Struktur zeigt sich bei negativen Geschwindigkeiten, welche die Symmetrie der Maxwellverteilung stört. Diese Struktur läßt auf eine Störung des Gleichgewichts durch einen zusätzlichen Effekt schließen.

Die Intensität des Peaks ist in Position (III) $x = 0.75 d$ nochmals vermindert. Die charakteristische Maxwellform der Verteilungsfunktion ist nicht mehr zu erkennen, vielmehr erinnert sie an den "Hut", die Zeichnung Nr. 1 in A. de Saint-Exupéry's *Der kleine Prinz*: zwei gleichgroße aber schwach ausgebildete Peaksätze machen diesen "Hut" aus.

Der letzte Plot (Position (IV)) hingegen zeigt wieder Ansätze einer Verteilungsfunktion, deren Hauptpeak eine allerdings leicht im negativen Geschwindigkeitsraum lokalisierte starke Intensität aufweist. Der Nebenpeak liegt sehr weit im positiven Geschwindigkeitsraum.

Wie lassen sich die Verteilungsfunktionen für das Nichtgleichgewicht erklären?

Die Verschiebung der ersten Verteilungsfunktion läßt sich durch die Wirkung des elektrischen Feldes auf einen geschwindigkeitsverteilten Elektronenstrom erklären. Das elektrische Feld geht in den Beschleunigungsterm der Boltzmann-Gl. ein. Zur Interpretation der nun folgenden Verteilungsfunktionen ziehen wir den Potentialverlauf im Slab heran (Abb. 7). Wenn nun der Elektronenstrom durch ein von außen angelegtes elektrisches Feld weiter zu höheren Geschwindigkeiten beschleunigt wird, muß er das Potential im Slab überwinden. Niederenergetische

Elektronen erfahren eine Impulsumkehrung, vergleichbar mit einem Ball, der an einem Hügel zurückrollt, da er nicht über genügend kinetische Energie verfügt, um die Potentialhöhe zu überwinden. Diese Impulsumkehrung verursacht unsere Struktur bei negativen Geschwindigkeiten, somit ließe sich dieser Nebenpeak erklären. Das Verhältnis zwischen diesem Peak und dem Hauptpeak, welcher die Driftelektronen repräsentiert, beträgt 1:6. Nun ist die Position der Verteilungsfunktion schon in der Mitte des Slabs, sodaß dieses Argument falsch wäre, zudem weiß man, daß unsere Entwicklung nach Hermitepolynomen für negative Geschwindigkeiten bei niedrigeren Gleichungshierarchien kritisch sein kann (s. Kapitel 9), dies erklärt eher den Grund, weshalb wir diese Struktur erkennen. Dennoch stellt sich hier die Frage, warum wir nicht eine Struktur schon weiter links beobachten, die durch die Reflexion der Elektronen an dem Potential erzeugt wird. Wir verschieben diese Fragestellung an das Ende des Kapitels.

Der dritte Plot in der Graphik, leicht zu erkennen an der Hutform, zeigt nicht die typische Maxwellverteilungsform. Es sind zwei leichte Peakansätze vorhanden, was auf einen starken Nichtgleichgewichtszustand deutet. Die relativ große Halbwertsbreite läßt auf eine erhöhte Elektronentemperatur schließen. Der zweite "Peakansatz" ist weit nach hohen positiven Geschwindigkeiten verschoben, er weist auf einen zweiten Beschleunigungseffekt hin. Mit Hilfe des charakteristischen Potentials läßt sich dies leicht erklären. Denn die Elektronen, welche die Barriere passiert haben, werden durch den Potentialabfall beschleunigt und erzeugen, da sie auch geschwindigkeitsverteilt sind, einen Peak, welcher hier eine gleichgroße Intensität besitzt. Den Peak nennt man auch ballistischen Elektronenpeak. Ein Zerfall dieses Peaks läßt sich bei der letzten Verteilungsfunktion beobachten. Sie zeigt deutlich das Bestreben, wieder in den Gleichgewichtszustand zurückzukehren. Diese Relaxation wird durch den Stoßterm der Boltzmann-Gleichung bewirkt. Er verhindert, daß die Drift und das Potential im Slab die Elektronen beliebig stark aufheizen. Die Relaxation in die Gleichgewichtsform bedeutet auch, daß die vom System aufgenommene Energie wieder abgegeben wird, d.h., das System ist dissipativ.

Weshalb die letzten beiden Verteilungsfunktionen einen Peak besitzen, der leicht im negat. Geschwindigkeitsraum lokalisiert ist, können wir nicht erklären. Der Effekt der thermionischen Elektronenemission kann durch die Wahl einer

höheren Elektronenmobilität μ_e hervorgehoben werden, das hätte zur Folge, daß der ballistische Peak der Verteilungsfkt stärker betont wird. Bei tieferen Temperaturen des Gitters $T_o \sim 77^\circ(K)$ könnte dieser Effekt nochmals verstärkt werden, da die thermische Breite abnimmt. Außerdem würde der Zerfall der Nichtgleichgewichtsverteilung beschleunigt, da einige Streuprozesse unterdrückt werden.

11.5. VERGLEICH DER VERSCHIEDENEN VERTEILUNGSFUNKTIONEN

(6-H,4-H,2-H)

Die Normalabschneidung der zweiten Gleichungshierarchie (Abb.11 (β)) zeigt Lösungen, bei denen die Verteilungsfunktionen "nur" örtlich verschoben sind. Die Verteilungsfunktionen sind je nach ihren Positionen im Slab im positiven Geschwindigkeitsraum lokalisiert. Bereits in der zweiten Position $x = 0.48 d$ ist die Verteilungsfunktion etwas gestaucht, die Stauchung ist in der danach folgenden Position stärker ausgeprägt. Die Halbwertsbreite der Geschwindigkeitsverteilung ist ein Maß für die Temperatur, in unserem Fall kühlen sich die Elektronen im ersten Bereich ab und heizen sich in der zweiten Raumhälfte stark auf. Zumindest zeigt dies der Plot, unser Konzept müßte zwar eine konstante Temperatur, d.h. keine Stauchung und Spreizung der Verteilung, liefern, wie dies die zeitlich gemittelte Driftdiffusionsgleichung vorhersagt, aber bei niedrigeren Hierarchien tritt der Fehler durch die Approximation der Verteilungsfkt stark ins Auge. Diese Approximation ist auch verantwortlich für den negativen Geschwindigkeitsschwanz. Auf dieses Problem haben wir bereits im Kapitel 9 hingewiesen. Die unterschiedlichen Halbwertsbreiten erklären sich durch die oft verwendete Normalabschneidung der 2er-H, die kinetische Energie wird dort mit der Definition $K_{ij} = N k_B T \delta_{ij}$ abgeschlossen. Der Driftterm (s.a Gl.21) wird bei dieser Abschließung vernachlässigt. Eine Berücksichtigung des Driftterms müßte konstante Halbwertsbreiten liefern. Die Verteilungsfunktion der letzten Position relaxiert wieder ins Gleichgewicht. Die 2-H und somit auch die Driftdiffusionsgl. repräsentieren nicht die ballistischen Elektronen. D.h., auch sie können weder die Rückstreuung noch die Beschleunigung der Elektronen durch das Potential berücksichtigen. Höhere Gleichungshierarchien hingegen leisten die Beschreibung von ballistischen Elektronen (s.a. 4-H Abb.12). Bei noch höheren Gleichungshierarchien erwartet man wegen der besseren Konvergenz auch deutlichere Strukturen in der Verteilungsfunktion.

In dieser Arbeit präsentieren wir zum ersten Mal die Lösung für die 6-er Gleichungshierarchie. Für den Vergleich wählen wir Verteilungsfunktionen mit gleichen Positionen im Slab. Nach wie vor beträgt die Stromstärke $I = 10000[\frac{A}{cm^2}]$ (z.B. Abb. 13 (δ)). Generell läßt sich sagen, daß keine großen Unterschiede zwischen den Verteilungsfunktionen beider Lösungen bestehen. Die kleine Struktur für die zweite Verteilungsfkt (durchgezogene Linie) fehlt bzw. ist sehr schwach ausgebildet. Der ballistische Peak der folgenden Verteilungsfkt ist auch nicht mehr so stark wie in der R_{ijkl} -Lösung. Dies erklärt sich aus der Tatsache, daß für die Lösung der 6-H eine niedrigere Potentialdifferenz produziert wird. Wir erinnern daran, daß die ballistische Geschwindigkeit mit der Potentialdifferenz steigt. Deshalb zeigt die letzte Verteilungsfkt einen schwächer ausgeprägten ballistischen Peak.

Kommen wir auf die eingangs aufgeworfene Frage, ob Elektronen an der Potentialbarriere reflektiert werden. Einen eindeutigen Hinweis auf einen Peak, der durch die Reflexion der niederenergetischen Elektronen an der Potentialbarriere verursacht wird, kann die Verteilungsfkt. der 6-H liefern. Die Abb.13 (δ) zeigt für die erste Position aber keine Struktur, die diesen vorhergesagten Effekt bestätigt. Da eine solche Struktur nur bei niedrigen Strömen zu beobachten ist, wir aber an Lösungen hoher Stromwerte interessiert sind, wollen wir nicht näher auf diese Frage eingehen. Die kleinen Strukturen sind bedingt durch die Entwicklung der Verteilungsfunktionen nach Hermitepolynome. Da die Verteilungsfunktion eine differenzierte Größe darstellt, die Momente erst durch Integration gewonnen werden, spielt dieses Problem keine wichtige Rolle. Dennoch bleibt die Frage offen, ob reflektierte Elektronen einen Peak, ähnlich wie die ballistischen Elektronen, erzeugen können.

Die Lösung der 6-er Gleichungshierarchie hat gegenüber allen anderen Lösungen beträchtliche Vorteile. Sie weist z.B. nicht die kleine Struktur in der Mitte des Slabs, wie die α -Lsg., auf. Mit Hilfe der δ -Lösung sieht man eindeutig das Wandern und die Intensitätsstärke der ballistischen Elektronen im Slab. Die Struktur des ballistischen Peaks gibt sie besser wieder als alle anderen Lösungen, deutlich kann man bei ihr die beiden überlagerten Verteilungen, die die gedrifteten und ballistischen Elektronen repräsentieren, erkennen. Die deutlichere Unterscheidung beider Verteilungen legt den Schluß nahe, daß man eventuell die Verteilungsfunktionen der gedrifteten von der der ballistischen Elektronen separieren darf. Dies

würde ein neues Konzept des Elektronentransportes in Xenostrukturen und Heterostrukturen bedeuten.

11.6. STROM-SPANNUNGS-CHARAKTERISTIK

Zu allgemeinen Vergleichen für die Elektronen in Xenostrukturen trägt man die Strom-Spannungscharakteristik auf. Dies ist zweckmäßig um die I-V-Charakteristik zu analysieren und sie mit experimentellen Messungen zu vergleichen. Mitunter zeigen diese Strom-Spannungscharakteristiken in Submicronstrukturen für den Widerstand leichte nichtlineare Strukturen. Diese nichtlineare Effekte werden nicht durch die Boltzmann-Gleichung verursacht — sie ist ja linearisiert — sondern durch die inhomogene Dotierung, die, wie wir gesehen haben, ein nichtlineares elektrisches Feld über die Probenlänge produziert. Für unsere Zwecke eignet sich die I-V-Charakteristik auch zum Konvergenzvergleich der Lösungen unterschiedlicher Gleichungshierarchie.

In Abb.14 sind alle berechneten I-V-Abhängigkeiten aufgetragen, Die oberste (gepunktete) Kurve repräsentiert das Widerstandsverhalten der Driftdiffusionsgleichung⁵. Das nichtlineare Verhalten ist noch nicht verstanden. Alle anderen Geraden zeigen lineare Abhängigkeiten, so auch bei der 4H-Lösung (durchgezogene Linie), deren Widerstand ist etwas geringer. Als Richtschnur nehmen wir die Widerstandsgerade (Strichpunktlinie) von Baranger. Die 6H-Lösung bzw. deren Widerstandsgerade (zweite durchgezogene Linie) konvergiert am besten gegen das Ergebnis von Baranger. Jedoch unterschätzen wir den Widerstand etwas. Das rein ohmsche Verhalten kann zweierlei bedeuten: entweder heben sich die Nichtlinearitäten auf, oder wir sind noch nicht in den interessanten Bereich (z. B. höherer Stromwerte) vorgestoßen. Wir erinnern daran, daß unser Programm bis jetzt noch nicht für beliebig hohe Stromwerte funktioniert.

Aus der Tabelle (1) läßt sich ersehen, daß die Lösung der Hierarchie mit steigender Ordnung gegen die von Baranger konvergiert. Die Genauigkeit der Lösung hängt von der Ordnung der Hierarchie ab. Die Frage, warum die Lösungen höherer Ordnung monoton konvergieren, können wir nicht beantworten. Eine vollständige Antwort müßte auch das Konvergenzverhalten ungerader Hierarchien diskutieren, diese können wir nur mühevoll mit unserem Programm produzieren.

Im Konvergenzvergleich schneiden Lösungen der 6-er H. wesentlich besser als

α -Lösung ab. Die α -Lsg eignet sich nur für den eindim. Transport, (s. Appendix A), deshalb verwenden wir für die künftige Arbeit die δ -Lösung, und wir werden sehen, daß sie auch notwendig ist für die Beschreibung des dreidim. Elektronentransportes. Bisher wurde bei allen Elektronentransportrechnungen nur die eindim. Bewegungsrichtung untersucht. Für den realistischen Elektronentransport erwartet man auch Störungen der transversalen Geschwindigkeitsverteilungen. Deren Einfluß auf die Momente soll Gegenstand des nun folgenden Kapitels sein.

12. Warum dreidimensionale Elektronentransportrechnungen ?

Diese skeptisch klingende Frage scheint nicht unberechtigt zu sein, denn der Elektronenstrom wird von außen angelegt und fließt in eine Richtung (z.B. x -Komponente). Die Wirkung der anderen Geschwindigkeitskomponenten auf den Elektronenstrom (Ankopplung der Querkomponenten) wurde bisher in keiner Transportrechnung studiert. Das allgemeine Interesse bezieht sich daher auf das Verständnis des realistischen Transportprozesses.

Mit der Monte-Carlo-Methode könnte man im Prinzip recht einfach den realistischen Elektronentransport simulieren, aber wie jede Methode besitzt sie einige Nachteile. Ein Nachteil besteht darin, daß man für die Monte-Carlo-Simulation viel Rechenzeit benötigt.

Eine funktionale Abhängigkeit von Inputparametern, wie z.B. die Winkelabhängigkeit und Streuwahrscheinlichkeit, die in die Übergangsrate des Stoßoperators eingehen, läßt sich mit ihr nur mühsam reproduzieren. Denn die Methode benötigt für die Berechnung von Trajektorien einen festgelegten Satz von Parameterwerten, deren genaue Anzahl unbekannt ist. Deshalb nimmt man den Stoßoperator als bekannt an. Aus quantenmechanischen Rechnungen läßt sich die funktionale Abhängigkeit einzelner Parameter gewinnen, indem man die Übergangswahrscheinlichkeit und folglich auch den Stoßoperator voll auswertet. Wir haben die Beschreibung des Streuprozesses auf zwei Parameter reduziert. Relaxationszeitrechnungen hingegen schätzen wiederum den Stoßoperator ab, meist ausgedrückt als energieabhängige Relaxationszeit. Dabei wird der Stoßoperator als diagonal angenommen, dies stellt eine grobe Näherung dar. Beim Vernachlässigen der Nichtdiagonalelemente tritt ein Informationsverlust auf. Für unser Studium der dreidimensionalen Streuung ist es unerläßlich, die Nichtdiagonalelemente zu berücksichtigen. Als einzigen Streuprozess betrachten wir die Elektron-Phonon-Streuung, die bei Raumtemperatur dominiert. Deshalb geben wir vorab eine Einführung in die Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

13. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Beim Transport der Elektronen im Festkörper stehen diese in Wechselwirkung mit dem Gitter. Mit höheren Temperaturen dominiert die Elektron-Phonon-Wechselwirkung, alle anderen Wechselwirkungen verlieren an Gewicht. Bekannt ist dies aus der Theorie der Supraleitung und des elektrischen Widerstandes⁹. In einem perfekten periodischen Potential, d.h., idealen Kristall, hat ein Blochelektron eine unendliche mittlere freie Weglänge, nicht so in realen Kristallen. Die Abweichungen des Gitters von einem Idealgitter bewirken elastische und inelastische Streuung der Elektronen. Somit ist die freie Weglänge im Leitungsband endlich. Man unterscheidet zwei Arten von Abweichungen vom Idealgitter. Erstens die statische Abweichung, die durch Inhomogenitäten des Kristalls, z.B. Störstellen, Strukturdefekten, und zweitens die dynamische Abweichung, die durch thermische Ionenschwingung um die Gleichgewichtslage verursacht werden. Nur die letzte soll Gegenstand unserer Untersuchung sein. Ein Modell, welches die Temperaturabhängigkeit des Widerstands durch Gitterschwingung beschreibt, legt die Abweichung von der Ruhelage des periodischen Potentials zugrunde. Mit dem periodischen Potential

$$U_{per}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} V(\vec{r} - \vec{R}), \quad (23)$$

gilt für das aperiodische Potential (taylorentwickelt) :

$$U_{aper}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} V[\vec{r} - \vec{R} - \vec{u}(\vec{R})] = U_{per}(\vec{r}) - \sum_{\vec{R}} \vec{u}(\vec{R}) \text{grad} V(\vec{r} - \vec{R}) + \dots \quad (24)$$

dabei stellt $U_{aper}(\vec{r})$ eine Approximation des aperiodischen Potentials dar.

Die Differenz beider Potentiale kann als Störung betrachtet werden, die auf die stationären Einelektronenzustände des Hamiltonoperators wirkt, welche Übergänge zwischen den Blochzuständen auslöst und zu einer Verminderung des Stromflusses, sprich Widerstand, führt. Diese durch Gitterschwingungen bewirkten Übergänge können als Prozesse betrachtet werden, in denen ein oder mehrere Phononen absorbiert oder emittiert werden.

Die Energie- und Impulsänderung des Elektrons durch Phononen stellt einen inelastischen Stoßprozeß dar

$$E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} = \pm \hbar \omega(\vec{k} - \vec{k}'), \quad (25a)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} + \vec{K}. \quad (25b)$$

Ein Elektron im Zustand \vec{k} wird in einen Zustand \vec{k}' gestreut. Dabei muß die Energieerhaltung durch den Phononenbeitrag $\hbar\omega(\vec{q})$ und die Quasiimpulserhaltung durch \vec{q} berücksichtigt werden. Das Minus- bzw. Pluszeichen steht für einen Absorptions- bzw. Emissionsprozess. Der Gittervektor \vec{K} berücksichtigt Umklappprozesse $\vec{K} \neq 0$, die wir vernachlässigen bei unseren Rechnungen, d.h. $\vec{K} = 0$.

Für unseren Stoßprozeß möchten wir die Streuwahrscheinlichkeit und Winkelabhängigkeit studieren, deshalb legen wir für unsere Rechnungen die Energieerhaltung zugrunde. Der \vec{k}' -Wellenvektor wird für einen vorgegebenen Wellenvektor \vec{k} -Wellenvektor und eine longitudinale Geschwindigkeit u_l wird als Funktion des Winkels numerisch berechnet

$$\vec{k}'^4 + \vec{k}^4 - 2\vec{k}^2\vec{k}'^2 - c\vec{k}^2 - c\vec{k}'^2 + 2c\vec{k} \cdot \vec{k} \cdot \cos\theta = 0, \quad (26)$$

mit $c = (\frac{m^*u_l}{\hbar})^2$ und $u_l = 5 \cdot 10^5 (\frac{cm}{sec})$, $m^* = 6.4 \cdot 10^{-27}(g)$. Die Streukugel für die akustische Elektron-Phonon-WW (Abb. 15) weicht gering von der Streukugel für elastische WW ab. Der Grund für die schwache Inelastizität liegt in dem Verhältnis zwischen der Elektronen- und der Phononenergie $E_{\vec{k}}, E_{\vec{k}'} \gg \hbar\omega(\vec{q})$. Die akustische Elektron-Phonon-WW bezeichnet man deshalb auch als quasielastischen Streuprozeß.

