

# ABSCHLUSSBERICHT

## 1 Allgemeine Angaben

DFG-Geschäftszeichen: Schu 1016/8-1,2,3

Projektnummer: 387905924

Titel des Projekts:

Schnelle Numerische Methoden zur Beschleunigung der Analyse des Ladungsträgertransports in Quantenbauelementen der Hochfrequenztechnik und Photonik auf der Grundlage der von-Neumann Gleichung

Name des Antragstellers: apl. Prof. Dr.-Ing. Dirk Schulz

Dienstanschrift: Martin-Schmeißer-Weg 6, 44227 Dortmund

Berichtszeitraum (gesamte Förderdauer): 01.11.2018-31.10.2021, 1.09.2022-30.08.2025

## 2 Zusammenfassung / Summary

Zusammenfassung: Etablierte Methoden basierend auf NEGF-Methoden und konventionellen Wigner-Transportgleichungen weisen bekannte Schwächen auf. Ein alternatives numerisches Verfahren zur dynamischen Analyse des Ladungsträgertransports in Nanostrukturen wurde entwickelt. Grundlage der neuen Methodik ist die Von-Neumann-Gleichung in Schwerpunktkoordinaten, die über Finite-Volumen-Ansätze eine konsistente Behandlung von Übergangsbedingungen erlaubt und eine zeitabhängige Modellierung ermöglicht. Durch die Nutzung einer Wigner-ähnlichen Basis unter Einbeziehung eines komplexen Potentials zur Optimierung von Randbedingungen konnten wesentliche Nachteile herkömmlicher Ansätze überwunden werden. Im weiteren Verlauf wurde der Fokus auf die dynamische Modellierung von systemrelevanten Strukturen der Spintronik gelegt. Hierzu sollte der Hamilton-Operator mithilfe der empirischen Tight-Binding-Methode formuliert werden, die sowohl analytische als auch matrixwertige Darstellungen erlaubt. Unter Einsatz geeigneter Unterraumverfahren, wie der Mode-Space-Approximation, sollten nicht nur konventionelle Komponenten wie Gate-All-Around-Feldeffekttransistoren untersucht werden, sondern insbesondere Komponenten analysiert werden, wie auf dem Materialsystem Graphen basierende Strukturen oder auf dem Rashba-Effekt basierende Spintransistoren. Die entwickelten Methoden eröffnen zudem Perspektiven für die Analyse von Komponenten der Photonik.

Summary: Established methods based on NEGF and conventional Wigner based transport equations exhibit well-known weaknesses. An alternative numerical approach has been developed for the dynamic analysis of charge carrier transport in nanostructures. The new methodology is based on the von Neumann equation in center-of-mass coordinates, which

enables a consistent treatment of interface conditions through finite-volume techniques and allows for time-dependent modeling. By employing a Wigner-like basis and incorporating a complex potential to optimize boundary conditions, key disadvantages of conventional approaches have been overcome. Subsequently, the focus shifted to the dynamic modeling of spintronics-relevant structures. For this purpose, the Hamiltonian operator is to be formulated using the empirical tight-binding method, which supports both analytical and matrix-based representations. By applying suitable subspace methods, such as the mode-space approximation, not only conventional components like gate-all-around field-effect transistors can be investigated, but also structures based on the material system graphene or spin transistors utilizing the Rashba effect. Furthermore, the developed methods offer promising perspectives for the analysis of photonic components.

### 3 Wissenschaftlicher Arbeits- und Ergebnisbericht

Im Rahmen der Arbeiten wurde eine neuartige numerische Methodik entwickelt und validiert, die eine zeitabhängige Analyse des Ladungsträgertransports in Bauelementen mit Quantenstrukturen ermöglicht. Die Methodik basiert auf der Von-Neumann-Gleichung in Schwerpunktkoordinaten und nutzt die Finite-Volumen-Methode zur diskreten Aufteilung des Raumes in Teilbereiche, die über numerische Flüsse gekoppelt sind [A1, B1].

Die initiale konzeptionelle Validierung der Algorithmen erfolgte unter der Annahme einer homogenen effektiven Masse. Zur Abbildung von Heterostrukturen wurde ein Konzept zur Einbindung einer räumlich variablen effektiven Masse entwickelt, um die physikalischen Eigenschaften solcher Systeme adäquat zu erfassen [A2]. Während bei homogener effektiver Masse eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung vorliegt, resultiert bei inhomogener Masse eine Gleichung zweiter Ordnung. Die entwickelte Methodik wurde mithilfe des NEGF-Formalismus für den stationären Fall validiert; die resultierenden Strom-Spannungs-Charakteristiken zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit etablierten Referenzlösungen.

Die Methodik basiert auf Modellen, die das Leitungs- und/oder Valenzband beschreiben. Für praxisrelevante Anwendungen wurden insbesondere Multiband-Modelle untersucht [A3]. Zwei Ansätze standen hierbei im Fokus: das Kane-Modell und das Multiband-Envelope-Function-(MEF)-Modell. Durch Anwendung der Von-Neumann-Gleichung entsteht ein System gekoppelter partieller Differentialgleichungen. Das MEF-Modell zeigte Vorteile hinsichtlich der Behandlung der Randbedingungen in Bereichen mit geringer Bandkrümmung. An den Kontaktgrenzen sind die Gleichungen entkoppelt [B2]. Die Validierung erfolgte anhand resonanter Tunnelioden mit Typ-I- und Typ-II-Heterostrukturen.

Für Typ-I-Heterostrukturen ergibt sich aufgrund der stark unterschiedlichen effektiven Massen von Elektronen und Löchern ein erhöhter numerischer Aufwand, während Typ-II-Heterostrukturen eine besonders präzise Erfassung der Interbandkopplung erfordern. Für beide Typen konnten stabile Simulationen bei geringen Bandabständen ( $< 0,3$  eV) durchgeführt werden. Bei Typ-II-Heterostrukturen zeigte sich eine Abhängigkeit der Konvergenz von der Größe des Bandabstands. Große Bandabstände führen zu ausgeprägten Dichtestößen, die Oszillationen in den Lösungen verursachen können. Eine feinere Gitterapproximation verbessert zwar die Konvergenz, erhöht jedoch den Rechenaufwand erheblich.

Insgesamt belegt die entwickelte Methodik ein hohes Potenzial für die konsistente Integration von Multiband-Modellen in die Simulation komplexer Quantenbauelemente. Weiterführende Entwicklungen zur verbesserten Behandlung von Dichtestößen erscheinen hierbei vielversprechend. Die Untersuchungen zeigten, dass der Einsatz von Slope-Limitern auf die Poisson-Gleichung – und nicht auf die Dichtematrixgleichung – im Vergleich zu konventionellen Verfahren bei Bandkopplungen zu einer deutlich verbesserten Konvergenz führte. Diese wurde bereits nach einer geringeren Anzahl von Iterationsschritten erreicht, was auf eine effizientere numerische Stabilisierung des Lösungsverhaltens hinweist.

Für zeitabhängige Analysen, die im Rahmen des NEGF-Formalismus mit erheblichem numerischen Aufwand verbunden sind, wurde ein alternativer Ansatz entwickelt. Dieser basiert auf der Lösung der zeitabhängigen Von-Neumann-Gleichung in Schwerpunktkoordinaten mithilfe von Exponential-Integratoren [A1, A4, B3]. Zur Approximation kamen Faber-Polynome zum Einsatz, die hohe Zeitschrittweiten bei gleichzeitig hoher numerischer Genauigkeit ermöglichen. Die Faber-Polynom-basierten Verfahren weisen eine enge Verwandtschaft zu Krylov-Verfahren auf. Die Ergebnisse zeigen, dass beide Ansätze hinsichtlich Effizienz und Genauigkeit vergleichbar sind, insbesondere bei einfachen Bandstrukturen und Multibandproblemen. Ursache hierfür ist das nahezu kreisförmige Eigenwertspektrum der Systemmatrix. Low-Storage-Runge-Kutta-Verfahren erreichen die erforderliche Genauigkeit nicht und wurden daher nicht weiterverfolgt.

Zur Berücksichtigung von Wechselwirkungsmechanismen wurde die Elektron-Phonon-Wechselwirkung mit longitudinal-optischen Phononen implementiert. Die Gesamtenergie wurde im Heisenberg-Bild als Hamilton-Operator formuliert, und die zugehörigen Heisenberg-Bewegungsgleichungen wurden hergeleitet. Zur Begrenzung der Hierarchieordnung erfolgte eine Korrelationsentwicklung im Phasenraum. Die Phononenanregung wurde über den Fröhlich-Operator entlang der Transportrichtung beschrieben, wobei eine Gleichgewichtsverteilung der Phononen angenommen wurde. Damit mussten lediglich die Bewegungsgleichungen für Ladungsträger sowie Phonon-assistierte Übergänge gelöst werden. Der Formalismus erlaubt die Berücksichtigung von Phononenemission, -absorption und Gedächtniseffekten. Die Implementierung und Validierung des Modells erfolgten anhand einer resonanten Tunneliode [A4].