Fassen wir noch einmal zusammen:

In einem idealen Kristallgitter bleibt der Quasiimpuls eines Elektrons erhalten, da keine WW vorliegt. Die thermisch bedingte Ionenschwingungen jedoch sind Ursache für die Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterschwingungen bzw. für den Widerstand. Die Elektronen werden dabei inelastisch gestreut. Diese Streuung ändert einige Erhaltungsgrößen des Elektrons. Die funktionale Abhängigkeit von Parametern, die den Streuprozeß charakterisieren, haben wir durch Analyse des Streuprozesses auf zwei Größen reduziert. Die Störungsrechnung der Quantenmechanik erlaubt die Bestimmung der Übergangswahrscheinlichkeit $W(\vec{k}', \vec{k})$ für ein gegebenes Potential. Dies soll Aufgabe des folgenden Kapitels sein.

14. Die Übergangswahrscheinlichkeit

Ohne das Wechselwirkungspotential U_{aper} bewegen sich Elektronen und Phononen unabhängig voneinander. Für den periodischen Kristall gilt dann folgende Hamiltongleichung

$$H_{per}^{el}|\Psi_{\vec{k}}\rangle = E_{\vec{k}}^{el}|\Psi_{\vec{k}}\rangle, \quad (27, Ia)$$

Die Orthonormierung

$$\langle\Psi_{\vec{k}}|\Psi_{\vec{k}'}\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (27, Ib)$$

wird vorausgesetzt. Die Wellenfunktionen $\Psi_{\vec{k}}$ beschreiben die Blochelektronen, man nennt sie daher Blochfunktionen. Mit dem Index \vec{k} bezeichnen wir die Gesamtheit der Quantenzahlen, die die Zustände des ungestörten Systems charakterisieren. Die Wellenfunktionen $\Xi_{\vec{n}}$ beschreiben die Phononen

$$H_{per}^{ph}|\Xi_{\vec{n}}\rangle = E_{\vec{n}}^{ph}|\Xi_{\vec{n}}\rangle, \quad (27, IIa)$$

Die Orthonormierung

$$\langle\Xi_{\vec{n}}|\Xi_{\vec{n}'}\rangle = \delta_{\vec{n},\vec{n}'} \quad (27, IIb)$$

wird ebenfalls vorausgesetzt. Für das System mit dem Wechselwirkungspotential U_{aper} (s. Gl. 24) ergibt sich eine Änderung der obigen Hamiltongleichungen, wobei die Elektronen und Phononen gekoppelt sind.

$$(H_{per} + H_{aper})|\Phi_{\vec{k}}\rangle = E_{\vec{k}}^{ep}|\Phi_{\vec{k}}\rangle, \quad (28a)$$

Mit $\Phi_{\vec{k}}$ bezeichnen wird die unter Berücksichtigung der Wechselwirkungsenergie H_{aper} zu berechnende Wellenfunktionen. Die Orthonormierung

$$\langle\Phi_{\vec{k}}|\Phi_{\vec{k}'}\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (28b)$$

wird wiederum vorausgesetzt. Die Lösung der Gleichungen bzw. der Koeffizienten der Wellenfunktion führt zu einem Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit $W_{kk'}$, der auch als Goldene Regel bekannt ist.¹⁾ Die Übergangswahrscheinlichkeit geht in den Stoßoperator (Gl.1b) ein. Dort werden zwei Streuprozesse beschrieben:

$$W_{kk'}^{abs} = |\langle\vec{k}|U_{aper}|\vec{k}'\rangle|^2(N(\omega) \cdot \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}'))), \quad (29a)$$

1) siehe auch Sommerfeld, Bethe¹⁰: Elektronentheorie der Metalle

die Absorption die Vernichtung eines Phonons durch die ein Elektron vom Zustand k nach k' gestreut wird, und

$$W_{k'k}^{em} = (|\langle \vec{k} | U_{aper} | \vec{k}' \rangle|^2 (N(\omega) + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}'))), \quad (29b)$$

die Emission (Erzeugung) eines Phonons, bei der Energie auf das Phononensystem übertragen wird. Mit $N(\omega)$ bzw. $N(\omega) + 1$ wird die Phononenverteilung, d.h., die Beteiligung der Phononen am Streuprozess, berücksichtigt. Wir behandeln nur die Ein-Phonon-Näherung. Dies kommt dadurch zum Ausdruck, daß wir eine Störungsrechnung erster Ordnung durchführen und nur lineare Terme in den Verschiebungen berücksichtigen. Die Deltafunktion berücksichtigt die Energieerhaltung des inelastischen Stoßprozesses und das Bracket $\langle \vec{k} | H_{aper} | \vec{k}' \rangle$ sind die Matrixelemente des Operators bzgl. des Funktionensystems Φ_k . Die Übergangswahrscheinlichkeit beschreibt die Übergänge zwischen zwei Zuständen unterschiedlicher Energie, gewichtet mit der Boseverteilung der Phononen für den Absorptions- und den Emissionsprozeß.

Der Operator H_{aper} bewirkt die Energieänderung eines Elektrons bei Auslenkung eines Gitterelements aus der Gleichgewichtslage. Die Berechnung dieser Energie ist recht aufwendig, da die Atome eine endliche Größe aufweisen und sich bei der Verschiebung deformieren können. Diese Deformation zu bestimmen und ebenso die damit korrelierte Änderung des Kraftfeldes, ist eine typische Aufgabe aus der dynamischen Vielteilchentheorie. Einen anderen Lösungsweg kann man begehen, wenn man eine Näherung einführt, die auch für Elektron-Phonon-Streuung physikalisch sinnvoll ist. Bei dieser Streuung spielen die Phononen mit kleinen Quasiwellenvektoren die entscheidende Rolle. D.h., die Wellenlängen der beitragenden Phononen müssen etwa gleich denen der Elektronen sein, also groß gegen die Gitterkonstante. Der Operator H_{aper} ist ein Skalar. Er ist von Null verschieden, wenn die Gitteratome aus ihren Gleichgewichtslagen ausgelenkt sind. Er ist also eine Funktion des Verschiebungsvektors bzw. dessen Ableitung nach den Koordinaten

$$H_{aper} \cong H_{ak} = c_1 \operatorname{div} \vec{R}, \quad (30)$$

wobei c_1 eine Konstante ist. Sie läßt sich ermitteln, indem man das mechanische Problem der Änderung der Elektronenenergie bei einer räumlich glatten und peri-

odischen Deformation des Gitters löst. Den Operator H_{ak} nennt man auch in der Mechanik Deformationspotential.

Da wir hier lange akustische Wellen betrachten, liefern nur longitudinale Wellen bzw. Geschwindigkeiten einen Beitrag zur Energieänderung des Elektrons

$$|\langle \vec{k} | H_{aper} | \vec{k}' \rangle|^2 = c_2 \frac{\vec{q}^2}{\hbar \omega_q}, \quad (31)$$

mit c_2 als Konstante, die die Masse, Normierung und alle Materialparameter (Streulänge) umfaßt. Diese Konstante wird so angepaßt, daß wenn nur Diagonalelemente im Stoßoperator stehen, Übereinstimmung mit den eindim. Transportrechnungen erzielt wird. Dies ermöglicht uns später beide Rechnungen miteinander zu vergleichen.

15. Stoßintegral der Boltzmann-Gleichung

Die Eigenschaften des Stoßoperators sind durch diejenigen seines Integralkerns $W_{kk'}$ bestimmt. Für die Übergangswahrscheinlichkeit müssen folgende Bedingungen erfüllt sein.

- a) Der Stoßoperator muß positiv definiert sein

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} \geq 0, \quad (32a)$$

da $W_{\vec{k},\vec{k}'}$ die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeit hat.

- b) Für die Gleichgewichtsbedingung gilt die Symmetrie des detaillierten Gleichgewichts (s.a. Appendix B)

$$e^{-\beta\varepsilon'} W_{\vec{k}'\vec{k}} = W_{\vec{k}\vec{k}'} e^{-\beta\varepsilon} \quad (32b)$$

- c) Die Translationsinvarianz der WW ergibt die Erhaltung des Quasiimpulses beim Stoß.
- d) Beim Stoß bleibt die Energie erhalten.
- e) Wegen der Drehinvarianz des Stoßprozesses ist die Abhängigkeit der Übergangswahrscheinlichkeit von \vec{k}, \vec{k}' nur über Vektorinvarianten möglich, d.h., über $\vec{k}^2 = \vec{k}'^2$ mit dem Energiesatz und über $\vec{k} \cdot \vec{k}'$. Dies führt zu einem Streuwinkel

$$\theta = \arccos\left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \cdot \frac{\vec{k}'}{|\vec{k}'|}\right). \quad (32c)$$

Dabei hat man angenommen, daß q klein ist und die Umklappprozesse vernachlässigbar sind $\vec{K} = 0$. Die Übergangswahrscheinlichkeit $W_{k,k'}$ kann man unter Berücksichtigung aller Eigenschaften (a-e) in folgender Form ausdrücken

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = \tilde{W}(\vec{k}^2, \theta) \cdot \delta(\vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{q}) \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'} \pm \hbar\omega). \quad (32d)$$

16. Berechnung der Matrixelemente

Ausgehend vom Stoßoperator Gl. (13) möchten wir nun die Matrixelemente für die akustische Elektron-Phonon-WW berechnen. Der Stoßoperator I wird über $\int d\vec{v} \cdot \vec{v}_i$ ($i = 0, 1, \dots$) integriert zu

$$\int d\vec{v} \vec{v}_i I[f] = \int d\vec{v} \vec{v}_i \int d\vec{v}' (W(\vec{v}, \vec{v}') \cdot f(\vec{r}, \vec{v}) - W(\vec{v}', \vec{v}) \cdot f(\vec{r}, \vec{v}')), \quad (8)$$

bzw. den allgemeinen Ansatz

$$I[f] = (2\pi)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\vec{v}^2}{2}\right) \sum_{nn'} H e_n(\vec{v}) \sqrt{\frac{[n']!}{[n]!}} \langle \vec{n} | I | \vec{n}' \rangle f'_n \quad (13)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit $W_{k,k'}$ für die Absorption und die Emission lauten:

$$W_{kk'}^{abs} = |\langle \vec{k} | U_{aper} | \vec{k}' \rangle|^2 (N(\omega) \cdot \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}'))), \quad (29a)$$

$$W_{k'k}^{em} = (|\langle \vec{k} | U_{aper} | \vec{k}' \rangle|^2 (N(\omega) + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}'))), \quad (29b)$$

Der Stoßoperator Gl.(13), speziell die Übergangswahrscheinlichkeit, ist charakterisiert durch die Wellenvektoren \vec{k}, \vec{k}' und dem Winkel zwischen beiden Wellenvektoren, die Hermitefunktionen hingegen durch die Geschwindigkeiten \vec{v}, \vec{v}' , die wir nun anstatt der Wellenvektoren einheitlich verwenden wollen. Wir substituieren deshalb unter Verwendung der Energiebeziehung die Wellenvektoren durch die Geschwindigkeiten. Mit Hilfe von

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{k_B T}{2} = \frac{m^* v^2}{2} \quad v_{th} = \sqrt{\frac{k_B T}{m^*}}$$

substituieren wir $k \rightarrow v$. Um nun die Übergangswahrscheinlichkeit berechnen zu können, müssen wir die Deltafunktion loswerden, d.h. wir müssen die Nullstelle der Deltafunktion suchen. Dies ist nicht leicht, da wir die Dispersionsbeziehung Gl.(26) berücksichtigen müssen:

$$|q| = \sqrt{k'^2 + k^2 - 2kk' \cos\theta} \quad ; \quad \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$$

Durch die Substitution erhalten wir:

$$w(|q|) = \pm m^* v_{th} \sqrt{(v' - v)^2 + 4vv' \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

Das Vorzeichen + steht für Absorption und - für Emission. Für die jeweiligen Phononenverteilungen $N(\omega)$ Absorption und $N(\omega)$ Emission gilt:

$$N(\omega) + 1 = \frac{e^{\frac{(v'^2 - v^2)}{2}}}{\exp \frac{(v'^2 - v^2)}{2} - 1}$$

$$N(\omega) = \frac{1}{\exp \frac{(v'^2 - v^2)}{2} - 1}$$

Wir ziehen hier den größten Faktor $e^{-\frac{v^2}{2}}$ heraus.

$$\frac{e^{-\frac{v^2}{2}}}{\exp \frac{(v'^2 - v^2)}{2} - 1} = e^{\frac{(v'^2)}{2}} (1 + N(\omega)) \quad ; |v'| > |v|$$

$$\frac{e^{-\frac{v^2}{2}}}{\exp \frac{(v'^2 - v^2)}{2} - 1} = e^{\frac{(v^2)}{2}} (1 + N(\omega)) \quad ; |v'| > |v|$$

das detaillierte Gleichgewicht, welches die Symmetrie zwischen Emission- und Absorptionprozesse beschreibt :

$$\Gamma_{kk'} = e^{-\varepsilon\beta} W_{kk'} = e^{-\beta\varepsilon'} W_{k'k}. \quad (33)$$

nutzen wir, um die Übergangswahrscheinlichkeit durch einen allgemeinen Ausdruck zu ersetzen

$$\Gamma_{kk'} = |\langle \vec{k} | U_{aper} | \vec{k}' \rangle|^2 ((N(\omega) + 1)e^{-\frac{v^2}{2}} \cdot \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}'))), \quad (29a)$$

Funktionen mit der Eigenschaft, nur vom Betrag und vom Winkel abhängig zu sein, erlauben wegen der Rotationsinvarianz eine einfache Zerlegung nach Kugelflächenfunktionen¹¹

$$\Gamma_{kk'} = \sum_{lm} \tilde{\Gamma}_l Y_{lm}(\vec{r}_0) Y_{lm}^*(\vec{r}_0). \quad (34)$$

Die Legendrepolynome lassen sich in Hermitepolynome transformieren. Wie schon weiter oben erwähnt geht die Dispersionsbeziehung in das Argument der Deltafunktion ein.

$$\delta\left(m^* v_{th} \left(\frac{v'^2}{2} - \frac{v^2}{2}\right) - sg \cdot m^* v_{th} \sqrt{(v' + v)^2 - 4vv' \sin^2 \frac{\theta}{2}}\right)$$

außerdem haben wir eine Winkelabhängigkeit vorliegen. Substituieren wir $\sin \frac{\theta}{2} = \zeta$. Mit Hilfe von

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) = 4\delta(1 - \cos \theta)$$

können wir die Deltafunktion umformen. Die Entwicklung des Arguments um die Nullstelle ergibt

$$\frac{1}{|f'|} \delta(\zeta - \zeta_0) : \frac{1}{|f'|} = \frac{2vv'\zeta}{\sqrt{(v' - v)^2 - 2vv'\zeta^2}}$$

Somit erhalten wir eine Funktion, die wir im folgenden Gewichtsfunktion bezeichnen werden

$$\Gamma_l = \int 4\zeta d\zeta \frac{\sqrt{(v' - v)^2 - 2vv'\zeta^2}}{(4vv'\zeta_0)} \delta(\zeta - \zeta_0) P_l(2\zeta^2 - 1).$$

Daraus folgt

$$\Gamma_l = \frac{v'^2 - v^2}{2sg^{*2} vv'} P_l(2\zeta_0^2 - 1).$$

Einen Ausdruck für ζ gewinnen wir aus der Beziehung

$$(v'^2 - v^2)^2 = 4sg^{*2}(v^2 + v'^2 - vv'(2\zeta_0^2 - 1))$$

Unter Verwendung von Gl.(31) für die Matrixelemente des akustischen Elektronen-Phononen Operators erhalten wir eine Gewichtsfunktion. Mit $\tilde{\Gamma}_l$ bezeichnen wir die gemeinsame Gewichtsfunktion

$$\tilde{\Gamma}_l = \frac{e^{-\frac{v^2}{2}} (v'^2 - v^2)^2}{vv' (\exp \frac{(v'^2 - v^2)}{2} - 1)} P_l(\cos \theta). \quad (36)$$

jedes Matrixelementes.

Wir berechnen unsere Matrixelemente für die Elektron-Phonon WW, deren Streuprozess wir (s.a.o.) auf zwei Parameter, nämlich die Geschwindigkeit \vec{v}' und den Streuwinkel θ , reduziert haben, wobei \vec{v}' eine Funktion von θ ist (s.Gl.26). Durch die Transformation und Entwicklung des Stoßoperators nach Hermitefunktionen ist es uns nun möglich, jedes Matrixelement durch den folgenden allgemeinen Ausdruck

$$\frac{1}{N_i^2} \int d^3v \int d^3v' \cdot \tilde{\Gamma}_l(\vec{v}, \vec{v}') (P_i(P_j - P_j')) = (i, j), \quad (35)$$

zu ermitteln. Dabei stellen N_i^2 die Normierung und P_i die Polynomeanteile der entwickelten Verteilungsfkt f dar. Die Polynomanteile für die jeweiligen Matrixelemente lauten :

$$\begin{aligned} \langle 1, 1 \rangle &= \langle P_0 \frac{v^2}{3} \rangle - \langle P_1 \frac{vv'}{3} \rangle \\ \langle 2, 2 \rangle &= \langle P_0 (\frac{v^4}{5} - \frac{2v^2}{3} + 1) \rangle - \langle P_0 (\frac{v^2}{3} - 1) (\frac{v^2}{3} - 1) \rangle - \langle P_2 \frac{4v^2 v'^2}{45} \rangle \\ \langle 3, 1 \rangle &= \langle P_0 (\frac{v^2}{5} - 1) \rangle - \langle P_1 vv' (\frac{v^2}{5} - 1) \rangle \\ \langle 4, 2 \rangle &= \langle P_0 (\frac{v^4}{15} - \frac{2v^2}{3} + 1) \rangle - \langle P_0 (\frac{v^2}{3} - 1) (\frac{v^2}{3} - 1) \rangle + \langle P_2 \frac{2v^2 v'^2}{45} \rangle \\ \langle 4, 4 \rangle &= \langle 2, 2 \rangle \\ \langle 5, 1 \rangle &= \langle P_0 v^2 (\frac{v^2}{5} - 1) \rangle - \langle P_1 \frac{vv'}{3} (\frac{v^2}{5} - 1) \rangle \end{aligned}$$

Die Gewichtsfunktion multiplizieren wir mit den Polynomanteilen P_i , die wir durch Transformation der Legendrepolynome in Hermitepolynome separat berechnet haben. Den Kern des Integrals ist eine Funktion von zwei Variablen \vec{v} , \vec{v}' . Die Integration über \vec{v} und \vec{v}' liefert für jeden Polynomanteil einen Wert für das jeweilige Matrixelement. Die Auswertung der Gewichtsfunktion liefert schon eine Aussage über die Relevanz der Querkomponenten. Für die akustische Elektronen-Phononen-WW zeigt sich, daß die Beiträge der Querkomponenten klein, wegen der quasielastischen Streuung, aber dennoch nicht vernachlässigbar sind. Für die Materialwerte u_l und m^* (s. Kapitel 16) und die Streulänge c_2 (s. Kapitel 16 Ende) haben wir die Matrixelemente in Tabelle 2 errechnet. Die Matrix ist auf das (1,1) Element skaliert, deshalb ist dieses Element gleich Eins. Die Diagonalelemente sind vom Betrag größer als die Nichtdiagonalelemente. Mit unserem Programm können wir nur Lösungen bis $I = 4500 (\frac{Amp}{cm^2})$ erzeugen, da sich Lösungsschwierigkeiten im Bulkverhalten zeigen. Sie führt zu einer Sättigung in der Strom-Feld-Abhängigkeit, die sonst linear ist. die Ursache liegt im Abschneideverfahren, speziell für die 6-te Gleichungshierarchie, d.h., die Sättigung hat keine physikalische Bedeutung, sondern ist ein Artefakt der gewählten Gleichungshierarchie. Bei höheren Hierarchien erwarten wir keine Sättigung.

17. Diskussion der Ergebnisse

Zum Vergleich der dreidimensionalen Transportrechnungen nehmen wir die Ergebnisse der eindimensionalen Transportrechnungen zur Hand (6-H). Für den realistischen Elektronentransport haben wir die x -Komponente der Geschwindigkeitsverteilung ausgedrückt, weil sich diese Komponente gut zum optischen Vergleich mit der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion der eindimensionalen Transportrechnung eignet. Alle Momente und Verteilungsfunktionen beziehen sich auf den Stromwert $I = 4000(\frac{\text{Amp}}{\text{cm}^2})$

17.1. POTENTIAL UND ELEKTRISCHES FELD

Das Potential eignet sich zu Vergleichszwecken besser als das elektrische Feld, da es eine integrierte Größe ist (s.a. Kapitel 11.2). Das Potential hat nicht nur für beide Geschwindigkeitsverteilungen die gleiche charakteristische Form einer Xenostruktur, sondern auch den gleichen Betrag, dies wird durch den Plot (Abb.16)(durchgezogene Linie) bestätigt. Demnach erwarten wir auch keine quantitativen Unterschiede für den ballistischen Peak der Verteilungsfunktion. Zum Vergleich haben wir noch das Potential der 1-dim. 6-H-Lösung (gestrichelte Linie) aufgetragen, mit $V = 32(mV)$ ist ihre Potentialdifferenz um $V = 4(mV)$ größer als dreidim. Rechnung. Die dreidim. Rechnungen zeigen trotz 6-H ein Konvergenzverhalten, welches wir von der 4-H her kennen. Zum Ende dieses Kapitels werden wir auf diese Tatsache genauer eingehen.

17.2. DRIFTGESCHWINDIGKEIT

Die Driftgeschwindigkeit ist bei konstant angelegtem Strom umgekehrt proportional zur Dichte (s.a.Kapitel 11.1). Wir betrachten die mittlere Driftgeschwindigkeit der Elektronen über die Slabdicke. Die Abbildung zeigt das erwartete Verhalten für den Wert des angelegten Stromes (Abb.17). Die Elektronen werden beschleunigt, und das Geschwindigkeitsmaximum ist leicht in der rechten Hälfte des Slabs lokalisiert, dies deutet auf einen geringeren Driftweg und einen längeren Relaxationsweg, im Vergleich zu höheren Stromwerten (Abb.6). Das Minimum der ballistischen Geschwindigkeit ist deutlich auf der linken Skala der Slabbreite. Aber dennoch ist es nahe der Slabhälfte lokalisiert, dies weist auf einen kleinen ballistischen Effekt in der Xenostruktur hin (s.a.Kapitel 11.2).

17.3. TEMPERATUR DES REALISTISCHEN ELEKTRONENTRANSPORTES

Der Temperaturverlauf in x -Richtung (durchgezogene Linie) wird durch das Modell nicht besonders gut wiedergegeben (Abb. 18). Beim Überwinden der Barriere kühlen sich die Elektronen stark ab, und die Aufheizung der Elektronen ist viel zu schwach. Dies widerspricht schon allein der Tatsache, daß der Bereich, in dem die Elektronen ballistisch beschleunigt werden, zweimal so breit ist wie der, in dem die Elektronen die Barriere überwinden müssen.

Die Änderung der Elektronentemperatur transversal zur Transportrichtung kann man in Abb.19 ablesen. Der Temperaturverlauf ist in Richtung des Elektronenstromes, also längs der Probe, aufgetragen. In den transversalen Richtungen ist die Elektronentemperatur homogen, da in diesen Richtungen kein Elektronenstrom fließt. Erstaunlich gut ist die Relation zwischen Abkühlung und Aufheizen der Elektronen wiedergegeben. Im ersten Drittel der Probe kühlen sich die Elektronen relativ schwach ab und heizen sich im restlichen Raumbereich sehr stark auf, so wie wir es vom Potentialverlauf her erwarten (s.a.Kapitel 11.2). Der Potentialverlauf und das elektrische Feld nehmen Einfluß auf die mittlere quadratische Abweichung der Geschwindigkeitsfunktion (s.a. Diskussion Kapitel 11.3). Das Maximum zum Ende des Slabs deutet auf eine starke Aufheizung, die durch die ballistischen Elektronen verursacht wird. Zum Slabende hin fällt die Elektronentemperatur wieder auf die Bulktemperatur ab, dies läßt sich mit dem Zerfall des ballistischen Peaks bzw. Relaxation der Verteilungsfunktion in die Gleichgewichtsform erklären. Die durch die Drift gewonnene Energie der Elektronen wird zum Übergang wieder abgegeben, die Energie wird dissipiert. Die Übergänge zu den Banks sind nicht gut ausgebildet, dies wird bedingt durch numerische Schwierigkeiten, die nur die Übergänge nicht exakt repräsentieren. Der Vergleich des Temperaturverlaufes zwischen den Rechnungen (Abb.18) in Strom-(durchgezogene Linie) und in transversaler Richtung (gestrichelte Linie) zeigt merkliche Abweichungen. Zuerst stellen wir fest, daß sich die Temperaturminima und -maxima nicht zur gleichen Slabposition ausbilden. Dies spricht dafür, daß die Temperaturverläufe im Ort verschoben sind, aber die Schwierigkeiten, die die 4-H aufwirft (s.a.oben) schränkt dieses Argument ein. Von dem Vergleich der Temperaturminima sehen wir deshalb in der Diskussion ab. Der Betrag des Temperaturmaximums in transversaler Richtung $T_{max} = 306^\circ(K)$ bezogen auf die Abweichung von der Bulktemperatur

$T_{Bulk} = 300^\circ(K)$, ist etwa ein Drittel von dem in Stromrichtung $T_{max} = 317^\circ(K)$. Dies beweist, daß die Verteilungsfunktion in den transversalen Richtungen ähnlich wie in der Transportrichtung von der Gleichgewichtsform abweicht. Wir haben damit auch gezeigt, daß die Nichtdiagonalelemente des Stoßoperators Information über den Elektronentransport liefert.

17.4. VERTEILUNGSFUNKTION

Zu Vergleichszwecken haben wir die gleichen Positionen der Verteilungsfunktionen in Transportrichtung wie in Kapitel 11.4 gewählt. Beide Transportrechnungen weisen keine signifikanten Unterschiede auf (Abb. 20,21). Da die Verteilungsfunktion eine differentielle Größe darstellt eignet sie sich für eine detaillierte Interpretation schlechter als die integrierte Größen, also die Momente s. Gl. 6a-d. Eventuelle Unterschiede sind nur mit einer unterschiedlichen Konvergenz des dreidimensionalen Elektronentransportes zu erklären. Die Verteilungsfunktion des realistischen Transportes entspricht nämlich dem Konvergenzverhalten der 4-H anstatt einer erwarteten 6-H, da zwei Momente für die dreidimensionale Berechnung hinzukommen. Durchaus erwähnenswert ist die ballistische Struktur, welche die Maxwellsche Form der Verteilung (Pos. I) stört, die aber für niedrigere Stromwerte etwas mühsam zu erkennen ist. Das Wandern des ballistischen Peaks läßt sich bei diesen Verteilungsfunktionen nicht so gut beobachten, dies gilt ebenfalls für die Intensität des Peaks.

17.5. DIE STROMSPANNUNGSCHARAKTERISTIK

Durch die zusätzlichen Matrixelemente des Stoßoperators erwartet man eine Widerstandsgerade, die sich von der der eindim. Transportrechnung unterscheidet. Da zwischen den Potentialen beider Transportgeometrien keine Betragsunterschiede bestehen, ist auch kein Unterschied zwischen den Widerstandsgeraden zu beobachten (Abb. 22). Unser Verfahren produziert für den realistischen Elektronenfluß ein Konvergenzverhalten ähnlich dem, welches wir von der 4-H für die Normalabschneidung her kennen. Da wir für die Beschreibung des dreidimensionalen Elektronentransportes zwei zusätzliche Momente benötigen, läßt sich dies auch erklären. Für das gleiche Konvergenzverhalten folgen deshalb auch gleiche Widerstandsgeraden.

Wir erwarteten, daß die Widerstandsgerade des dreidim. Transportes sich merklich zu höheren Potentialwerte neigt. Dies wäre ein deutliches Indiz dafür, daß die Geschwindigkeitsquerkomponenten auf den eindimensionalen Stromfluß Einfluß haben. Für Stromwerte oberhalb $I=4500(\frac{Amp}{cm^2})$ kann die Widerstandsgerade für den dreidim. Elektronentransport durchaus von der der 4-H abweichen.

18. Abschließende Diskussion

Im ersten Teil der Arbeit waren wir bestrebt, durch die Wahl einer höheren Gleichungshierarchie eine bessere Lösung für die Momente zu erhalten. Das Hauptproblem bestand darin, das Gleichungssystem für eine höhere Gleichungshierarchie zu lösen. Für sechs Gleichungen ist diese Aufgabe mit den herkömmlichen Verfahren, z.B. Schießverfahren, sehr aufwendig, nahezu nicht durchführbar. Eine Analyse der mit dem Schießverfahren gefundenen Startvektoren legte nahe, daß die Startvektoren abhängig sind von dem von außen vorgegebenen physikalischen Stromwert. Ein Nullstellensuchverfahren, daß diese Abhängigkeit ausnutzt, und daß unsere Nullstellensuche ermöglicht, nennt sich Homotopieverfahren. Mit diesem Verfahren ist es uns gelungen, die 6-te Gleichungshierarchie zu lösen. Die Berechnung der Momente und der Verteilungsfunktion zeigt schon eine bessere Approximation, als die der niedrigeren Hierarchien. Der Vergleich der Potentialdifferenz unterstreicht diese Aussage. Lediglich der Temperaturverlauf der Elektronen im Slab ist unbefriedigend wiedergegeben; die Abkühlung ist zu stark und die Aufheizung zu schwach repräsentiert. Gegenüber den niedrigeren Hierarchien erweist sich der Temperaturverlauf der 6-H als brauchbarer, die Tendenz zum realistischen Temperaturverlauf ist zumindest erkennbar. Erst mit noch höheren Gleichungshierarchien bekommt man die erwünschte "Approximationsgüte". Aber der technische Aufwand, um diese Lösungen zu realisieren, steigt immens, da $N/2$ miteinander gekoppelte Startwerte bestimmt werden müssen.

Da weder das Konzept von Baranger noch unser Konzept Verteilungsfunktionen erzeugen, die zufriedenstellend sind, stellt sich die Frage, ob es nicht ein anderes, zuverlässigeres Konzept gibt. Die Analyse der Lösungen besagt, daß die Verteilungsfunktionen von zwei Geschwindigkeitsfunktionen (Driftgeschwindigkeit und ballistische Geschwindigkeit) bestimmt werden. Man könnte versuchen zwei Verteilungsfunktionen, separat, allein aus der Kenntnis der beiden Geschwindigkeitsfunktionen zu berechnen, um sie dann zu einer gemeinsamen Verteilungsfunktion zusammenzufassen. So wäre es eventuell möglich, eine Pseudoverteilungsfunktion zu generieren, welche unbehftet von der Approximation die Verteilungsfunktion exakt repräsentiert. Es sei daran erinnert, daß die Verteilungsfunktion keine direkt meßbare Größe ist, sondern sie liegt als Hilfsfunktion allen Momenten zu-

grunde, sodaß dieser Ansatz eine sinnvolle Alternative darstellt.

Im ersten Teil der Arbeit haben wir die 6-er Hierarchie erstmals gelöst, die Lösung zeigt deutlich die Vorteile höherer Hierarchien. Das Homotopieverfahren hat uns die Lösung des Gleichungssystems wesentlich erleichtert. Für die dreidim. Transportrechnungen muß auch ein Startvektor wie im eindim. Transport bestimmt werden, die Verwendung des Homotopieverfahrens ist für die Lösung des Gleichungssystems deshalb unentbehrlich. Für die dreidim. Transportrechnungen werden zwei Momente mehr berechnet, die das Konvergenzverhalten der Gesamtlösung erniedrigen. Für unser Konzept des dreidim. Transportes wählen wir als Wechselwirkungspotential die akustische Elektron-Phonon-WW. Die Elektron-Impurity-WW haben wir von vornherein vernachlässigt, da sie nur bei niedrigen Temperaturen dominiert und da mit steigender Elektronenenergie der Impurity-Effekt wegen der coulombartigen Natur der WW schwächer wird. Hingegen erwarteten wir von einer quasielastischen WW genau dieses Verhalten nicht. Unser Konzept des dreidim. Transportes ist physikalisch korrekt, doch haben sich bei der Berechnung einige Schwierigkeiten ergeben, die eine uneingeschränkte Anwendung noch nicht zulassen. So ist der maximal zu realisierende Stromwert noch sehr niedrig ($I < 4500(\text{A}/\text{cm}^2)$). Für niedrige Stromwerte zeigt die akustische Elektron-Phonon-WW keine Abweichung zu eindim. Transportrechnungen, bzgl. des Potentials und der Verteilungsfunktion. Dies ist auf die quasielastische WW zurückzuführen. Dennoch haben wir für die Elektronentemperatur transversal zum Stromfluß ein interessantes Ergebnis erhalten. Erstens weicht diese Temperatur bis zu 60% von der Elektronentemperatur in Transportrichtung, bezogen auf den maximalen und minimalen Wert, ab, was sehr beachtlich ist, und unsere Vermutung bestätigt. Und zweitens repräsentiert sie den allgemeinen Temperaturverlauf, den wir durch Überlegungen für die Xenostruktur erwarten. Wir vermuten, daß mit höheren Stromwerten die akustische Elektron-Phonon-WW auch keine Abweichungen des Potentials erzeugt, zumindest legt unsere I-V-Kennlinie des dreidim. Transportes dies nahe. Allerdings können wir über die Fortsetzung der Kennlinie noch keine Aussage machen. Um dennoch Abweichungen für niedrige Stromwerte zu erhalten, ist die Wahl einer starken inelast. WW ($\hbar\omega \propto k_B T$), wie z.B. optische Elektron-Phonon-WW (für polare Halbleiter wie GaAs) erforderlich.

Auch wenn unser Konzept in einigen Punkten noch nicht voll ausgereift ist,

erlaubt es dennoch, die transversalen Verteilungsfunktionen des Elektronenstromes zu studieren, und ermöglicht es, den Widerstandsbeitrag einzelner Streuprozesse zu analysieren. Dieser Weg zur Analyse erwies sich als sehr schwierig, und ergab einige neue Ergebnisse, wie z.B. den Temperaturverlauf der Elektronen quer zur Transportrichtung. Dies stellt einen weiteren Beitrag zum interessanten und nicht abgeschlossenen Thema der Transporttheorie dar.

Anhang A.

Definition des abschließenden Momentes R_{ijkl}

(eingeschränktes Variationsverfahren)

Wir gehen von der orthogonalen Entwicklung der Verteilungsfunktion aus:

$$f^{(N)}(x, v) = \sum_{n=0}^N f_n(x) \cdot H e_n(v),$$

die f_n 's haben die Bedeutung von Momente. Für die vollständige Boltzmann-gl. (Integrodifferentialgl.) führen wir folgende Bezeichnung ein:

$$(Df^{(N)} - If^{(N)}) = 0, \quad (A1),$$

dabei ist D der Differential- und I der Integraloperator. Die Idee dieses Variationsverfahren ist nun die Boltzmann-gl. zu minimieren.

$$\|Df^{(N)} - If^{(N)}\|^2 < \epsilon \quad (A2)$$

D.h. die Norm soll möglichst klein sein, $\epsilon \rightarrow 0$. Für die Integration über dv und dx erhalten wir folgenden Ausdruck

$$\int dx dv (Df^{(N)} - If^{(N)})^2 \quad (A3)$$

Das Quadrat der $f^{(N)}$'s müßte eine Doppelsumme liefern, da aber die Hermitepolynome orthogonal sind fällt eine Summe heraus.

Die Momente sind analog zu Gl.(6) definiert. Das dritte Moment lautet dann $q = \int dv \cdot H e_3(v) \cdot f(v)$, wir verwenden hier kleine Buchstaben. Integrieren wir nun Gl.(A3) bis $N=4$ aus.

$$\begin{aligned} & \int dx \cdot (j'^2 + -(n' + 2t') + E n - \sum_{n'} I_1^{n'} f_{n'})^2 \\ & + 2(-(j' + 3q') + E j - \sum_{n'} I_2^{n'} f_{n'})^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +6(-t' + 4r') + Et - \sum_{n'} I_3^{n'} f_{n'}^2 \\
& +24(-q' + Eq - \sum_{n'} I_4^{n'} f_{n'}^2) \\
& +120(-r' + Er - \sum_{n'} I_5^{n'} f_{n'}^2) \tag{A4}
\end{aligned}$$

Um die Selbstkonsistenz zu berücksichtigen, müssen wir noch die Poissongl. hinzunehmen

$$E' = n - n_D. \tag{A5}$$

Somit haben wir sieben Gleichungen mit sechs Unbekannten. D.h. das Gleichungssystem ist überbestimmt. Wir verwenden nun ein eingeschränktes Variationsverfahren, und setzen in den ersten fünf Gleichungen alle Variablen konstant. Die beiden letzten Gleichungen werden so minimiert, daß die Summe möglichst klein ist, und r als freie Variable variiert werden kann. Der (diagonale) Stoßoperator hat folgende Matrixelemente, die alle abhängig sind von den einzelnen Momenten. $\langle 1, 1 \rangle = \Gamma_1 n$, $\langle 2, 2 \rangle = \Gamma_2 j$, $\langle 3, 3 \rangle = \Gamma_3 k$, $\langle 4, 4 \rangle = \Gamma_4 q$. Die Γ 's haben die Bedeutung von Koeffizienten. Wenn wir nun

$$(q' - Eq) = -I_4(f) \sim -\Gamma_4 r \tag{A6}$$

ableiten und $r' \rightarrow (-t - I_3(f) + Et)$ substituieren, so erhalten wir folgende Beziehung

$$\frac{4}{\Gamma_4}(-q' + Eq)' = (t' - I_3(f) + Et), \tag{A7}$$

die nach t' aufgelöst

$$t' = Et - \frac{I_3(f)}{1 + vip} - \frac{vip}{1 + vip} \cdot \frac{1}{\Gamma_2}(E_2 j + (3q - j)E') \tag{A8}$$

ergibt. Mit $vip = \frac{4\Gamma_2}{3\Gamma_4}$ haben wir einen Variationsparameter mit dem wir die Gleichungen minimalisieren können. Es ist nicht nötig einen Ausdruck explizit für r zu finden, da t' sozusagen ein renormalisierter Ausdruck ist, der im Gleichungssystem eingesetzt wird, und die Variation genausogut erfüllt. Den Ausdruck für t' ziehen wir dem für r vor, da die Gleichungsstruktur in dem Programm schon einmal verwendet wurde. Möchte man nun doch einen analytischen Ausdruck für R_{ijkl}

berechnen, so setzt man t' in Gl.(A6) ein. Verwendet man nun die Definition der Momente wie in Gl.(6), deshalb auch große Buchstaben für die Momente anstatt der kleinen (s.o.), so erhält man für die 4-er Hierarchie das folgende abschließende Moment:

$$R = 3K - 3N/4 + \tau[E(2Q - 3J) - 2dQ/dx]. \quad (A9)$$

in τ geht der Variationsparameter vip ein. Dieses abschließende Moment erlaubt nur die Berechnung des eindimensionalen Elektronentransportes. Der Normalabschluß der 4-er Hierarchie erhalten wir, wenn die eckige Klammer gleich Null gesetzt wird. Eine Alternative zu dem Gleichungsabschluß der 4-er Hierarchie mit Variationsverfahren ist die Wahl einer höheren Gleichungshierarchie bei Normalabschluß, dies würde auch den dreidim. Elektronentransportrechnungen möglich machen.