Zur Anwendung auf komplexere Bauelemente wurden konzeptionelle Erweiterungen vorgenommen. Resonante Tunnelioden wurden mit Multiband-Modellen unter Einbeziehung von Interbandeffekten untersucht. Darüber hinaus wurde das Hochfrequenzverhalten von MGFET-Strukturen analysiert [B3].

Zur Reduzierung des Rechenaufwands wurden zweidimensionale Simulationen auf eindimensionale Probleme abgebildet. Hierzu kam die Mode-Space-Approximation (MSA) zum Einsatz [A5], welche die quantisierten Zustände quer zur Transportrichtung berücksichtigt. Dieser Ansatz ermöglichte eine effiziente und präzise Validierung der Ausgangskennlinienfelder der DGFETs.

Es konnte gezeigt werden,

- dass sowohl ballistische Effekte als auch Wechselwirkungsmechanismen konsistent in den Formalismus integriert werden können. Ebenso lassen sich ortsabhängige ef-

- fektive Massen sowie Inter- und Intrabandeffekte berücksichtigen, wobei Dichtestöße weiterhin eine zentrale Rolle spielen;
- dass die Einführung eines komplexen Potentials eine physikalisch konsistente und numerisch stabile Begrenzung des Rechengebiets erlaubt [A6, A7]. Dadurch werden die bekannten Nachteile konventioneller Verfahren zur Lösung der Wigner-Transport-Gleichung vermieden;
  - dass der Formalismus künftig direkt auf atomistische Beschreibungen zu erweitern wäre, da die erforderlichen Diskretisierungsweiten für die Approximation der Von-Neumann-Gleichung im atomaren Bereich liegen. Besonders geeignet erscheint hierbei die Einbeziehung von Übergangselementen aus Tight-Binding-Methoden;
  - dass wesentliche Erkenntnisse zur numerischen Approximation im Ortsraum gewonnen wurden, die auf direktem Wege aus der Wigner-Transport-Gleichung nicht zugänglich gewesen wären – beispielsweise hinsichtlich der Einbindung räumlich variierender effektiver Massen oder Bandkopplungen [A2, A3]. Durch Transformation in den Phasenraum konnte zudem eine modifizierte Wigner-Transport-Gleichung formuliert werden, die die bekannten Einschränkungen konventioneller Ansätze überwindet;
  - dass die entwickelte Methodik in Verbindung mit der Mode-Space-Approximation (MSA) [A5] vielversprechende Ergebnisse bei der Analyse zeitabhängiger Prozesse in unterschiedlichen Bauelementen zeigt. Sie kann effizient mit anderen numerischen Verfahren kombiniert werden und stellt einen wesentlichen Fortschritt in der numerischen Beschreibung von Quantenbauelementen dar.

Zusammenfassend bietet die vorgestellte Methodik ein hohes Potenzial zur Weiterentwicklung der Modellierung des Ladungsträgertransports in Quantenstrukturen. Sie ermöglicht die Herleitung relevanter Bewegungsgleichungen sowohl im Orts- als auch im Phasenraum und bildet damit eine geeignete Grundlage für weiterführende Anwendungen in der Nanoelektronik und Nanophotonik. Für diese Anwendungsfelder sind Multibandmodelle von zentraler Bedeutung, insbesondere auch im Bereich der Spintronik, wo sie die Beschreibung von Pseudospin-Wechselwirkungen ermöglichen.

Aus den erzielten Ergebnissen ergaben sich basierend auf den Ergebnissen folgende Schwerpunkte für die Forschungsarbeiten:

- Formulierung diskreter Bewegungsgleichungen auf Basis der Tight-Binding-Methode. Hierbei sollen analytische Multibandoperatoren im Schrödinger-Bild verwendet und Matrixoperatoren aus Übergangselementen zwischen Gitteratomen abgeleitet werden. Beide Ansätze werden implementiert, verglichen und evaluiert;
- Weiterentwicklung der Mode-Space-Approximation (MSA) zur Anwendung auf niedrigdimensionale Strukturen mit Fokus auf das Kopplungsverhalten einzelner Eigenzustände quer zur Transportrichtung;
- Integration von Multibandmodellen für spintronische Anwendungen, einschließlich der Modellierung spezifischer Spin- und Pseudospin-Komponenten sowie der Entwicklung geeigneter Entwurfsstrategien für niedrigdimensionale Bauelemente auf Graphenbasis unter Berücksichtigung des Rashba-Effekts.

## Formulierung diskreter Bewegungsgleichungen auf Basis der Tight-Binding-Methode

Durch die Kombination einer Tight-Binding-Festkörperbeschreibung mit der Bewegungsgleichung einer Dichtematrix, die auf denselben Gitterpunkten definiert ist, entsteht ein effizientes, atomistisches Transportmodell [A8, B4]. Neben der Möglichkeit, die Dichtematrix in eine Phasenraumdarstellung wie die Wigner-Funktion zu überführen [B4], bot sich die Beibehaltung der Ortsraumdarstellung in Schwerpunktkoordinaten an [A9, B5, B6]. Diese erlaubt eine einfache Implementierung räumlich variierender Gitterabstände und Hopping-Terme.

Der Wigner-ähnliche Ansatz kann auch in diesem Zusammenhang angewendet werden. Wird die atomare Gitterstruktur mit ungleichen Gitterabständen berücksichtigt, entsteht jedoch das Problem, dass die Wigner-Transformation entlang der Relativkoordinate nicht eindeutig definiert werden kann, da der zugrunde liegende Ortsraum nicht vollständig abgebildet ist. Durch eine Transformation auf ein Gitter mit identischen Gitterabständen lässt sich dieses Problem beheben. Dabei müssen in die Hopping-Terme zusätzliche Phasen integriert werden, die sich aus dem Einteilchen-Hamiltonoperator ergeben. Dies geschieht über einen Exponentialfaktor und ist stark an die Peierls-Transformation angelehnt.

Dadurch erweitern sich die Anwendungsmöglichkeiten von Dichtematrix-Ansätzen erheblich, die üblicherweise eine konstante Diskretisierungsweite für Wigner-Transformationen erfordern und von einer effektiven Masse für räumlich variierende Hopping-Terme ausgehen – eine Annahme, die einer räumlich abhängigen effektiven Masse in konventionellen Modellen entspricht.

Zudem entfällt der Einsatz separater Approximationsmethoden wie etwa der Finite-Volumen-Methode. Die Diskretisierung ergibt sich direkt aus dem Tight-Binding-Hamiltonian sowie aus den Positionen der verwendeten Orbitale. Die Näherungen gehen bereits in dem Tight-Binding-Hamiltonian und den Positionen der verwendeten Ersatzorbitale ein. Eine Unterteilung in Bereiche mit numerischer Flussverknüpfung über deren Grenzen hinaus ist somit nicht erforderlich. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass ein räumlich variierender atomarer Gitterabstand in Heterostrukturen leicht berücksichtigt werden kann, sofern die Kontakte ausreichend lang und die atomaren Gitterabstände in den Kontaktbereichen konstant sind.

Der explizite, zeitaufgelöste Algorithmus zeigt gute Konvergenzeigenschaften und ist im Vergleich zu einer Gleichung vom Typ der Quantum-Liouville-Gleichung bezüglich der Rechenzeit effizient. Zur Validierung wird ein Modell verwendet, in dem lediglich die Wechselwirkung mit dem nächsten Nachbarn berücksichtigt wird. Die abgeleitete Bewegungsgleichung eignet sich gut für Erweiterungen auf komplexere Systeme, insbesondere solche, die weitere Nachbarn oder verschiedene Orbitale umfassen.

Im Gegensatz zu den meisten anderen in der Literatur beschriebenen Dichtematrixansätzen, insbesondere solchen auf Basis der Wigner-Transformation, geht bei der Transformation in Schwerpunktkoordinaten keine Informationen verloren. Informationsverluste treten auf, wenn keine unitäre Transformation zwischen den Koordinatensystemen existiert, was bei Verwendung eines einheitlichen Diskretisierungsgitters im Schwerpunktkoordinatensystem der Fall ist, in dem zwei versetzte Gitter auf ein einheitliches Diskretisierungsgitter zurückgeführt werden. Dieses Problem wird durch die Verwendung beider zueinander versetzter Gitter vermieden [B4].

Die Wigner-Transformation wird ausschließlich lokal an den Bauelementkontakten angewendet, um die Randbedingungen einzubeziehen. Während herkömmliche Methoden nur einen Randterm pro Kontakt benötigen, erfordert das hier vorgestellte Verfahren wegen der beiden zueinander versetzten Diskretisierungsgitter zwei Randterme, damit die Systemmatrix vollen Rang besitzt. Entsprechend müssen Randbedingungen für Dichtematrixelemente formuliert werden, die sich nicht direkt an den Kontaktstellen befinden und daher nicht notwendigerweise der Fermi-Verteilung folgen. Dieses Problem lässt sich durch die Einführung ausgehnter Kontaktbereiche mit konstantem Potential abschwächen. Darüber hinaus sind weiterführende Untersuchungen zum Einfluss des komplexen Absorptionspotentials auf den Formalismus der versetzten Gitterdichtematrix notwendig. Im Vergleich zu herkömmlichen Anwendungen der Wigner- oder Quantum-Liouville-Transportgleichung zeigt sich, dass bereits geringe Variationen der Parameter des komplexen Absorptionspotentials, wie Amplitude oder Länge des Bauelements, einen spürbaren Einfluss haben können.