Anhang B.

Im thermodynamischen Gleichgewicht heben sich der Translations- und Beschleunigungsterm der Boltzmann-Gl. auf. Das bedeutet, daß sich Diffusions- und Driftstromdichte kompensieren. Die Gl. (1b) erhält somit die Form:

$$I_{coll} = 0$$

Daraus folgt zwischen Emission und Absorption eine Relation. Wir behandeln in unserem Fall nur die Ein-Phonon-Näherung, somit gilt im Gleichgewichtsfall $W_{k',k}^{em} = W_{k,k'}^{abs}$. Aus dem Ausdruck für die Absorption

$$W_{kk'}^{abs} = |\langle \vec{k} | U_{aper} | \vec{k}' \rangle|^2 (N(\omega) \cdot \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}')))$$

und aus dem für die Emission

$$W_{k'k}^{em} = (|\langle \vec{k} | U_{aper} | \vec{k}' \rangle|^2 (N(\omega) + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}')))$$

erhält man folgende Beziehung,

$$\frac{W_{k,k'}^{abs}}{W_{k',k}^{em}} = \exp\left(-\frac{(E' - E)}{k_B T}\right)$$

die man auch als detailliertes Gleichgewicht bezeichnet. Es besagt, daß Streuprozesse mit einer Erhöhung der Energie weniger wahrscheinlich sind als solche, die zu einer Verringerung der Energie führen. Für elast. Streuung ändert sich die Teilchenenergie nicht. Das bedeutet $W_{kk'} = W_{k'k}$.

Literatur

- 1) The Monte-Carlo Method for the solution of charge transport on semiconductors with application to covalent materials, C.Jacoboni and I.Reggiani:Rev.Mod.Phys,55,645(1983)
- 2) Non-Ohmic Transport in semiconductors, W.Fawcett, IAEA, SMR10, 42,1972
- 3) Measurement of I/V-Characteristics of a GaAs submicron $N^+N^-N^+$ -diode : M.A.Hollis, L.F.Eastman and C.E.C.Wood, Electron Lett 18, 570 (1982)
- 4) Hot Electron Spectroscopy of GaAs : J.R. Hayes, A.F.J.Levi and W.Wiegmann, Phys.Rev.Lett.54(14) 8.April 1985
- 5) Ballistic electrons in a submicron semiconducting structure: A boltzmann equation approach: H. Baranger, Ph.D.Thesis, Cornell University, Jan.1986
- 6) Extended momentum equations for electron transport in semiconducting submicron structures: A.Bringer and G. Schön, J.Appl.Phys.64(5), 1.Sept.1988
- 7) Physics of semiconductor devices: S.M.Sze, 2.ed, Wiley, New York, 1981
- 8) Einführung in die numerische Mathematik II: Stoer/Burlisch, Springer Verlag Berlin 1978
- 9) Solid State Physics: N.Ashcroft and N.Mermin, HRW, Philadelphia,1972
- 10) Elektronentheorie der Metalle: H.A.Bethe und A. Sommerfeld, Neuaufl. Springer Verlag Berlin,1967
- 11) Spezielle Funktionen der math. Physik: C.Müller, Vorlesung an der RWTH Aachen, WS 1984/85

Zusätzlich verwendete Literatur

- i) Einführung in die Transporttheorie: J.Jäckle, Vieweg Verlag Braunschweig,1978
- ii) Handbook of Mathematical Functions: M.Abramowitz and I.A. Stegun, Dover New York, 1970
- iii) On the Kinetic Theory of Rarefied Gases: H.Grad, Comm.Pure Appl. Math 2,331,(1949)
- iv) Note on N-Dimensional Hermite Polynomials: H.Grad, dito
- v) Semiconductor Physics: K.Seeger, 3.ed, Springer Verlag Berlin,1985
- vi) Quantentheorie: Dawydow, Akadem.Verlag der Wissenschaften Berlin,1957
- vii) Introduction to Solid-State-Physics: O.Madelung, 2.ed. Springer Verlag Berlin, 1981
- viii) Funktionalanalysis I u. II: S. Großmann , Akadem. Verlagsgesellschaft, Frankfurt am Main,1970
- ix) Theorie des Aufbaues der Materie: F.Hund, Teubner Verlag Stuttgart,1961
- x) Methods of Mathematical Physics; Vol.Iu.II : Courant,R. and Hilbert,D, Interscience, New York, 1953
- xi) Der kleine Prinz: Antoine de Saint-Exupéry, Karl Rauch Verlag, Düsseldorf, 1972

Tabelle I

I-V-Charakteristik in Übersicht

Hierarchien	V	R_i	$\Delta R = R_b - R_i$	$StomI$
	(mV)	($\frac{\mu V}{A}$)	($\frac{\mu V}{A}$)	(A)
$T = 0(^{\circ})$				
<i>Baranger</i>	100	100	0.0	10000
2 - <i>H</i>	62	62	38	10000
4 - <i>H</i>	71	71	29	10000
6 - <i>H</i>	87	87	13	10000
4 - <i>H</i> R-Def.	127	127	-27	10000

Tabelle II

Matrixelemente des Stoßoperators

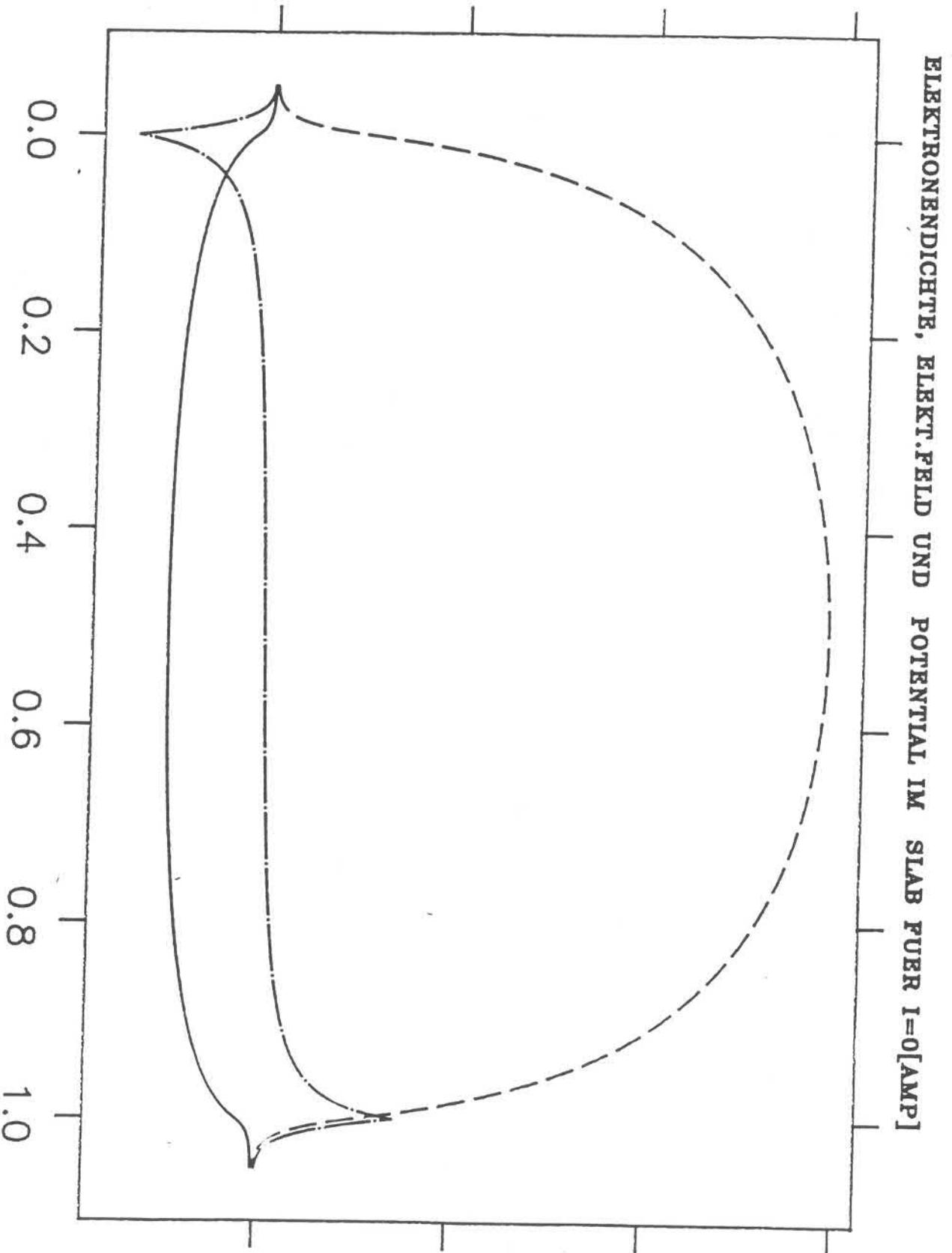
(i, j)	1	2	3	4	5
1	1	0	.6004	0	.2001
2	0	1.601	0	-.7997	0
3	.6004	0	7.974	0	-.08605
4	0	-.7997	0	1.601	0
5	.2001	0	-.08605	0	2.715

Bildanhang

- Abbildung 1** : Inhomogenität einer Xenostruktur anhand der Elektronendichte (durchgezogene Linie), des elektrischen Feldes (Strichpunkt-Linie) und des Potentials (gestrichelte Linie) demonstriert, für den Gleichgewichtsfall $I = 0(\frac{Amp}{cm^2})$. Die Slabdicke ist bei allen Abbildungen konstant $0.4(\mu m)$. Die Ordinate ist dimensionslos aufgetragen, da in dieser Abbildung drei physikalische Größen einer gemeinsamen Skala angepasst sind. Werte siehe Text.
- Abbildung 2** : Orthogonale Hermitefunktionen bis 5.Ordnung
- Abbildung 3** : Logarithmus der Elektronendichte N in der Xenostruktur für $I = 10000(\frac{Amp}{cm^2})$
- Abbildung 4** : Mittlere Driftgeschwindigkeit für $I=0.2(\frac{Amp}{cm^2})$ über die Slabdicke.
- Abbildung 5** : Mittlere Driftgeschwindigkeit (gepunktete und durchgezogene Linie) und die ballistische Geschwindigkeit (gestrichelte und Strichpunkt-Linie) jeweils für $I= 10000$ und $13000 (\frac{Amp}{cm^2})$ über die Slabdicke.
- Abbildung 6** : Der Potentialverlauf in einer Xenostruktur für Lösung der 4er-H mit R-Def. und 6er-H mit Normalabschneidung (durchgezogene und gestrichelte Linie) für $I= 10000 (\frac{Amp}{cm^2})$ über die Slabdicke.
- Abbildung 7** : Der Potentialverlauf in einer Xenostruktur für $I= 10000$ und $13000 (\frac{Amp}{cm^2})$ (gestrichelte und durchgezogene Linie über die Slabdicke.
- Abbildung 8** : Der Temperaturverlauf aller Lösungen, die 2er-H (durchgezogene), die 4er-H (gepunktete), die 6er-H (gestrichelte Linie), alle jeweils bei Normalabschneidung und die 4er-H mit R-Def.(Strichpunkt-Linie)
- Abbildung 9** : Der Temperaturverlauf im Slab der 4er-H mit R-Def. für $I= 10000$ und $20000(\frac{Amp}{cm^2})$ (I) u.(II) über die Slabdicke.
- Abbildung 10** : Die Verteilungsfunktion (der 4er-H R-Def) als Funktion vom Ort und von der Geschwindigkeit, zu Position (I) $x=0.125d$, Position (II) $x=0.48d$, Position (III) $x=0.76$ und Position (IV) $x=0.85$, der Stromwert beträgt $I=10000 (\frac{Amp}{cm^2})$
- Abbildung 11** : Die Verteilungsfunktion (2-er H, Normalabschneidung) zu den gleichen Positionen und zum gleichen Stromwert wie in Abb.10; Position (I) (durchgezogene),(II) (gestrichelte),(III) (Strichpunkt-) und (IV) (gepunktete Linie).

- Abbildung 12** : Die Verteilungsfunktion (4-er H, Normalabschneidung) zu den gleichen Positionen und zum gleichen Stromwert wie in Abb.10 u.11
- Abbildung 13** : Die Verteilungsfunktion (6-er H, Normalabschneidung) zu den gleichen Positionen und zum gleichen Stromwert wie in Abb.10 u.11
- Abbildung 14** : Die I-V-Charakteristik (mit Widerstandsgeraden) 2er-H (gepunktete), 4er-H (gestrichelte), 6er-H (durchgezogene), jeweils bei Normalabschneidung, die Baranger Widerstandsgerade (Strichpunkt-) und die 4er-H mit R-Def. (unter durchgezogene Linie)
- Abbildung 17** : Streukugel für akustische Elektron-Phonon-WW
- Abbildung 16** : Potentialverlauf in der Xenostruktur für die ein- und dreidim. Transportrechnungen der Stromwert beträgt $I=4000(\frac{Amp}{cm^2})$, 6-er H, die durchgezogene Linie entspricht der dreidim. Lösung und die gestrichelte der eindim. Lösung.
- Abbildung 17** : Die mittlere Driftgeschwindigkeit der Elektronen in Stromrichtung, über die Slabdicke (gestrichelte Linie) und ballistische Geschwindigkeit (durchgezogene Linie), für $I=4000(\frac{Amp}{cm^2})$
- Abbildung 18** : Die Elektronentemperatur in Stromrichtung (durchgezogene) und in den Querrichtungen (gestrichelte Linie) für $I=4000(\frac{Amp}{cm^2})$
- Abbildung 19** : Die Elektronentemperatur transversal zur Stromrichtung für $I=4000(\frac{Amp}{cm^2})$, der Temperaturverlauf bzw. ist identisch mit der gestrichelten Linie in Abb.18
- Abbildung 20** : Die Verteilungsfunktion der dreidim. Transportrechnung in Stromrichtung für $I=4000(\frac{Amp}{cm^2})$, zu Position $x=0.12d$ (durchgezogene), (II) $x=0.48$ (gestrichelte), (III) $x=0.76d$ (Strichpunkt-), (IV) $x=0.85d$ (gepunktete Linie).
- Abbildung 21** : Die Verteilungsfunktion der eindim. Transportrechnung mit den gleichen Positionen und dem gleichen Stromwert wie in Abb.20.
- Abbildung 22** : Die I-V-Charakteristik (Widerstandsgeraden) zum Vergleich der eindim. Transport, 4er-H und 6er-H-Lösung beide Normalabschneidung, (jeweils Strichpunkt- und gestrichelte Linie) und der dreidim. Transport (durchgezogene Linie)