### **Mode-Space-Approximation zur Anwendung auf niedrigdimensionale Strukturen**

Die Simulation des Quantentransports in „Gate all around“- (GAA)-FETs stellt insbesondere im transienten Fall eine erhebliche Herausforderung dar, weshalb häufig die sogenannte Mode-Space-Approximation zum Einsatz kommen sollte. Für Bauelemente, in denen eine Kopplung zwischen den Moden auftritt, fehlen jedoch geeignete zeitaufgelöste Simulationen. Dieses Defizit ergibt sich daraus, dass Nichtgleichgewichts-Greensche-Funktionsmethoden in der Praxis auf stationäre Analysen beschränkt sind, während bei transienten Dichtematrixansätzen die Berücksichtigung der Modenkopplung bisher meist vernachlässigt wurde.

Dieses Problem wird gelöst, indem die gekoppelte Modenraumnäherung auf einen Tight-Binding-Hamiltonian übertragen und in eine Heisenberg-Bewegungsgleichung für die Dichtematrix integriert wird. Die resultierende Gleichung wird im Ortsraum gelöst, ohne auf eine Wigner-Transformation zurückzugreifen, wodurch restriktive Diskretisierungsmuster entfallen. Stattdessen ergibt sich das Diskretisierungsschema direkt aus der Struktur des verwendeten Hamiltonians. Durch die Kombination der gekoppelten Mode-Space-Approximation mit einer Bewegungsgleichung für die Dichtematrix auf Basis eines Tight-Binding-Hamiltonians entsteht ein effizientes Modell für den stationären und transienten Ladungsträgertransport in Dual-Gate-(DG) und Multigate-(MG)-FETs [A10, A11, A12]. Im stationären, selbstkonsistenten Fall lassen sich sowohl Modenraum- als auch Ortsraum-Ergebnisse eines Referenz-NEGF-Modells reproduzieren. Dabei lässt sich eine präzise Modellierung der Modenkopplung nachweisen, selbst bei Bauelementen mit abrupt veränderlicher Kanalgeometrie.

Während nanoskalige MG-FETs unerwünschte Kurzkanaleffekte erfolgreich reduzieren, beeinflusst die Quantenbegrenzung der Ladungsträger das Verhalten dieser Bauelemente erheblich. Dies kann insbesondere in Hochfrequenzanwendungen zu einer erhöhten Verstärkungskompression führen. Darüber hinaus zeigt die Untersuchung der Kanalverengung bei GAA-FETs im Verstärkerbetrieb, dass trotz unterschiedlicher Stromdichten ein vergleichbares Verstärkerverhalten bei Bauelementen mit und ohne Kanalverengung auftritt.

Die Analyse des Übertragungsverhaltens eines exemplarischen GAA-FETs mit einem "squeezed channel" zeigt zudem, dass die Kanalverengung zu reduzierten Drain-Endströmen führt, ohne jedoch die Nichtlinearität im Verstärkerbetrieb zu erhöhen [A13].

## Entwicklung geeigneter Entwurfsstrategien für niedrigdimensionale Bauelemente

Dank der hohen Flexibilität des vorgestellten Ansatzes lässt sich die Methode auf weitere Hamilton-Operatoren und Materialien übertragen, wie etwa Feldeffekttransistoren auf Graphenbasis [A14]. Die Formulierung in zweiter Quantisierung ermöglicht zudem die Einbeziehung fortgeschrittener Streumodelle, die über die Relaxationszeitnäherung hinausgehen, ebenso wie die Erweiterung auf komplexere Multiband-Strukturen, etwa in der Spintronik und Photonik. Darüber hinaus bietet sich eine Untersuchung der Erweiterung auf eine zeitabhängige Modenraumnäherung an, insbesondere für Bauelemente, bei denen das Potenzial zeitlich stark variiert.

Das phasenraum-basierte Exponentialoperatorschema der Wigner-Transportgleichung wurde erweitert, um die Nichtparabolizität des Energiebandes zu berücksichtigen [A15]. Ein Vergleich mit Referenzergebnissen zeigt, dass sich der Ansatz problemlos auf Bauelemente wie AGNR-FETs anwenden lässt, um sowohl das selbstkonsistente stationäre Verhalten als auch das zeitaufgelöste Verhalten, einschließlich des bei Schaltvorgängen beobachteten Überschwingens des Drain-Endstroms, realistisch zu modellieren.