$N(X)$, $E(X)$, $V(X)$

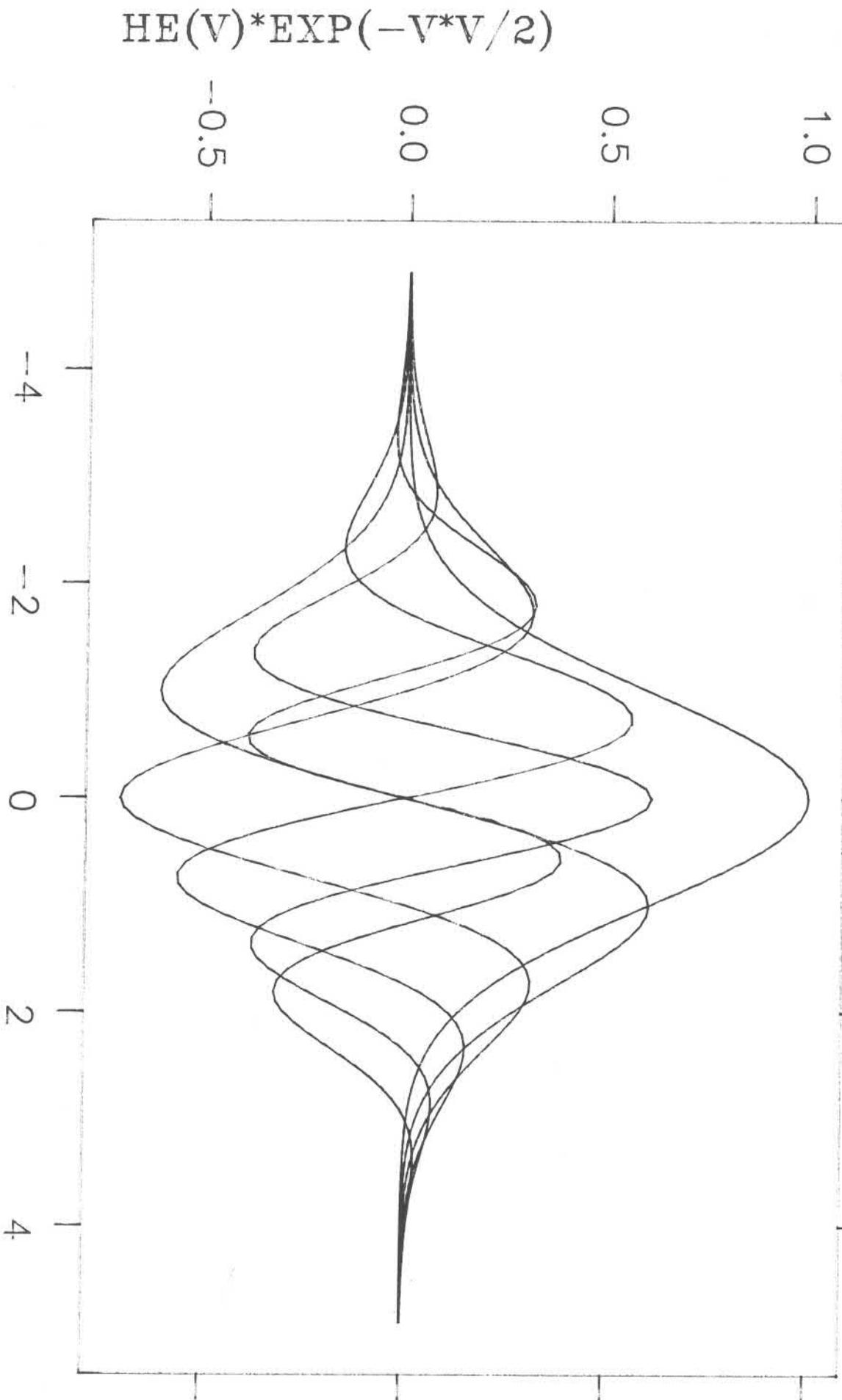


SLABDICKE

0.4 X [MICROMETER]

ABB.1

ORTHOGONALE HERMITEFUNKTIONEN $HE(V)$ BIS ORDN.5

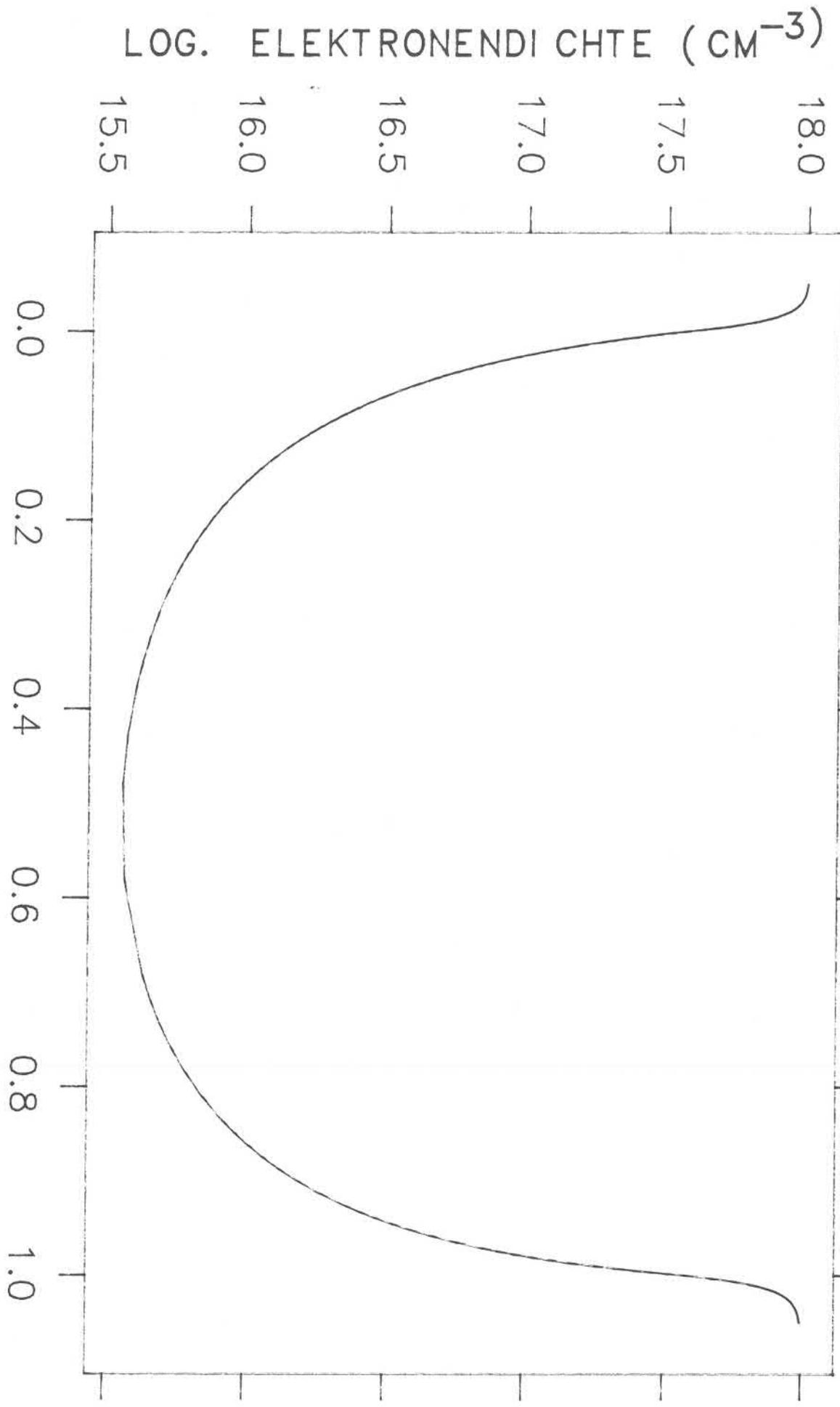


GESCHW.

$\langle V \rangle$

ABB.2

ELEKTRONENDICHTE IM SLAB FUER I=10000 (AMP/CM*2); ALPHA-LSG.

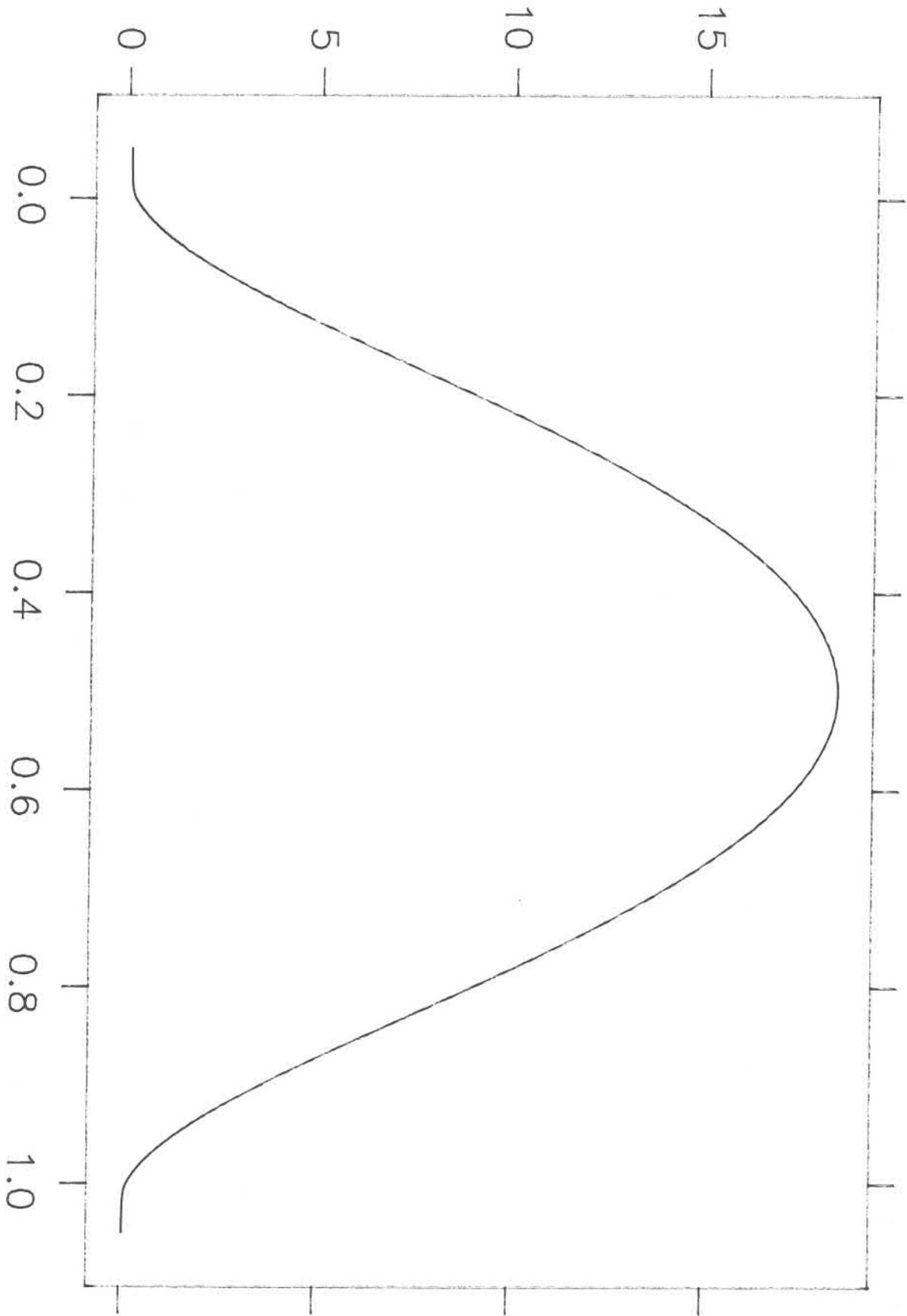


SLABDICKE X 0.4*X (MICROMETER) ABB.3

MITTLERE DRIFTGESCHWINDIGKEIT

$\cdot 10^{-7}$

DRIFTGESCHWINDIGKEIT FÜR $I = 0.02$ (AMP/CM²)



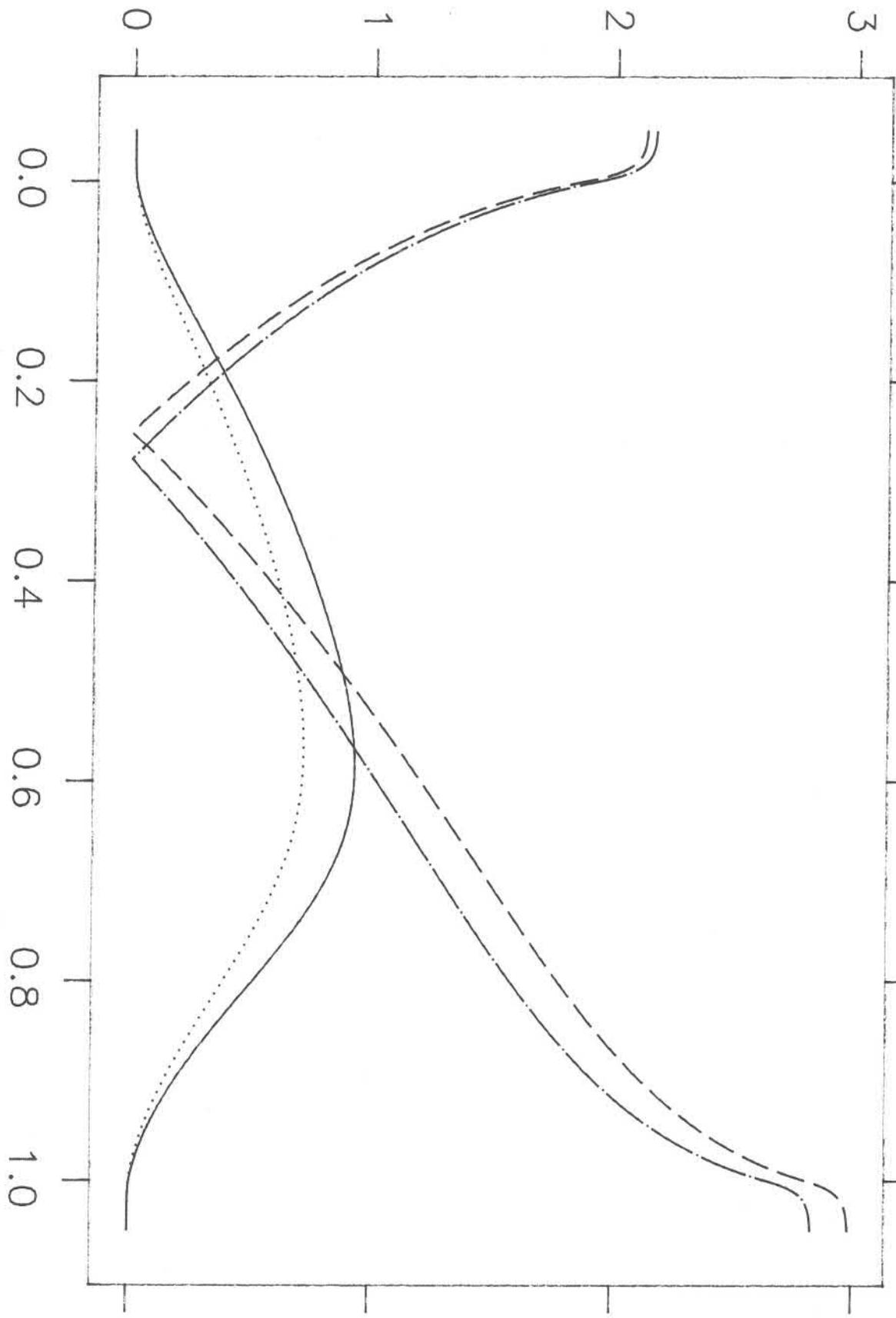
SLABDÜCKE X

$0.4 \cdot X$ (MICROMETER)

ABB.4

GESCHWINDIGKEIT $V(X)$

BALLISTISCHE- UND DRIFTGESCHW. FUER $I = 10000$ U. $I = 13000$ (AMP/CM²)

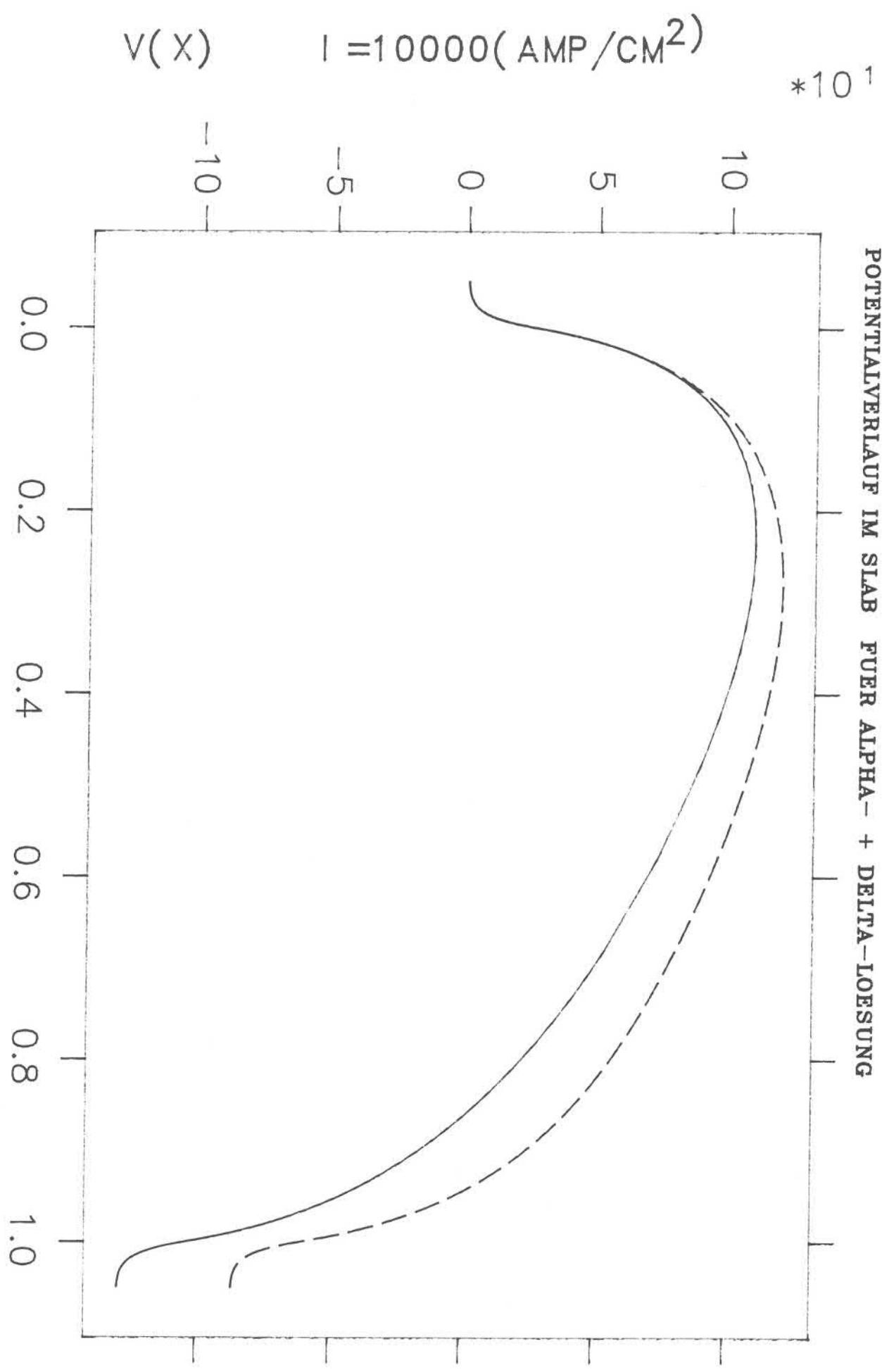


SLABDICKHE X

0.4 * (MICROMETER)

ABB.5

POTENTIALVERLAUF IM SLAB FUER ALPHA- + DELTA-LOESUNG

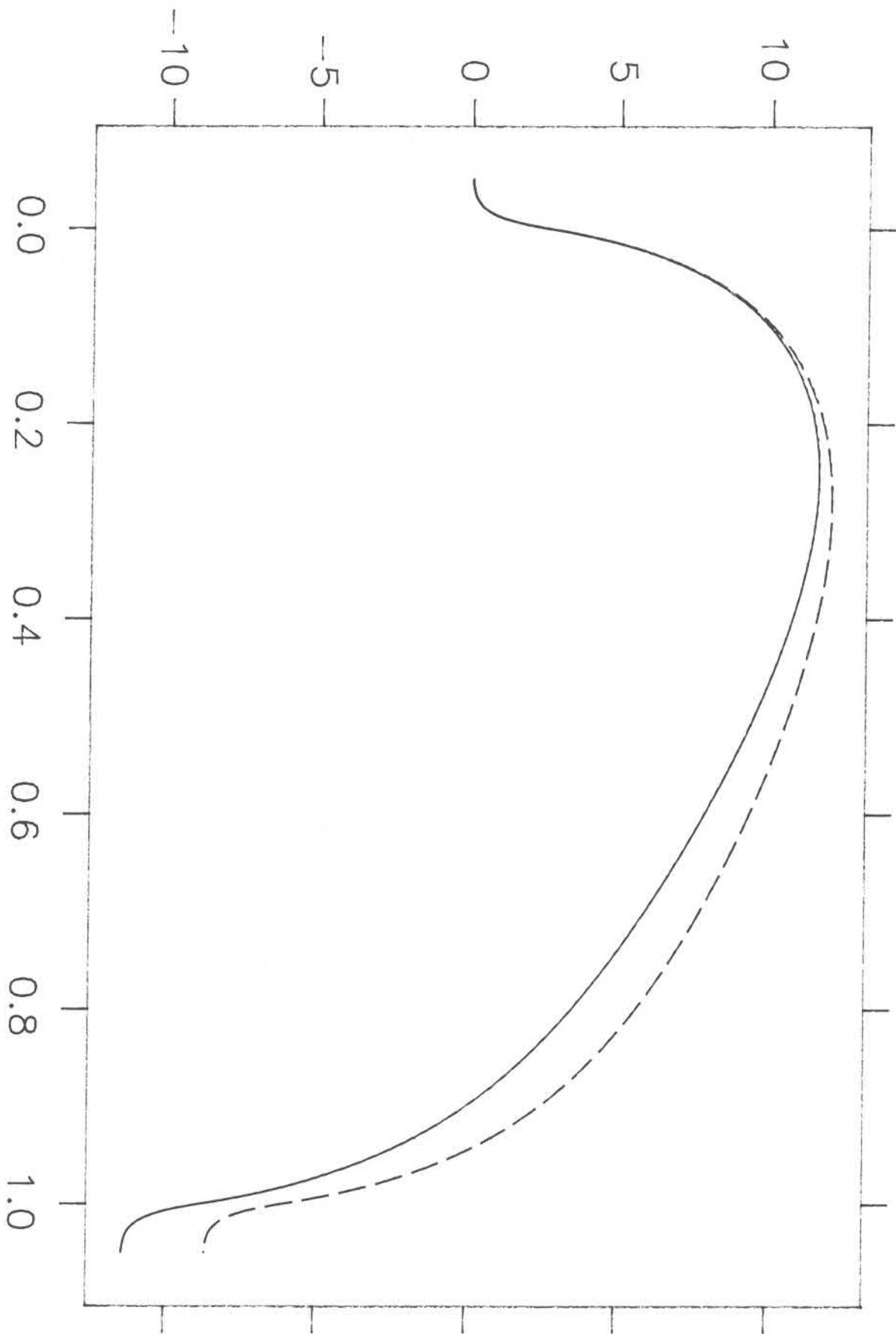


SLABDICKE X 0.4 * X (MICROMETER) ABB.6

POTENTIAL V(X)

$\cdot 10^{-1}$

POTENTIAL IM SLAB FUER I = 10000 UND 13000 (AMP/CM²)