Darauf aufbauend wird ein effizientes Modell entwickelt [A14], das die zeitaufgelöste Simulation von Armchair-Graphen-Nanoband-Feldeffekttransistoren auf Basis der Wigner-Transportgleichung unter Berücksichtigung nichtparabolischer Energiebandkorrekturen ermöglicht. Durch den Einsatz eines Modenraumsatzes wird der Rechenaufwand erheblich reduziert. Die resultierenden Ladungs- und Stromdichten stehen in gutem Einklang mit Referenzdaten aus einer Tight-Binding-Formulierung der Nichtgleichgewichts-Greenschen-Funktion im stationären Fall. Die Selbstkonsistenz sowie die transienten Fähigkeiten des Ansatzes werden am Beispiel des THz-Schaltverhaltens demonstriert. Darüber hinaus eignet sich die Methode hervorragend zur Analyse von Nanoröhren oder Nanobändern aus unterschiedlichen Materialien und zur Erweiterung auf Interbandtransportphänomene.

Nach der erfolgreichen Modellierung des Ladungsträgertransports in Halbleiterstrukturen wurde der Ansatz auf Systeme mit Spin-Bahn-Kopplung erweitert, mit dem Ziel, sowohl die Rechenzeiteffizienz als auch die Modellgenauigkeit zu verbessern. Als exemplarisches System wurde der Rashba-Effekt ausgewählt, dessen Stärke durch materialspezifische Eigenschaften (insbesondere die Brechung der Inversionssymmetrie) sowie durch eine externe Gatespannung beeinflusst werden kann.

Ausgehend vom Rashba-Hamiltonoperator ergeben sich zwei gekoppelte Transportgleichungen für Spin-up- und Spin-down-Zustände. Diese werden mithilfe der Mode-Space-Approximation gelöst. Dabei wirken elektrische Felder, hervorgerufen durch die externe Gatespannung, transversal zur Transportrichtung. Dies gilt analog für einbezogene magnetische Felder, die ebenfalls senkrecht zur Transportrichtung und dem elektrischen Feld stehen. Als Beispielsystem wurde ein Quantendraht untersucht. Wie erwartet, konnte zunächst gezeigt werden, dass die Kopplungsstärke zwischen den Spin-Zuständen über die Rashba-Kopplungskonstante  $\alpha_R$  steuerbar ist.

Für einen Spin-Transistor, der aufgrund der Mode-Space-Approximation als eindimensionales Transportproblem beschrieben werden kann, lässt sich das Strom-Spannungskennlinienfeld durch elektrische und magnetische Felder beeinflussen. Die Resultate ent-

sprechen dabei den theoretischen Erwartungen. Das Ausgangskennlinienfeld in Abhängigkeit von der Gate-Spannung entspricht qualitativ dem eines konventionellen Feldeffekttransistors und der Drain-Strom kann durch das angelegte magnetische Feld gesteuert werden.

Ein unerwartetes Problem zeigte sich jedoch bei der Berechnung der Stromdichte: Bei einer Drain-Source-Spannung von  $U_{DS}=0V$  ergibt sich eine negative Stromdichte, obwohl physikalisch ein Wert von Null erwartet wird. Dieses Verhalten trat verstärkt auf, wenn die Kopplung durch den Rashba-Effekt zu den Kontakten hin diskontinuierlich modelliert wurde. Wird anstelle der diskontinuierlichen Modellierung hinsichtlich der Spin-Bahn-Kopplung ein realistisches Modell eingeführt, bei dem die Kopplungsstärke in Richtung der Kontakte gemäß Feldberechnungen kontinuierlich abklingt, dann reduziert sich die negative Stromdichte bei  $U_{DS}=0V$  bereits um etwa eine Größenordnung. Als Ursache wurde die durch die numerische Approximation fehlende Hermitizität des diskreten Hamilton-Operators als auch der Einfluss der verwendeten Randbedingungen identifiziert, da die exakte Aufteilung der Zustände zwischen Spin-up und Spin-down am Eintritt des Kanals ohne vorherige Diagonalisierung des Hamiltonoperators nicht eindeutig vorgegeben werden kann. Zurzeit wird die Symmetrisierung des diskreten Hamilton-Operators realisiert. Anschließend wird eine Diagonalisierung des Hamiltonoperators in Bezug auf den Dichtekanal, also ohne Einführung von Quasiteilchen wie bei der Bogoliubov-Transformation, durchgeführt, um auf dieser Basis konsistente Verteilungsfunktionen zu definieren. Die Verteilung der Spin-Zustände an den Rändern kann dann eindeutig in Bezug auf einzukoppelnde Teilchenwellen vorgegeben werden.