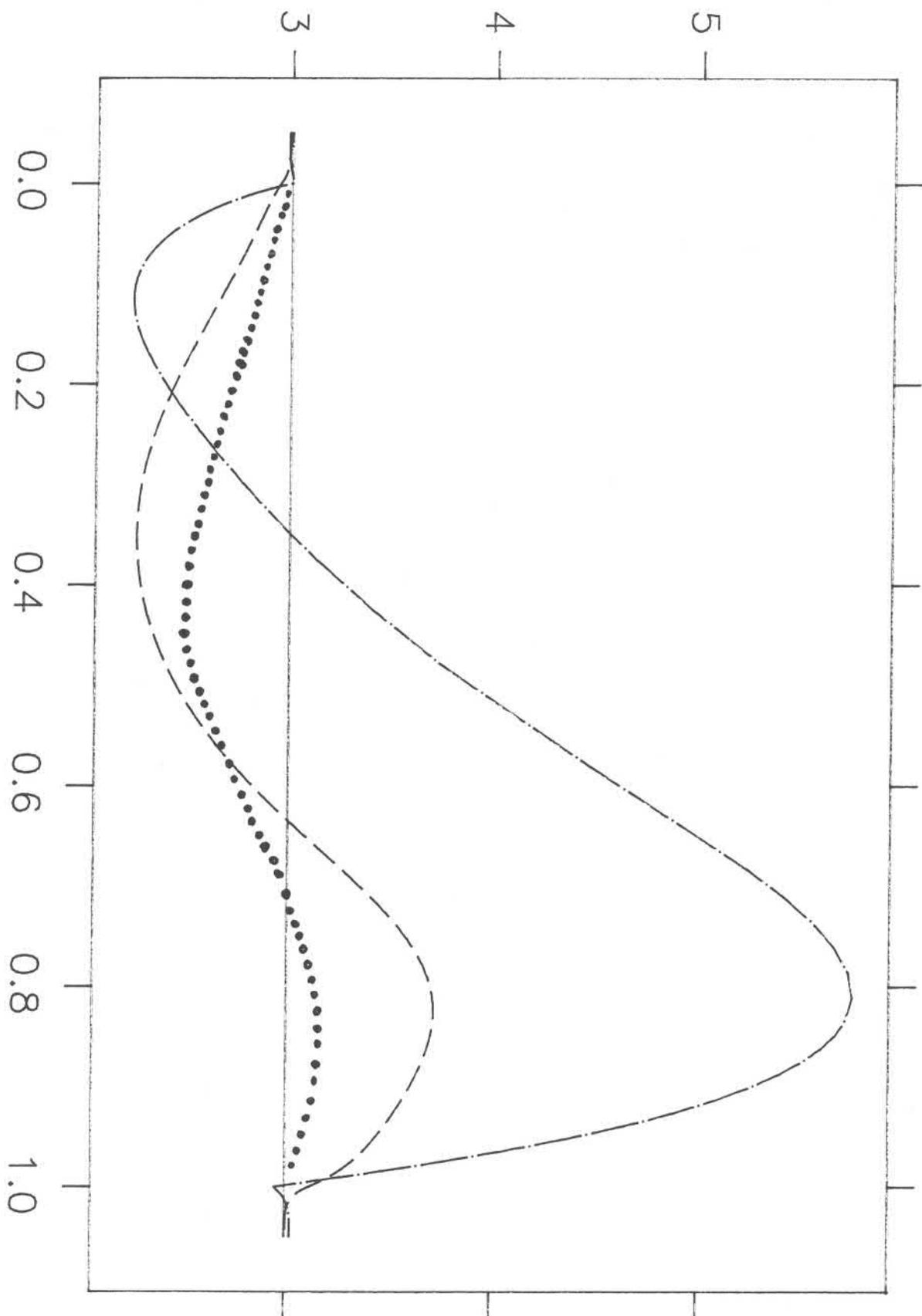


SLABDICKE X 0.4 * X (MICROMETER) ABB. 7

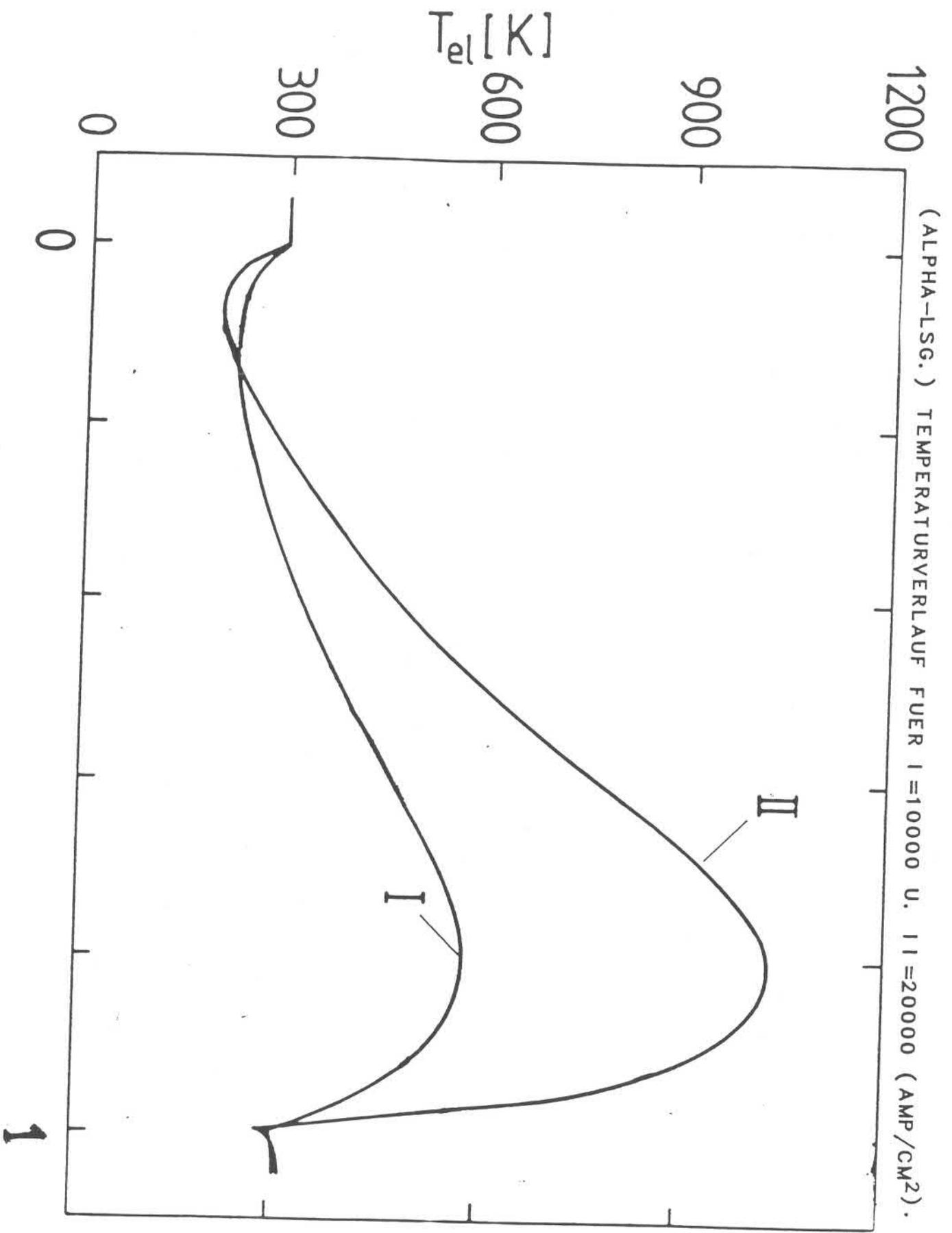
TEMPERATUR T <KELVIN>

$\cdot 10^2$

TEMPERATURVERLAUF IM SLAB FUER ALLE HIERACHIELOESUNGEN



SLABDICKHE X 0.4 * X (MICROMETER) ABB.8



SLABDICKE X 0.4* X (MICROMETER)

1

VERTEILUNGSPKPTEN PUER POS. 0.125, 0.48, 0.76, 0.85 10000 A/CM**2

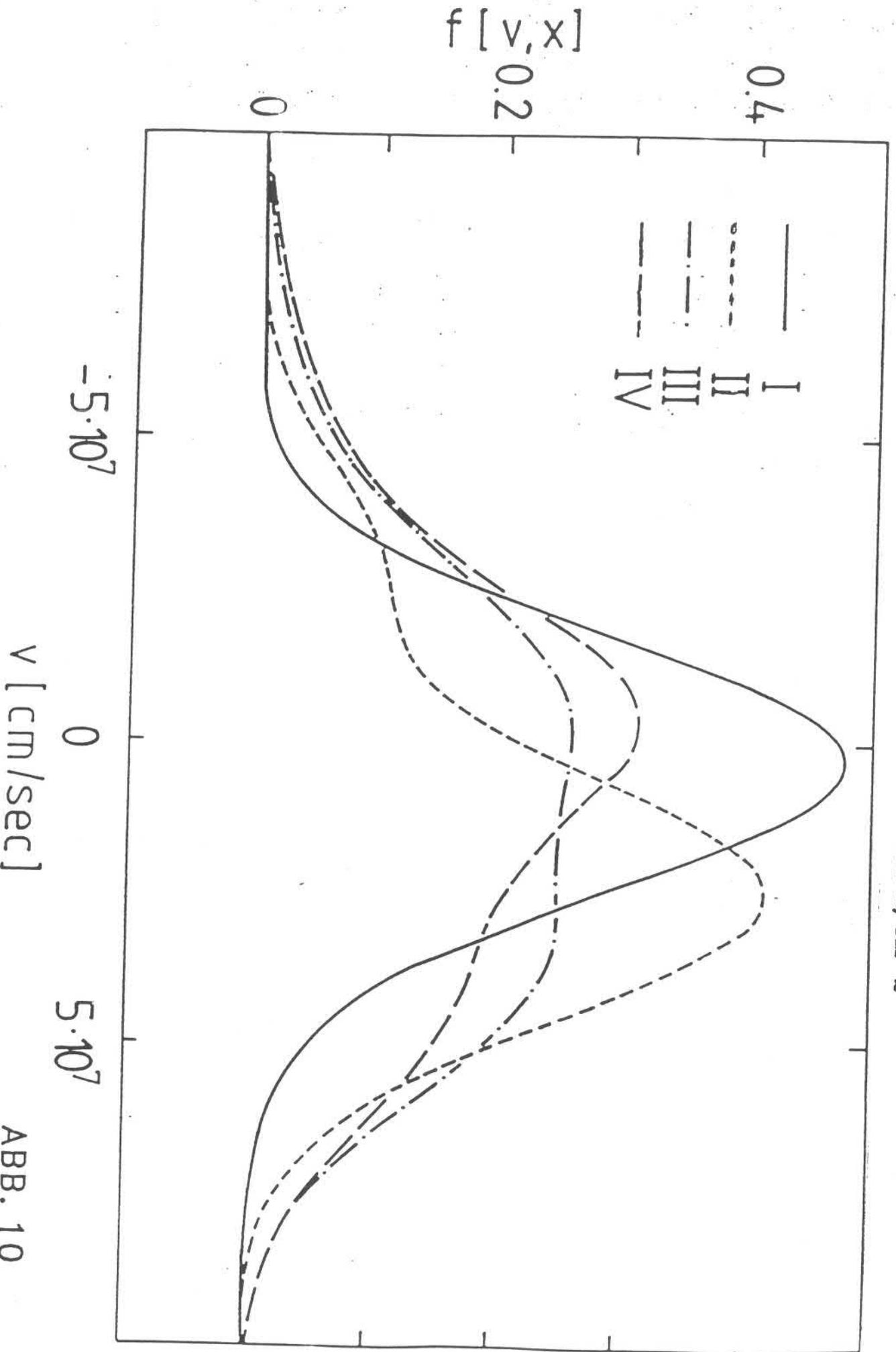
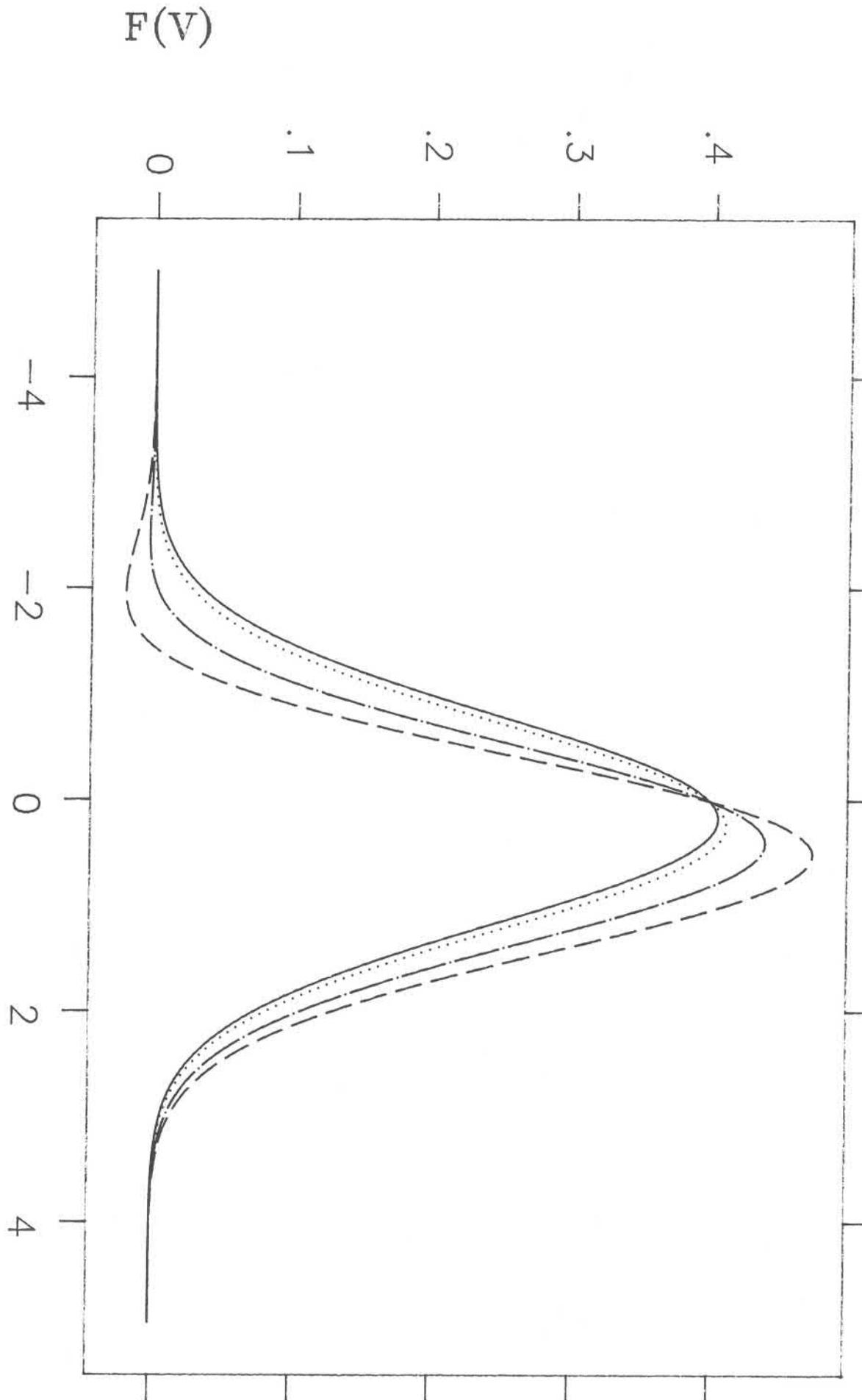


ABB. 10

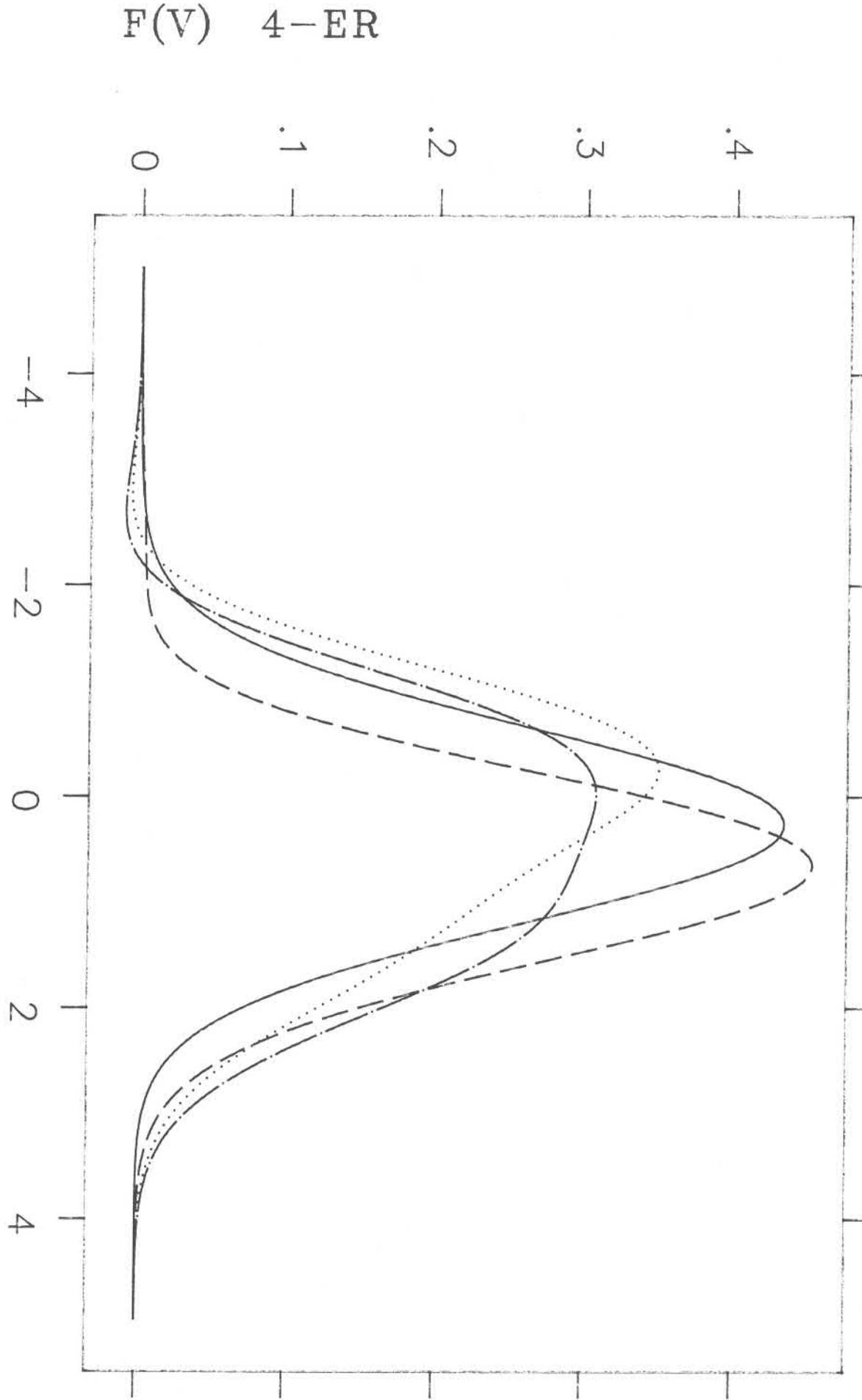
VERTEIL LUNGSKFTEN FUER POS. 0.125, 0.48, 0.76, 0.85; I = 10000 (A/CM²)