### Zusammenfassung der Ergebnisse

Im Projekt wurde eine innovative numerische Methodik entwickelt, um den zeitabhängigen Ladungsträgertransport in Quantenbauelementen effizient und präzise zu modellieren. Basierend auf der Von-Neumann-Gleichung in Schwerpunktkoordinaten ermöglicht die Methode die konsistente Behandlung von Übergangsbedingungen mittels Finite-Volumen-Ansätzen und eignet sich sowohl für stationäre als auch zeitabhängige Analysen.

Die Validierung erfolgte durch Vergleich mit etablierten Referenzmethoden wie NEGF, wobei insbesondere Multibandmodelle wie das MEF- oder Kane-Modell erfolgreich integriert wurden. Herausforderungen bei Heterostrukturen, wie Dichtestöße oder stark variierende effektive Massen, konnten durch geeignete numerische Strategien adressiert werden.

Darüber hinaus wurde die Anwendung auf niedrigdimensionale Bauelemente wie GAA-FETs, Graphen-Nanobänder und spintronische Systeme mit Rashba-Kopplung demonstriert. Hierbei wurden Mode-Space-Approximationen weiterentwickelt und in Kombination mit Tight-Binding-Ansätzen eingesetzt.

Die Resultate bestätigen das Potenzial der Methodik zur Simulation komplexer Quantentransportphänomene in Nanoelektronik, Spintronik und Photonik. Zukünftige Arbeiten sollen die Tight-Binding-Modellierung weiter ausbauen, die Mode-Space-Technik auf dynamische Prozesse erweitern und gezielt spintronische Anwendungen untersuchen.

## Umgang mit Forschungsdaten

Im Rahmen des Projekts wurde der Umgang mit Daten gemäß den Richtlinien der DFG und der TU Dortmund sichergestellt. Urheberrechtsbestimmungen und Datenschutz wurden beachtet, und potenzielle Risiken identifiziert und minimiert.

Die numerisch gewonnenen Forschungsdaten wurden validiert, während Rohdaten während der Simulation erfasst wurden. Diese dienten zur Erstellung von Diagrammen und Bildern. Die Forschungswerkzeuge ermöglichten die Generierung digitaler Rohdaten sowie aktueller Metadaten wie Simulationsbedingungen. Die Roh- und Metadaten wurden auf einem Network Attached Storage (NAS)-System gespeichert, dessen Kosten durch die Grundfinanzierung der Fakultät Elektrotechnik gedeckt wurden. Das NAS ermöglichte eine gemeinsame Nutzung innerhalb der Forschungsgruppe, während ein sicherer Zugang über VPN erfolgte, und dient der Archivierung für mindestens zehn Jahre.

Nach Analyse und Archivierung wurden die Daten iterativ validiert, um Plausibilität sicherzustellen. Unplausible oder lückenhafte Daten führten zu einer Neuplanung des Simulationsexperiments, bis reproduzierbare Ergebnisse vorlagen.

## 4 Veröffentlichte Projektergebnisse

### 4.1 Kategorie A – Fachaufsätze in Peer Review-Zeitschriften, Beiträge zu Konferenzen mit Peer Review oder Sammelbänden sowie Buchpublikationen

[A1] L. Schulz and D. Schulz, „Numerical Analysis of the Transient Behavior of the Non-Equilibrium Quantum Liouville Equation“, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 17, no. 6, pp. 1197–1205, 2018. DOI: 10.1109/TNANO.2018.2868972.

[A2] L. Schulz and D. Schulz, „Formulation of a phase space exponential operator for the Wigner transport equation accounting for the spatial variation of the effective mass“, *J Comput Electron*, vol. 19, no. 4, pp. 1399–1415, 2020. DOI: 10.1007/s10825-020-01551-0.

[A3] L. Schulz and D. Schulz, „Multiband Phase Space Operator for Narrow Bandgap Semiconductor Devices“, in *2020 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, pp. 383–386, 2020. DOI: 10.23919/SISPAD49475.2020.9241595.

[A4] L. Schulz, B. Inci, M. Pech, and D. Schulz, „Subdomain-based exponential integrators for quantum Liouville-type equations“, *J Comput Electron*, vol. 20, no. 6, pp. 2070–2090, 2021. DOI: 10.1007/s10825-021-01797-2.

[A5] L. Schulz and D. Schulz, „Time-Resolved Mode Space based Quantum-Liouville type Equations applied onto DGFETs“, in *2020 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, pp. 331–334, 2020. DOI: 10.23919/SISPAD49475.2020.9241644.