GESCHW. $\langle V \rangle$

ABB.11

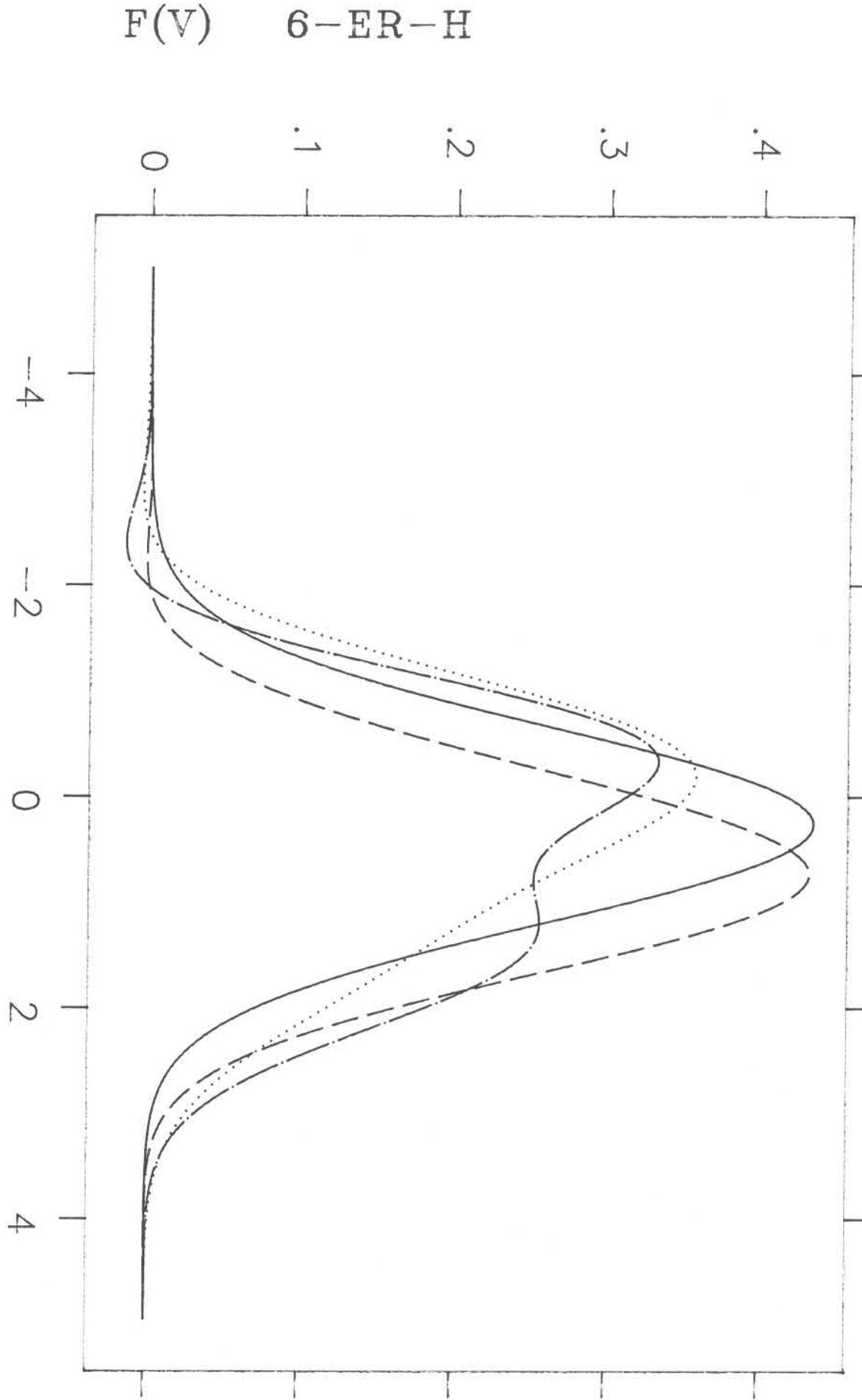
VERTEIL LUNGSFKTEN FUER POS. 0.125, 0.48, 0.76, 0.85; I = 10000 (AMP/CM²)



GESCHW.<V>

ABB.12

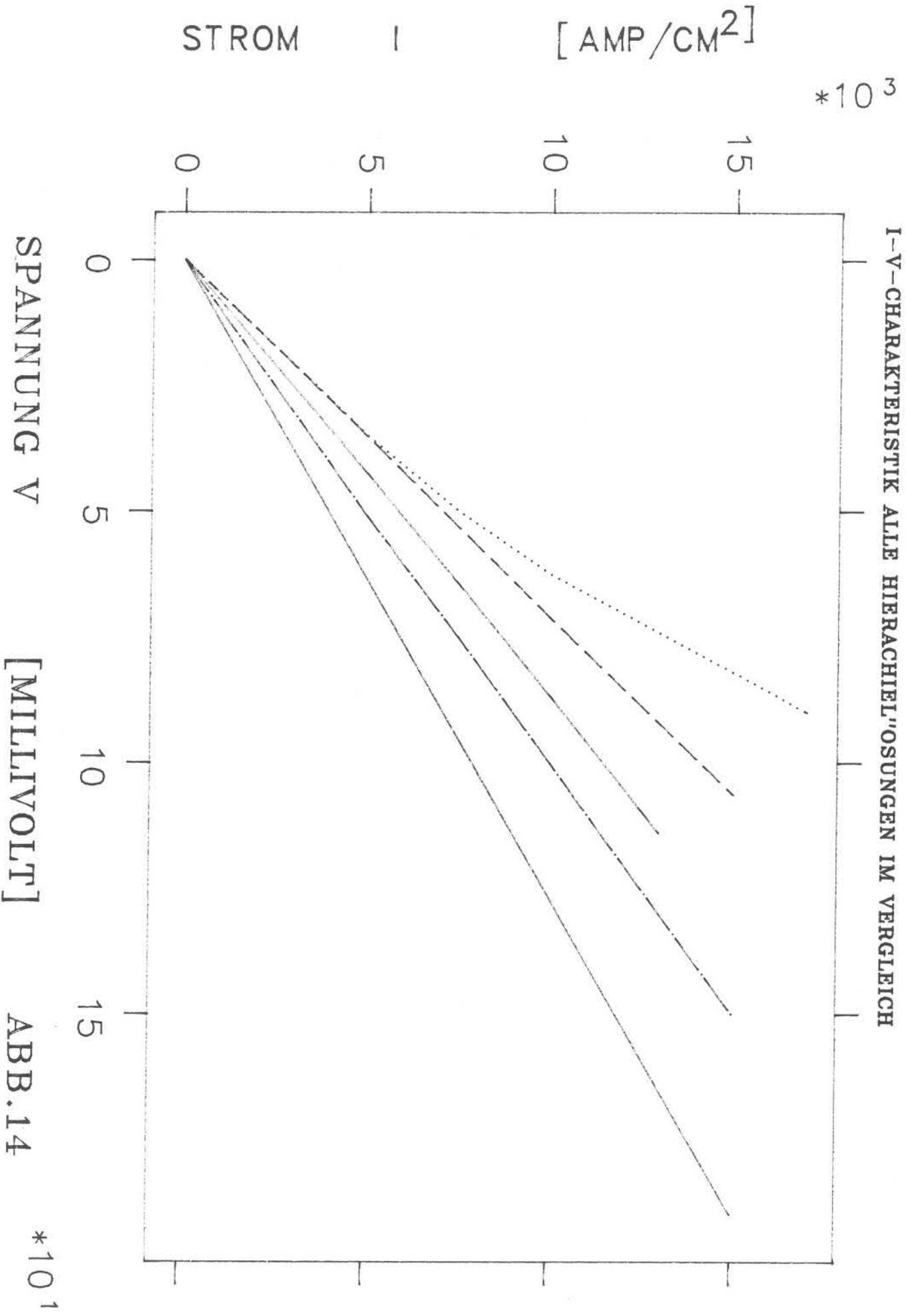
VERTEILUNGSKURVEN FÜR POS. 0.125, 0.48, 0.76, 0.85; $I = 100000 \text{ (AMP/CM}^2\text{)}$



F(V) 6-ER-H

GESCHW. $\langle V \rangle$

ABB.13



SPANNUNG V

[MILLIVOLT]

ABB.14

*10¹

STRBUKUGEL

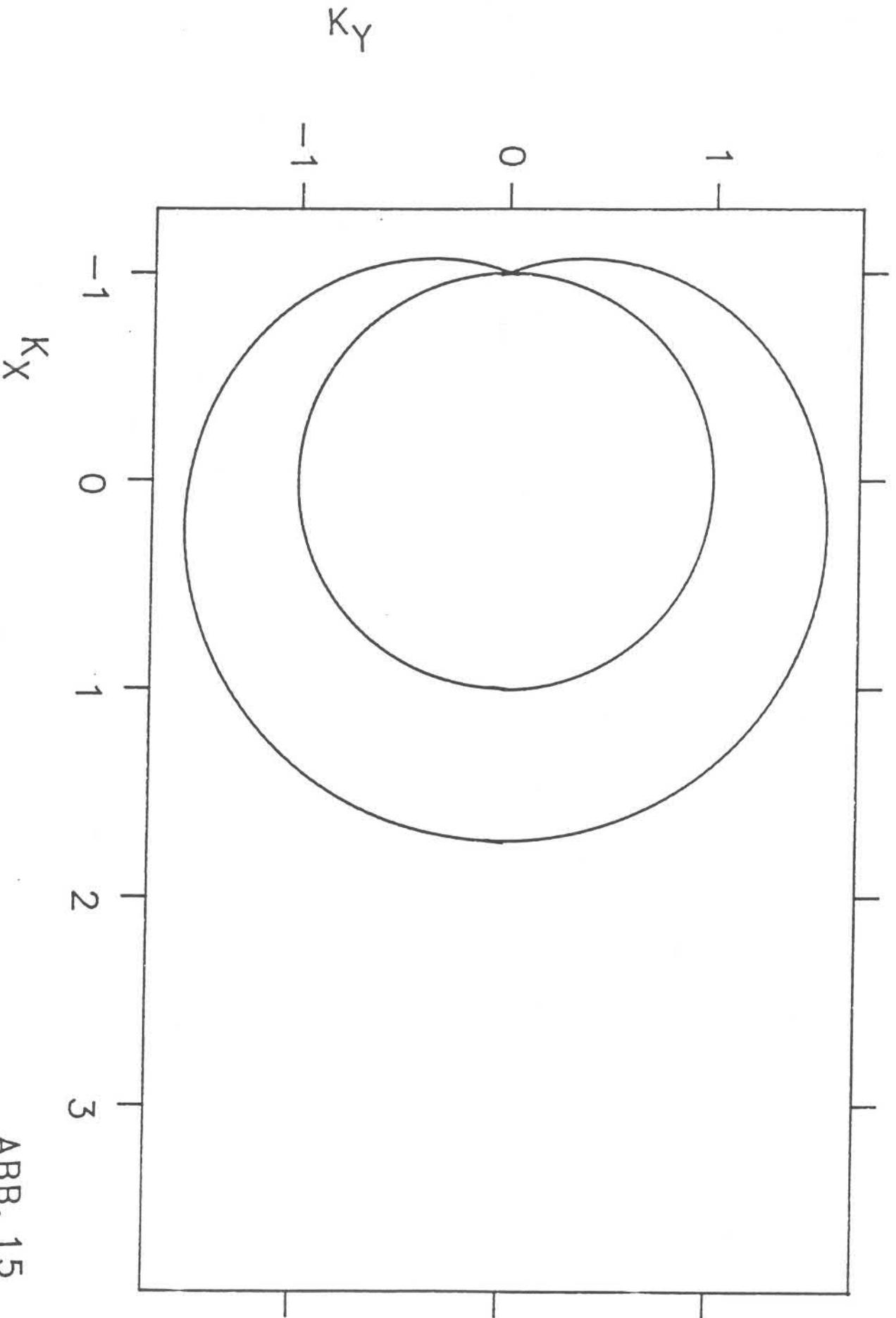
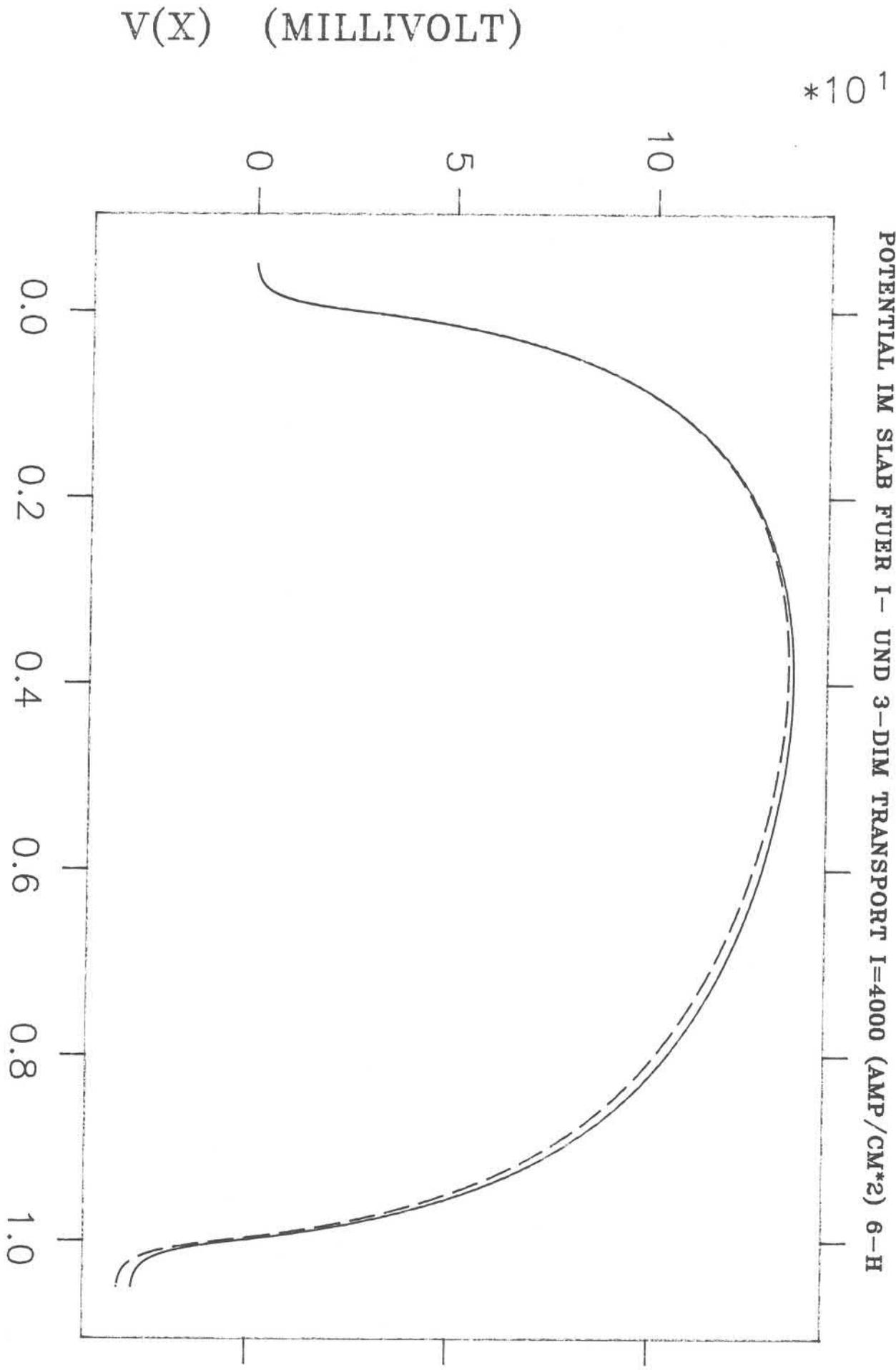


ABB. 15

POTENTIAL IM SLAB FUER I- UND 3-DIM TRANSPORT I=4000 (AMP/CM*2) 6-H

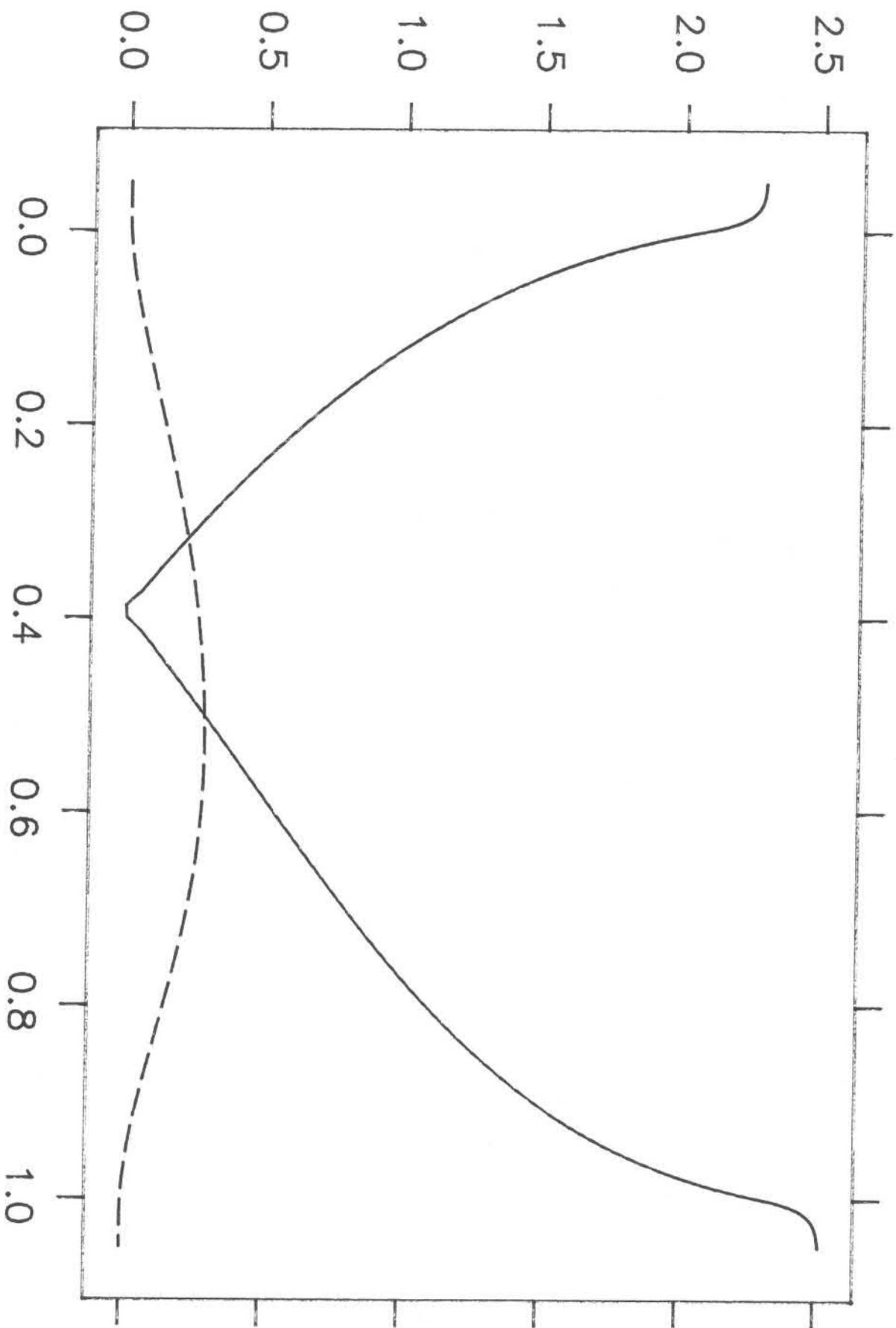


SLABDICKE 0.4*(MICROMETER)

ABB.16

MITTL. DRIFTGESCHWINDIGKEIT DER ELEKTRONEN

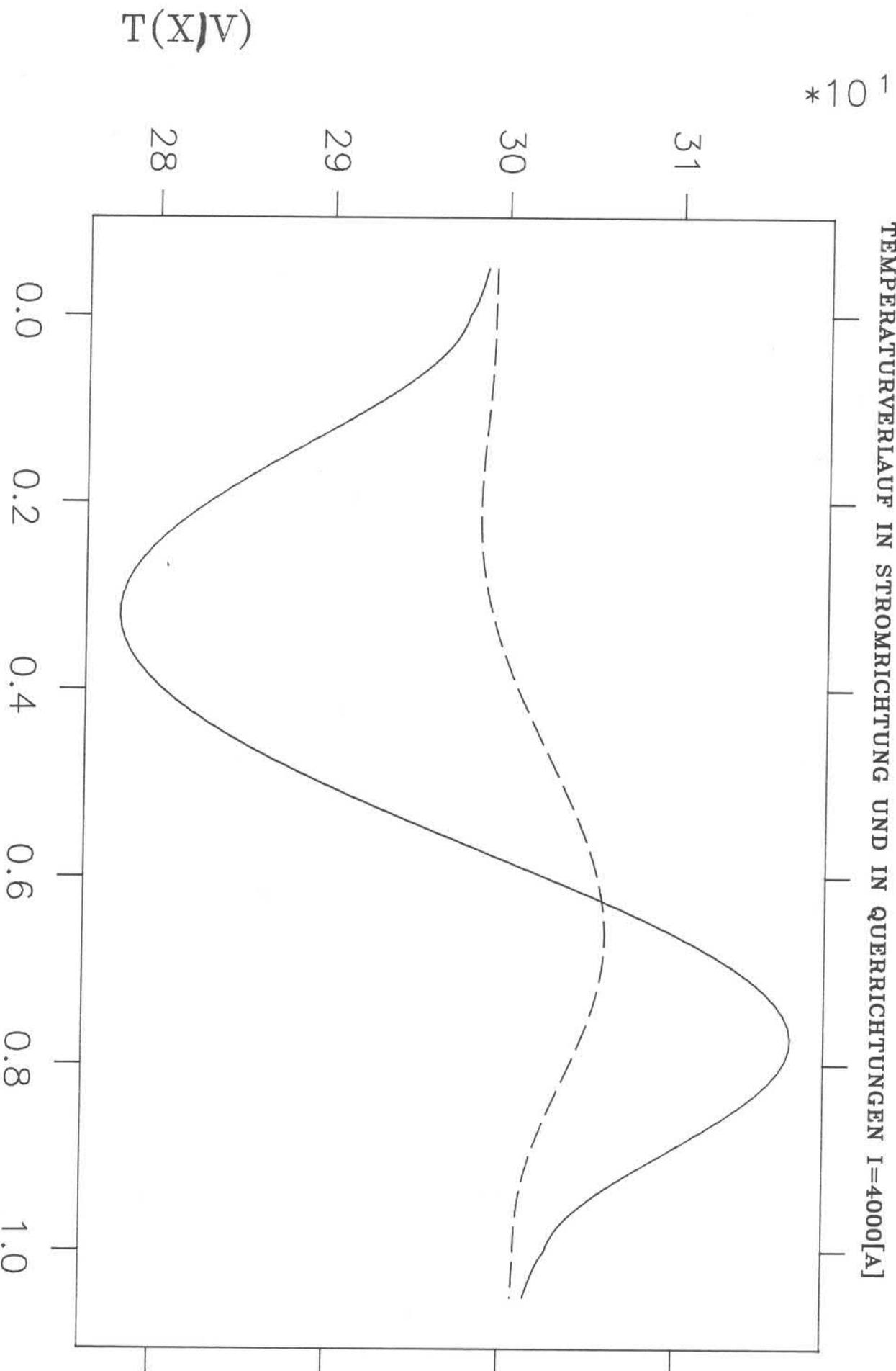
BALLIST. UND DRIFTGESCHW. FUER 4000 A/CM**2 X-KOORD.



SLABDICKE 0.4*(MICROMETER)

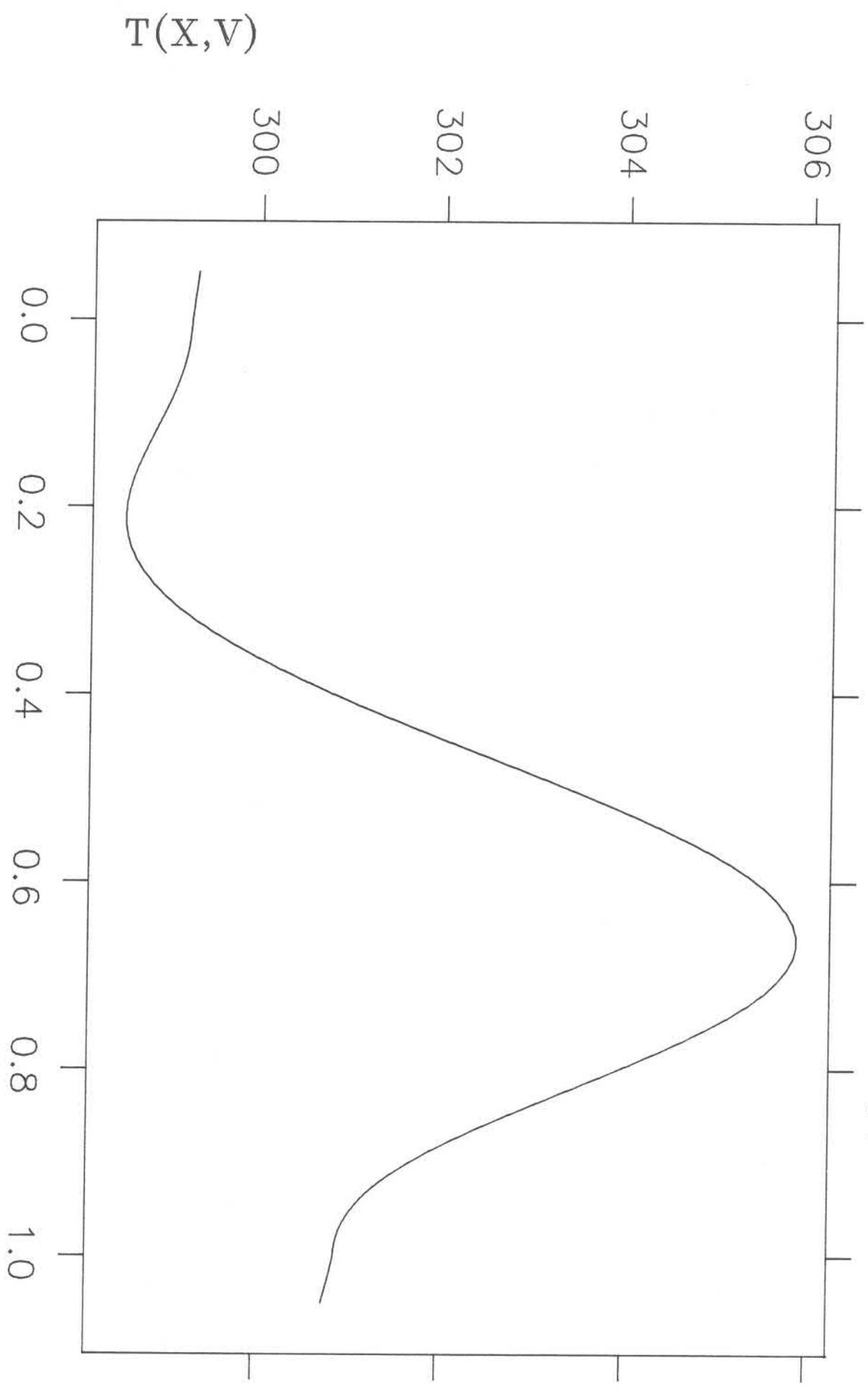
ABB.17

TEMPERATURVERLAUF IN STROMRICHTUNG UND IN QUERRICHTUNGEN I=4000[A]



SLABDICKKE 0.4 X [MICROMETER] ABB.18

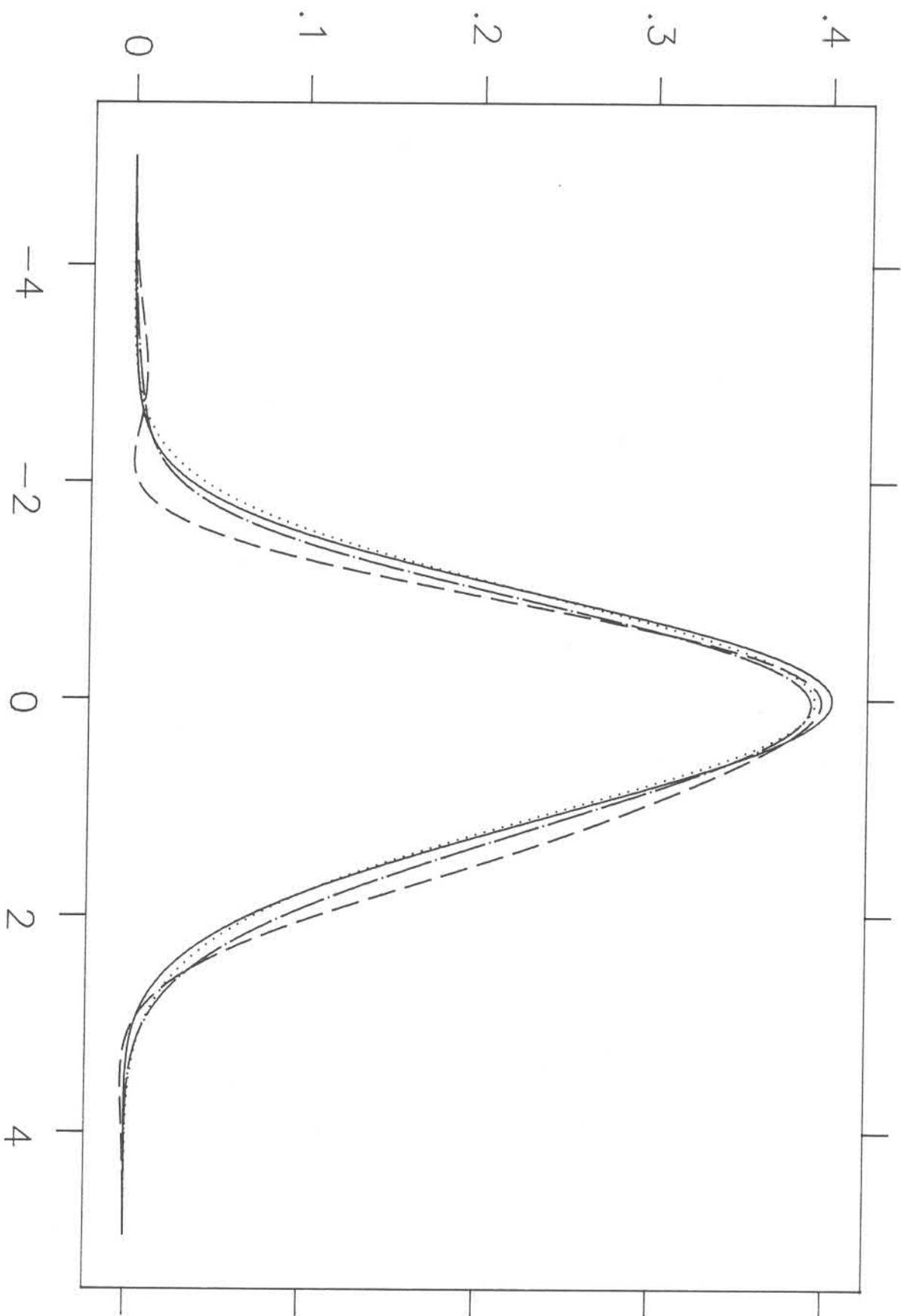
TEMPERATURVERLAUF TRANSVERSAL ZUR STROMRICHTUNG I=4000[A]



SLABDICKE 0.4 X [MICROMETER] ABB.19

F(V) 6-H X-KOORDINATE

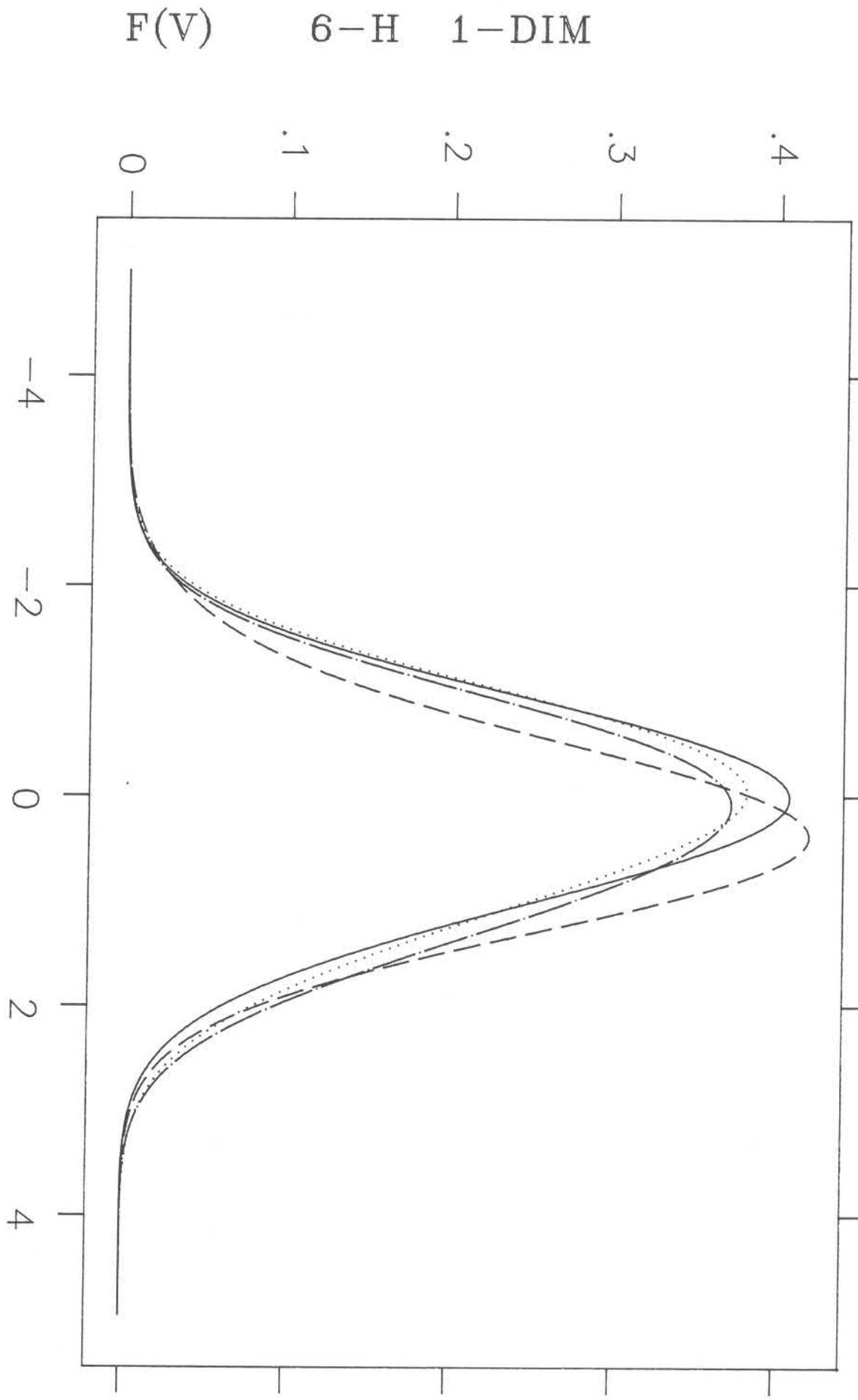
VERTEILUNGSKURVEN FUER 4000 A/CM**2 POS. 0.125,0.48,0.76,0.85



GESCHW. <V>

ABB. 20

VERTEILUNGSFUNKTEN FUER 4000 [A/CM**2] POS.0.12,0.48,0.48,0.76,0.85

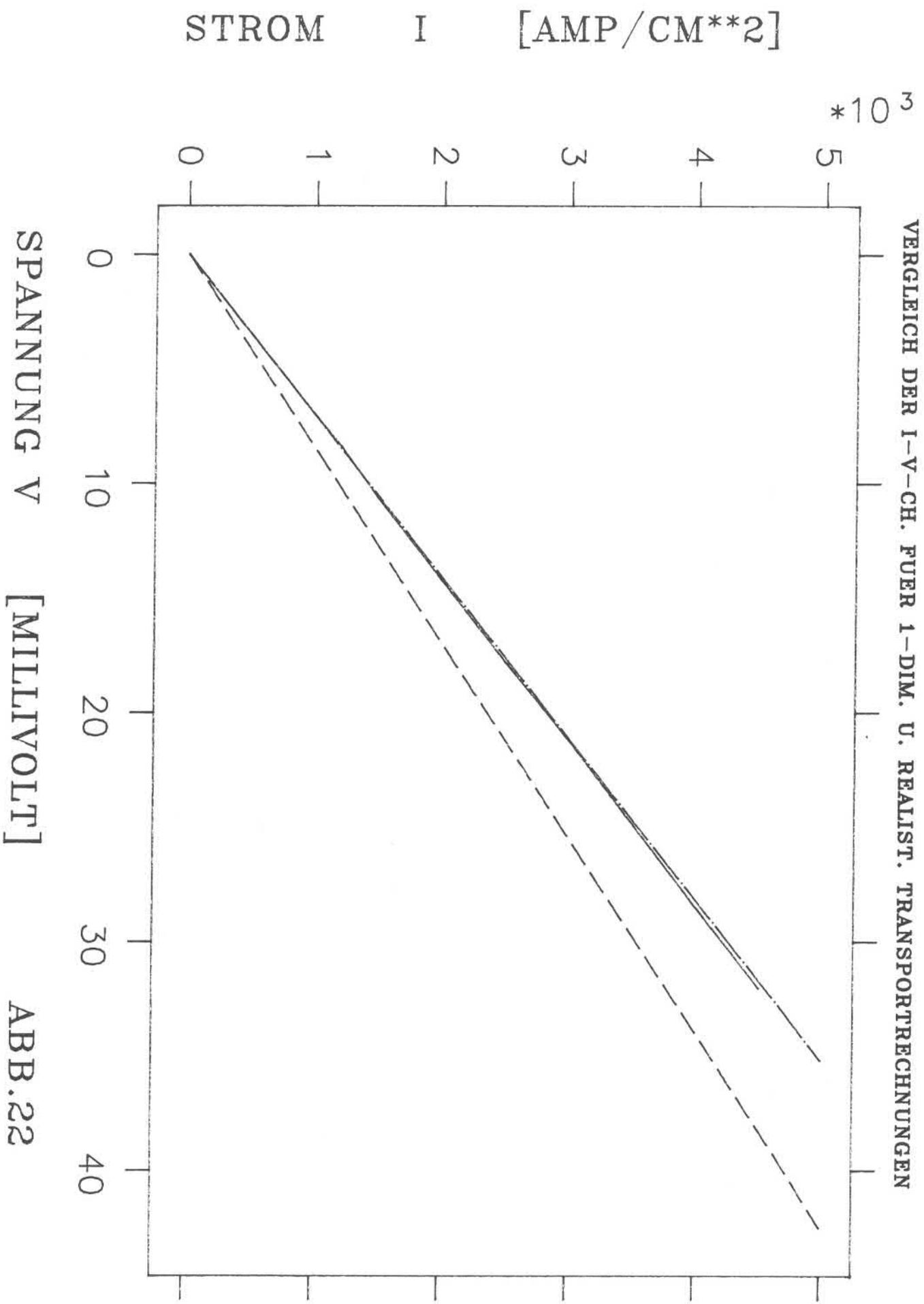


F(V) 6-H 1-DIM

GESCHW.<V>

ABB.21

VERGLEICH DER I-V-CH. FUER 1-DIM. U. REALIST. TRANSPORTRECHNUNGEN



SPANNUNG V [MILLIVOLT] ABB.22