[A6] L. Schulz and D. Schulz, „Boundary Concepts for an Improvement of the Numerical Solution with regard to the Wigner Transport Equation“, in *2018 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, pp. 75–78, 2018. DOI: 10.1109/SISPAD.2018.8551736.

[A7] L. Schulz and D. Schulz, „Complex Absorbing Potential Formalism Accounting for Open Boundary Conditions Within the Wigner Transport Equation“, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 18, pp. 830–838, 2019, DOI: 10.1109/TNANO.2019.2933307.

[A8] M. Pech, A. Abdi, and D. Schulz, „Density Matrix Based Transport in Heterostructure Devices Utilizing Tight-Binding Approaches“, in *2024 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, pp. 01–04, 2024. DOI: 10.1109/SISPAD62626.2024.10732994.

[A9] M. Pech, J. Neu, and D. Schulz, „Analysis of Transient Quantum Transport in Nanoscale Devices Using Density Matrix Methods“, in *2025 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, Grenoble, France, 2025.

[A10] M. Pech and D. Schulz, „Investigating the impact of quantum confinement on the THz behavior of Nanoscale FinFETs“, *Solid-State Electronics*, vol. 210, 108808, 2023. DOI: 10.1016/j.sse.2023.108808.

[A11] M. Pech and D. Schulz, „THz gain compression in nanoscale FinFETs“, *Solid-State Electronics*, vol. 199, 108485, 2023. DOI: 10.1016/j.sse.2022.108485.

[A12] M. Pech, A. Abdi, and D. Schulz, „Time-resolved analysis of dual-gate FETs with non-parabolic energy dispersion for THz applications“, *J. Appl. Phys.*, vol. 135, no. 7, 074303, 2024. DOI: 10.1063/5.0188752.

[A13] M. Pech and D. Schulz, „Coupled mode effects in the stationary and transient behavior of squeezed channel field-effect transistors“, *J. Appl. Phys.*, vol. 138, no. 12, 125705, 2025. DOI: 10.1063/5.0287928.

[A14] M. Pech and D. Schulz, „Switching Behavior of Graphene Nanoribbon FETs“, in *2024 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, pp. 01–04, 2024. DOI: 10.1109/SISPAD62626.2024.10732903.

[A15] M. Pech and D. Schulz, „Transient Effects of Band Non-Parabolicity in DGFETs for RF Applications“, in *2023 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, pp. 253–256, 2023. DOI: 10.23919/SISPAD57422.2023.10319483.

## 4.2 Kategorie B – Jede weitere Form öffentlich gemachter Ergebnisse

[B1] L. Schulz, D. Schulz „Subdomain Algorithm for the Numerical Solution of the Liouville-von-Neumann-Equation“, *International Workshop on Computational Nanotechnology (IWCN)*, pp. 57–58, Evanston, Illinois, USA, 2019. Available at: [https://in4.iue.tuwien.ac.at/pdfs/iwce/iwcn2\\_2019/IWCN\\_2019\\_057-058.pdf](https://in4.iue.tuwien.ac.at/pdfs/iwce/iwcn2_2019/IWCN_2019_057-058.pdf).

[B2] L. Schulz and D. Schulz, „Approximation of Multiband Hamiltonians for the Wigner Equation“, *International Workshop on Computational Nanotechnology (IWCN)* [Online], Daejeon, South Korea, 2021.

[B3] L. Schulz, M. Pech, and D. Schulz, „Dynamic Modelling of Quantum Transport within MGFETs“, *International Workshop on Computational Nanotechnology (IWCN)* [Online], Daejeon, South Korea, 2021.

[B4] A. Abdi, M. Pech, and D. Schulz, „Incorporation of the tight binding hamiltonian into quantum liouville-type equations“, *International Workshop on Computational Nanotechnology (IWCN)*, Barcelona, Spain, 2023.

[B5] M. Pech and D. Schulz, „Investigation of a staggered grid formulation of the Wigner transport equation for complex band structures“, *International Wigner Workshop (IWW)*, Barcelona, Spain, 2023.

[B6] M. Pech and D. Schulz, „Time-resolved Quantum Transport in Open Systems: Phase Versus Real-Space Methods“, presented at *the International Workshop on Computational Nanotechnology (IWCN)*, Salt Lake City, USA, 2025. Available at: [https://iwcn2025.com/wp-content/uploads/2025/05/iwcnbookofabstracts\\_2025v4-2.pdf](https://iwcn2025.com/wp-content/uploads/2025/05/iwcnbookofabstracts_2025v4-2.pdf).